

Факультет вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова

Ю.И.Ожигов

КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТЕР

Издательство Московского университета



Факультет вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова

Ю.И.Ожигов

КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТЕР

Учебное пособие

2-е издание, дополненное и переработанное

Издательство Московского университета • 2023

Печатается по решению Редакционно-издательского совета факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М. В. Ломоносова

Рецензенты:

С. Н. Молотков — д-р физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник Института физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна РАН Л. Е. Федичкин — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры теоретической физики им. Л. Д. Ландау Московского физико-технического института

Ожигов, Ю.И.

О-45 Квантовый компьютер: учебное пособие. — 2-е изд., доп. и перераб. — Москва : Издательство Московского университета, 2023. — 326 : ил., [1] с. — Электронное издание сетевого распространения. — (Библиотека факультета ВМК МГУ).

ISBN 978-5-19-011914-5 (e-book)

В книге о грандиозном проекте, условно называемом «квантовый компьютер», сформулировано ограничение аппарата стандартной квантовой механики соотношением «сложность квантового состояния — точность его описания». Внимание уделено роли квантового компьютера в теории биологической эволюции и квантовому подходу к социальным процессам.

Второе издание дополнено главами, посвященными новому математическому аппарату для квантового компьютера, основанному на алгоритмах и использующему биологическую эвристику. В книге даны задачи для самостоятельной работы.

Издание предназначено для студентов бакалавриата, специалитета и аспирантов, обучающихся по направлению 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а также для читателей, интересующихся точной теорией микромира и желающих познакомиться с современным подходом к физике сложных процессов.

УДК 004+530.145(075.8) ББК 32.971.329.2+22.315я73

© Ю.И.Ожигов, 2023

- © Факультет вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М.В. Ломоносова, 2023
- © Издательство Московского университета, 2023

ISBN 978-5-19-011914-5 (e-book)

Оглавление

	Пpe,	дислов	ие	10
	Пpe,	дислов	ие ко второму изданию	14
1	Алг	горитм	ы, вычисления и компьютеры	17
2	Вве	дение	в квантовую механику	23
	2.1	Квант	совые состояния. Формализм Дирака	24
	2.2	Измер	рение. Матрица плотности	27
	2.3	Компо	озитные системы	32
		2.3.1	Частичные измерения. Смешанные состояния	34
		2.3.2	Теорема Шмидта	38
		2.3.3	Парадокс квантовой энтропии	40
	2.4	Физич	неские величины как наблюдаемые	40
		2.4.1	Наблюдение координаты	41
		2.4.2	Квантовый оператор Фурье и наблюдение импульса	42
		2.4.3	Наблюдение момента импульса и спина	43
		2.4.4	Одновременное наблюдение нескольких величин	44
	2.5	Унита	рная эволюция	46
		2.5.1	Уравнение Шредингера и решение задачи Коши для него	46
		2.5.2	Уравнение Шредингера для матрицы плотности	47
		2.5.3	Матричная динамика	48
		2.5.4	Интегралы по путям	48
	2.6	Открн	ытая квантовая система. Квантовое основное уравнение КОУ	51
	2.7	Фейнм	лановский квантовый компьютер	53
	2.8	Квант	овые гейты	56

2.9	Алгоритм Гровера	59
2.10	Алгоритм Гровера как квантовая модель сложного процесса	61
2.11	Обратимость операций	63
2.12	Алгоритм Залки-Визнера	64
2.13	Реалистическая схема квантового компьютера	66
	2.13.1 Ядро операционной системы квантового компьютера	68
	2.13.2 Перспективы квантового программирования	69
	2.13.3 Дуальность квантового программного обеспечения	70
Кон	ечномерные модели КЭД	73
3.1	Моды электромагнитного поля	74
3.2	Модель Джейнса-Каммингса	75
3.3	Декогерентность в модели Джейнса-Каммингса	79
3.4	Квантовое бутылочное горлышко	80
3.5	Модель Тависа-Каммингса	82
3.6	Темные состояния кубитовых систем	83
3.7	Термическая стабилизация	85
3.8	Термические аттракторы для двух атомов	88
3.9	Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда	89
3.10	Запутывающий гейт в модели JCH	90
3.11	Расчет фазовых сдвигов	91
3.12	Реализация coCSign	92
3.13	Реализация однокубитных гейтов	94
3.14	Качество реализации гейта coCSign	95
3.15	О гейтовой модели вычислений	95
3.16	Оптическая проводимость графов	96
	3.16.1 Оптическое определение изоморфизма графов	97
	3.16.2 Оптическая полупроводимость	98
3.17	Коллективные осцилляции	98
	3.17.1 Эффект DAT	100
3.18	Системы много-уровневых атомов	102

	3.19	Оптич	иеский отбор темных состояний	. 104		
	3.20	Много	уровневый случай	. 109		
4	Ади	абати	ческие квантовые вычисления	113		
		4.0.1	Адиабатическая теорема	. 113		
		4.0.2	Адиабатическая форма алгоритма Гровера	. 118		
		4.0.3	Построение гамильтонианов для адиабатических вычислений .	. 122		
5	Квантовое дальнодействие 127					
	5.1	Квант	овая телепортация	. 134		
	5.2	Распр	еделенные квантовые вычисления	. 136		
		5.2.1	Одностороннее управление	. 137		
		5.2.2	Квантовые бифотонные сигналы	. 137		
6	Ква	нтовы	й детерминизм	143		
	6.1	Дискр	етность амплитуд	. 147		
	6.2	Равно	весные состояния	. 149		
	6.3	Квант	ы амплитуды	. 151		
	6.4	Кванты амплитуды в алгоритме Гровера				
	6.5	Конст	анта масштабируемости и ее нахождение	. 157		
		6.5.1	Зерно амплитуды как причина измерений	. 159		
		6.5.2	Понятие о Главном Компьютере	. 159		
	6.6	6.6 Соотношение неопределенностей "сложность - точность" для кванто- вых состояний				
	6.7	Главн	ый Компьютер	. 163		
	6.8	Сложи	ность гамильтонианов	. 164		
		6.8.1	Простые примеры	. 167		
		6.8.2	Экспериментальное нахожение константы Q	. 168		
	6.9	Вывод	цы	. 171		
	6.10	О пер	спективах квантового детерминизма	. 172		
7	Пра	вило	отбора: путь в пост-квантовую механику	175		
	7.1	Рейти	нг базисных состояний - нулевое приближение	. 176		

	7.2	Страт	ификация рабочих состояний по родительству	178
		7.2.1	Как избежать использования матрицы плотности	179
	7.3	Прост	ейший алгоритм отбора, основанный на рейтинге	181
	7.4	Рейти	нг базисных состояний - уточнение	182
	7.5	Улучи	ценный алгоритм отбора рабочей области	183
	7.6	Дальн	ейшие усовершенствования: метод одного куста	185
	7.7	Дальн ские р	ейшие усовершенствования: усложнение популяции и практиче- рекомендации	186
	7.8	Квант	овые нейронные сети	187
	7.9	Метод	сотбора и пост-квантовая теория	191
8	Квантовые мета-модели 195			
	8.1	О мет	а-моделях реального мира	195
	8.2	Огран	иченность математического моделирования	198
	8.3	Химич	ческий квантовый компьютер	200
	8.4	Модис	фикация с движением атомов. Черные состояния	204
		8.4.1	Черные состояния пары атомов в пространстве	206
	8.5	Относ	ительная индивидуальность электронов	206
	8.6	Вывод	цы	210
	8.7	Состо	яния как картинки	211
	8.8	Чернь	ие состояния	213
	8.9	Ассоц. уровне	иация - диссоциация двух искусственных водородоподобных двух- евых атомов	213
		8.9.1	Простейшая модель ассоциации - диссоциации без явных элек- тронов	216
		8.9.2	Простейшая модель динамики электронов при ассоциации - дис- социации	218
		8.9.3	Химические реакции в среде	225
	8.10	Немар	оковские процессы	230
		8.10.1	Эволюция вектора состояния вместо квантового основного урав- нения	231
		8.10.2	Случай распределенной атомной системы	234
		8.10.3	Выводы	235

9	Ква	нтовая метафизика 2	39
	9.1	Введение	239
	9.2	Квантовая био-политика	244
	9.3	О социальных эффектах, объяснимых в рамках двухуровневой модели	247
	9.4	Индивиды	250
		9.4.1 Уточнение основных понятий	251
	9.5	Квантование социума	252
	9.6	Естественный отбор и социальный рейтинг	256
	9.7	От индивида к личности	258
	9.8	Дискуссия	259
	9.9	Выводы	261
10	Диа	алоги специалиста с дилетантом 2	63
	10.1	Диалог 1	263
		10.1.1 Раунд 1. Околонаучный	263
		10.1.2 Раунд 2. Около-биологический	267
		10.1.3 Раунд третий, решающий, посвященный физике	270
	10.2	Диалог 2	275
		10.2.1 Преамбула	275
		10.2.2 Где кончается квантовая теория?	277
	Закл	пючение для тех, кто дочитал до конца	289
	Благ	годарности	292
\mathbf{A}	При	иложение 2	93
	A.1	Задания для студентов	293
		А.1.1 Квантовый гармонический осциллятор	293
		А.1.2 Приближение вращающейся волны	294
		А.1.3 Конечномерные модели КЭД в полостях	296
		А.1.4 Конечномерные задачи химии	296
	A.2	Нижняя массовая оценка квантовой сложности	297
	A.3	Система гармонических осцилляторов	299
	A.4	Фотоны - квазичастицы электромагнитного поля	303

A.5	Явный вид темных состояний в модели ТС
A.6	Энтропия
A.7	Конструктивный математический анализ
A.8	Реализация квантового преобразования Фурье на квантовом компьютере315
A.9	Спонтанная эмиссия фотонов темными состояниями

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 ценность представляют не абстрактные вычисления, а управление сложными естественными процессами. 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. Для этого нужно иметь некий сравнительно простой аналог реальной системы, который мы могли бы построить своими руками, и который бы имитировал в существенных чертах поведение природного прототипа. 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 область, 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 и алгебраический аппарат, привычный физикам 20 века, не является вполне адекватным реальности. Например, быстрые квантовые алгоритмы, существование которых вытекает из представлений копенгагенской квантовой теории, не удается реализовать на практике. Это говорит не просто о существовании фундаментальных ограничений на формализм стандартной квантовой теории; для сложных процессов микромира необходимо ее существенное реформирование. Адекватное описание таких процессов требует пост-квантовой теории, основанной в большей степени на алгоритмах.

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 приводятся основные сведения по алгоритмам и вычислениям.

Во второй 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 [3], 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.

В третьей главе описывается конечномерная модель КЭД - квантовой электродинамики Тависа-Каммингса-Хаббарда (TCH), 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 TCH 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.

Четвертая глава посвящена специфической форме квантовых вычислений, основанной на знаменитой адиабатической теореме.

Пятая глава посвящена удивительному феномену квантового дальнодействия, которое трактуется как предвестник перехода от копенгагенской квантовой теории к пост-квантовой детерминистической теории сложных систем. Мы рассмотрим эксперимент, фиксирующий нарушение неравенств Белла, и связанную с ним квантовую нелокальность, свидетельствующую о том, что детерминистическое описание многочастичных систем обязано быть нелокальным.

Тема шестой главы 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. Здесь лежит граница применимости стандартной квантовой теории.

Последняя глава содержит два диалога вымышленных персонажей, которые обсуждают очень важные вещи, которые не вошли в основной текст из-за неоднозначности формализации. 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.

В Приложения я поместил ряд тем, которые носят в большей мере технический, нежели принципиальный характер, а также и задачи, которые рекомендуются к самостоятельному изучению. Они предназначены для читателей, планирующих участвовать в проекте квантового компьютера в качестве математиков и программистов.

Наконец, Заключение подводит итог и намечает ближайшую перспективу развития квантового компьютера, которая, в общих чертах, уже видна.

В книге много нового материала; большая часть так или иначе опубликована в научных журналах, но здесь изложена единым образом.

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, детальное описание программной части которого 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.

Предисловие ко второму изданию

Первое издание книги было посвящено, в основном, традиционной квантовой теории, в рамках которой квантовый компьютер трактовался как наноэлектронное устройство с квантовой логикой операций. Эта теория, которую можно условно назвать теорией квантовых гаджетов, опиралась на стандартный аппарат гильбертовых пространств и эрмитовых операторов и не предполагала никаких ограничений, будучи совершенной с математической точки зрения и замкнутой в себе.

Второе издание содержит главы, посвященные квантовой теории сложных систем, фактически новой дисциплине, которую можно назвать пост-квантовой теорией. Ее целью является исследование живого на квантовом уровне. Сам квантовый компьютер является путем в эту новую область, и по этому пути предстоит пойти для того, чтобы биология перестала быть огромным набором фактов и трудно формализуемых тезисов и обрела надежный теоретический фундамент и прочную связь с физикой микромира.

Второе издание книги существенно переработано и дополнено в соответствии с главной целью. Я старался более точно очертить ту границу, за которой копенгагенская квантовая теория теряет силу и должна заменяться другой, пока еще не созданной пост-квантовой теорией сложных систем.

Более подробно описан метод квазичастиц и канонического преобразования, на основе которого дается определение понятия сложности квантового состояния. Формулируется принципиальное соотношение между сложностью и точностью описания квантового процесса, ограничивающее масштабирование фейнмановского квантового компьютера. Описан метод моделирования немарковских квантовых случайных процессов. Добавлены результаты численного моделирования работы квантового запутывающего гейта и некоторых других процессов, расширено описание химического квантового компьютера.

Изложение основ квантовой теории снабжено дополнительными деталями, которые облегчат усвоение материала начинающими. Вот список новых глав, введенных во второе издание данной монографии.

1) Первая глава, посвященная алгоритмам.

2) Четвертая глава, посвященная адиабатическим вычислениям.

3) Седьмая глава посвящена новому математическому аппарату для квантовой теории сложных систем, который основан на алгоритмах. Прежде всего это метод отбора рабочей области при компьютерном моделировании сложных процессов. Здесь же включено понятие квантовой нейронной сети.

4) В восьмой главе описываются модификации конечномерных моделей КЭД, предназначенные для описания химических процессов - ассоциации и дисссоциации простейших молекул.

5) В девятой главе развивается представление о мета-моделях для более сложных объектов биологической природы, и даже таких, которые традиционно принадлежат гуманитарной сфере. Это элементы квантовой социологии и квантовой политики.

Оглавление

6) В десятой главе, посвященной диалогам специалиста и дилетанта, добавлен новый параграф. В этой главе, в немного вольном стиле - как дискуссия двух вымышленных персонажей, излагаются гипотезы более общего характера относительно вещей, выходящих за пределы основного обсуждения. Однако, эти вещи очень важны для понимания места квантового компьютера в науке как таковой. Диалоги строятся вокруг основного изложения, но также могут представить интерес и сами по себе.

Квантовая теория сложных систем предполагает новый математический аппарат. Аналитические методы и линейная алгебра, замечательно работающие для гаджетов, уже не могут быть просто экстраполированы на реальные сложные процессы в живой материи. Здесь нужен иной, алгоритмический подход, эвристика которого в большой мере заимствована из биологии. Обеспечение органической связи этого нового математического аппарата с традиционными методами старой квантовой теории - важнейшая задача, решению которой посвящены новые главы книги.

Эта задача масштабна и требует ряд промежуточных шагов. Я попробовал яснее представить себе препятствия, которые неизбежно встретятся на этом пути; главное из них - устаревшее представление о бесконечностях. Физика сложных систем требует иной математики по сравнению с физикой систем простых, которые были предметом исследований в 20 веке, и которая ныне превратилась в прибористику - науку о квантовых приборах.

Аналитический аппарат, связанный с абстракцией бесконечности, должен играть в сложных системах лишь вспомогательную роль, а не главную, как в прибористике. На первый план неизбежно выдвигается компьютерный расчет и моделирование, так что идеология вычислений оказывается главной и в квантовой операционной системе, а ограничения этой идеологии - например, ограниченность всех используемых величин, становится в один ряд с физическими законами. Эта точка зрения непривычна для физиков, но такой поворот неизбежен, и я постарался навести мосты между традиционным, аналитическим подходом и новым, который можно назвать алгоритмическим, или конструктивистским.

Алгоритмический подход в физике сложных процессов - это программирование. Не численные методы в традиционном понимании - эти методы направлены на решение уравнений; развитие алгоритмов, предсказывающих поведение сложной системы: многих молекул и электромагнитного поля, химических превращений, ядерных процессов, биологии. Традиционная квантовая физика требует экспоненциально больших вычислительных ресурсов; для моделирования одного моля здесь требуется порядка $O(10^{10^{23}})$ ячеек памяти. Такого числа нет в природе, это - не тот путь, по которому мы должны идти! Борьба с экспонентой - настоящий вызов математике, и его можно принять лишь если мы будем опираться не только на уже созданный математический аппарат, но на глубокий физический смысл рассматриваемых явлений.

Квантовый компьютер в новом понимании есть совокупность всех средств, направленных н преодоление экспоненциального барьера сложности, мешающего нам управлять биологическими объектами. Эта книга посвящена математическим средствам такого рода, самым общим из которых являются алгоритмы.

Важная особенность алгоритмического подхода состоит в его большей индивидуализации. Язык алгоритмов более гибок, чем язык формул. Квантовый механизм сложных систем в гораздо большей степени приспособлен к индивидуальному прогнозу, чем аналитический язык стандартной, копенгагенской квантовой теории. В по-настоящему сложных системах, таких как живые организмы, есть удивительного типа детерминированность в классической форме, выраженная в молекуле ДНК, индивидуальной для любого живого существа. Фундаментальная статистическая форма копенгагенской квантовой теории явно не способна породить такого рода детерминизм без серьезной модификации своих основных тезисов, суть которых должна, тем не менее, полностью сохраниться при ее распространении на сложные системы. Подход к такой противоречивой задаче дает проект квантового компьютера.

По моему глубокому убеждению, основы квантового компьютера и квантовой информатики должны затрагивать и предметы, которые традиционно относятся к гуманитарной сфере. Речь, прежде всего, идет о психологии и социальных процессах, выражающих коллективную психологию. В данной книге не раскрывается тема квантового подхода к психологии, но даются некоторые начальные тезисы такого подхода, а также иллюстрирующие примеры. Квантовая биология также не рассматривается здесь хоть сколько нибудь детально; эта тема весьма велика и ей должна быть посвящена другая книга. Здесь мы опишем только основы нового математического аппарата, нужного для продвижения квантового подхода к этим огромным дисциплинам.

Исправлен также ряд замеченных опечаток и неточностей.

Глава 1

Алгоритмы, вычисления и компьютеры

Задача науки - управление окружающим миром, включая и само человеческое общество. Для управления необходимо знать, как управляемый объект будет реагировать на то или иное воздействие, то есть нужно уметь предсказывать события до их фактического наступления. Знания о мире - физика - полезны потому, что они помогают нам предсказывать будущее. Гигантский объем знаний требует упорядочения; для этого служит особая часть физики - математика. Исторически сложилось разделение знаний на множество разделов, число которых постоянно растет, но надо помнить, что все это фактически является физикой; просто большая часть ее пока не освоена математическим аппаратом и потому далеко не всегда дает нам эффективное управление теми процессами, которые формально принадлежат этой части.

Вычисления, для реализации которых создается квантовый компьютер, следует рассматривать как фрагменты биологических сценариев - в том случае, если мы стремимся описать саму жизнь на квантовом уровне. Практика показывает, что в области сложных систем у нас нет никакой иной эвристики, кроме биологической, и эта эвристика всегда будет иметься в виду, когда мы говорим о квантовых алгоритмах. Это - алгоритмы, моделирующие те или иные стороны жизни.

Достижения 20 века связаны с математикой бесконечностей, прежде всего - с бесконечно малыми - математическим анализом, а также с алгеброй. Этот аппарат подходит для сравнительно не сложных систем в реальном мире: твердых тел или сплошных сред. Для первых есть хорошие приемы, основанные на так называемом каноническом преобразовани. Сплошные среды можно представить как набор не сильно связанных частиц - атомов. В их поведении на микроскопическом уровне царит видимый хаос, что дает возможность только сравнительно приближенного описания с помощью дифференциальных уравнений, типа Навье-Стокса. То же относится и к электромагнитному полю - в макроскопическом масштабе. Если динамика точечной частицы или твердого тела в пустом пространстве хорошо изучена, то уже для жидкостей далеко не все ясно.

Тем более трудно познать законы систем огромной сложности, в которых есть видимый порядок; например живых организмов. Здесь формулы, как правило, вообще бесполезны, и нужно использовать более искусное средство. Таким средством являются алгоритмы. Алгоритм - это четкое описание последовательности формальных действий, которые надо было бы произвести над изучаемым объектом (над его формальным математическим образом), чтобы привести его в то состояние, в которое он сам бы перешел в реальности, если бы мы ничего не делали с этим объектом физически. Мы хотим воспроизвести действие законов Природы своими руками; если нам это удается, это значит, что мы познали эти законы, если нет, значит, что-то очень важное от нас ускользнуло. Но мы не можем вмешаться в течение вещей в реальном мире, потому что наше вмешательство исказит действие законов. Нам нужен не реальный объект, а его образ, некая копия, построенная нашими руками, и над которой мы обладали бы полной властью (в отличие о реального объекта, над которым мы полной власти не имеем).

Математики прошлого довольствовались абстрактными образами, возникающими в человеческом мозге; я не исключаю, что в будущем мы достигнем такого искусства, что обойдемся этими - абстрактными вещами. Но сейчас это не так, и образ интересующего нас объекта должен быть конкретно - физическим устройством. Оно и называется компьютером. Компьютер - это рукотворный образ окружающего мира. Мы можем настраивать его так, чтобы удобно было изучать какой-то определенный объект или явление, например, бактерию кишечной палочки, или финансовые документы предприятия. Тогда мы сможем работать с компьютером, полностью его контролируя, так что в результате получим искомое управление эволюцией реального объекта. Процесс выполнения инструкций алгоритма есть *вычисление*.

Итак, вычисление - это модель какого-то реального процесса, а компьютер - модель того объекта, который участвует в данном процессе. Любой закон природы есть инструкция к составлению некоего алгоритма моделирования, а формула есть специфическая, но не универсальная форма записи алгоритма. Изобретая алгоритмы и программируя, мы стремимся уподобиться Тому, кто создал реальный мир. И так же, как и Он создал Порядок, называемый Космосом, мы тоже избегаем противоположного явления - хаоса.

Как убедиться, что построенный нами алгоритм верно отражает реальность? Если бы речь шла об одной единственном числе, например, о спектральной линии атома, мы могли бы сравнить найденное теоретически значение этого числа с экспериментом. Но если нас интересует не просто число, а динамический сценарий? Важно не просто получить результат сценария, но и убедиться, что этот результат достоверен. Один единственный результат может случайно совпасть с реальностью, или даже явиться следствием подгонки в виде оптимизации параметров задачи. В простых системах есть статистический анализ и мы можем подтвердить найденное значение, повторяя эксперимент многократно. Для сложных систем, обладающих уникальностью, этот метод не годится.

Мы должны не просто получить результат, а воспроизвести реальную эволюцию в виде своеобразного видеофильма, чтобы убедиться в надежности полученного конечного результата. В сложных системах число возможных исходов немыслимо велико и только динамический сценарий, реализованный в форме видеофильма, может обеспечить надежность нашей модели реальности. Здесь численная точность неизбежно отойдет на второй план. Интересно ли будет наблюдать видео хаоса? Разумеется, нет! Наш видеофильм должен быть содержательным как сама жизнь - только в этом случае он будет иметь смысл. Мы должны изучать порядок и только порядок, отРис. 1.1: Моделирование реального процесса на квантовом компьютере, состоящем из классической части, непосредственно контактирующей с человеком, и квантовой части, имитирующей реальную систему



брасывая в сторону хаос.

Беспорядок, царящий в мире сложных процессов - кажущийся. Теория вероятностей есть первый этап упорядочения этого хаоса, упорядочения в виде законов колмогоровской теории верятностей. Но это - лишь первый этап. За любой вероятностью стоит некий объект - квантовое состояние микромира, который и определяет эволюцию этой вероятности во времени. Этот этап изучается квантовой механикой. Ее развитие в виде проекта квантового компьютера поможет нам изгнать хаос из наших представлений о Природе, очистит наши знания от беспорядка и сделает нас сильнее.

Теперь, после неформального объяснения, мы перейдем к точным определениям. Пусть у нас имеется некое устройство, называемое *компьютером*, которое может находиться в определенном наборе состояний, множество которых мы обозначим через C. Алгоритмом мы будем называть отображение \mathcal{F} этого множества в себя:

$$\mathcal{F}:\mathcal{C}\to\mathcal{C}.$$

Алгоритм задается в виде некоего правила, которое позволяет по заданному состоянию компьютера получать другое его состояние. Это правило практически чаще всего оформляется в виде компьютерной программы, или в виде рецепта, формулиремого на обычном человеческом языке "надо сделать то-то и то-то".

В классической теории алгоритмов множество состояний компьютера C является просто набором всевозможных булевских строк вида $a_0, a_1, ..., a_{n-1}$, где n - размер памяти компьютера, $a_j \in \{0, 1\}$.

Вычислением, соответствующим данному алгоритму, называется последовательность применения отображения \mathcal{F} к начальному состоянию \mathcal{C}_0 :

$$\mathcal{C}_0 \longrightarrow \mathcal{F}(\mathcal{C}_0) \longrightarrow \mathcal{F}(\mathcal{F}(\mathcal{C}_0)) \longrightarrow \ldots \longrightarrow \underbrace{\mathcal{F}(\ldots \mathcal{F}(\mathcal{C}_0) \ldots)}_T = \mathcal{F}^{\{T\}}(\mathcal{C}_0), \qquad (1.1)$$

где к конечному состоянию правило \mathcal{F} уже не применимо. Число $T(\mathcal{C}_0)$ называется сложностью работы алгоритма над данным начальным словом \mathcal{C}_0 ; если $T = \infty$, то сложность бесконечна, то есть алгоритм никогда не завершает работу. Так определенная сложность фактически является временем работы, выраженным в абстрактных единицах - числе применений этого оператора.

Отображение \mathcal{F} может зависеть от времени, которое мы определили выше. Для того, чтобы эта ситуация не отличалась от стандартной модели с постоянным оператором \mathcal{F} необходимо включить время в сами состояния $C \in \mathcal{C}$. Такой прием применяется в квантовой электродинамике. Однако с практической точки зрения переменный оператор \mathcal{F} - случай, требующий специальных подходов - это будет обсуждаться в лекции, посвященной адиабатическим вычислениям. В дальнейшем по умолчанию оператор \mathcal{F} не будет зависеть от времени.

Мы понимаем вычисление в широком смысле слова: любой реальный процесс представляется нам в виде некоторого вычисления. Поэтому

алгоритмом является любой закон природы, который мы можем сформулировать в точных терминах.

Эта алгоритмическая концепция - конструктивная математика, была создана Андреем Марковым-младшим (см. [74],[75]) и является основой для применения компьютеров к моделированию реальных процессов. Основная идея конструктивного анализа изложена в Приложении А.7.

Любой квантовый алгоритм, в конечном счете, является алгоритмом, моделирующим некоторый реальный процесс (см. рисунок 1.1); и если вычисление по этому алгоритму не дает нужного результата, мы должны сделать вывод, что данный алгоритм неверен. Квантовые алгоритмы есть всего лишь классические *записи* элементарных квантовых операций (на рисунке 1.1 они хранятся в операционной системе на самом верхнем уровне), которые ведут к нужному результату при условии, что мы правильно понимаем действие законов самой квантовой физики применительно к квантовой части нашего компьютера. Непосредственно проверить факт такого знания невозможно - это можно проверить только на эксперименте.

Отсюда следует неожиданный вывод о том, что построение квантового компьютера есть проверка самой квантовой теории в той области, где она еще никогда не проверялась - в области сложных систем. В задачах физики 20 века мы имели дело с системами простыми, сложность там не играла особой роли, так как эти задачи можно было редуцировать, устранив так называемую запутанность. Для сложных систем, находящихся в фокусе науки сегодня, этого сделать нельзя.

Наращивание числа кубитов ведет к экспоненциально быстрому росту сложности; с кубитовой памятью мы очень быстро выходим за пределы простых систем, которые легко поддавались анализу физиков прошедшего века. Поэтому квантовые вычисления есть физика нового времени, и наши представления о ней надо еще проверить экспериментально. Мы будем двигаться по стандартному пути копенгагенской квантовой теории, отлично проверенной для простых задач, и посмотрим, куда она нас приведет в области задач сложных.

Пусть мы каким-то образом определили сложность $C(\mathcal{C})$ состояния компьютера \mathcal{C} . Возьмем максимальную сложность работы алгорима на начальных состояниях сложности не больше данного натурального n:

$$C(\mathcal{F})(n) = max_{C(\mathcal{C}_0) < n} T(\mathcal{C}_0)$$

тогда мы получим функцию натурального аргумента, называемую сложностью алгоритма \mathcal{F} .

Для вычислений часто используется внешнее устройство, которое называется *оракулом*. Оракул - объект значительно более сложный, по сравнению с компьютером; его даже вряд ли можно назвать объектом, это, скорее, субъект, который вообще не подлежит алгоритмическому описанию. Например, оракулом может быть пользователь компьютера.

Формально оракул - эта другая функция вида

$$\mathcal{O}:\mathcal{C}\to\mathcal{C}$$

Пусть в множестве состояний компьютера C выделено некоторое подмножество $Q \subseteq C$, состояния которого называются вопросными. Пара (\mathcal{O}, \mathcal{F}) называется алгоритмом с оракулом. Вычисление, соответствующее данному алгориму с оракулом, есть последовательность вида

$$\mathcal{C}_0 \longrightarrow \mathcal{L}(\mathcal{C}_0) \longrightarrow \mathcal{L}(\mathcal{L}(\mathcal{C}_0)) \longrightarrow \ldots \longrightarrow \underbrace{\mathcal{L}(\ldots \mathcal{L}}_T(\mathcal{C}_0) \ldots) = \mathcal{F}^{\{L\}}(\mathcal{C}_0),$$
(1.2)

где отображение \mathcal{L} действует как \mathcal{F} , если его аргумент не принадлежит \mathcal{Q} , и как \mathcal{O} , если его аргумент принадлежит \mathcal{Q} . Здесь так же, как и выше, отображение \mathcal{L} неприменимо к конечному состоянию комьютера. Такое вычисление работает как \mathcal{F} до тех пор, пока не встретилось вопросное состояние. Если такое состояние встретилось, применяется не обычная функция \mathcal{F} , а оракул \mathcal{O} .

Немного подумав, мы придем к выводу о том, что взаимодействие пользователя с компьтером в точности укладывается в схему вычисления с оракулом, если последний обозначает пользователя.

Оракул = пользователь компьютера

Сложностью вычисления с оракулом называется число применений оракула в цепочке (1.2); сложность алгоритма с оракулом определяется также, как и выше.

Вычисление (1.1) есть абстрактная модель любого естественного процесса, который описывается законом \mathcal{F} , то есть любого реального процесса. Форма вычисления зависит от формы описания состояний рассматриваемой системы. Например, в классической физике состояния из множества \mathcal{C} - это бинарные строки длиины n, общее число которых $N = 2^n$. Заметим, что применение математического анализа требует предельного перехода $n \to \infty$. Однако это требование картезианской математики не точно соответствует реальному миру. Например, если речь идет о воздухе в данной комнате, мы не можем, строго говоря, считать его непрерывным: он состоит из молекул конечного размера. При компьютерном расчете любое представление будет конечным, так как память компьютера всегда ограничена. Именно это обстоятельство означает, что компьютерное моделирование способно более адекватно отражать реальные физические процессы по сравнению с аналитическими формулами.

Можно ли ускорить эволюцию, если расширить память компьютера? Можно ли купить время заплатив за него пространством? Нельзя! Эволюция, в общем случае, не может быть ускорена путем вовлечения новых ресурсов. Распараллеливается только узкий круг задач, называемых переборными. Ускорить выполнение всех задач не сможет и квантовый компьютер. Время, таким образом, несжимаемо. Предсказывать события мы можем только используя аналогии, например, одинаково приготовленные объекты должны вести себя похожим образом. Но точное предсказание невозможно.

Иное дело - пространство. Его можно, до некоторой степени, сжимать. Например, с помощью квантовой нелокальности - особого феномена, предсказанного квантовой теорией, и затем обнаруженного в экспериментах. Но если измерять пространство в виде памяти компьютера, оно также, в конце концов, окажется несжимаемым. Та площадка, на которой имеет место квантовый параллелизм, довольно узка для того, чтобы мы могли использовать порожденное этим параллелизмом сжатие пространства практически. Но она достаточно велика для того, чтобы мы могли понять многие процессы в микромире, дать им связное объяснение и научиться ими управлять. Идеология квантовой теории - естественная стартовая точка для исследования сложных систем, включая живые организмы, на предсказательном уровне.

Глава 2

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 путях ее применимости к настоящей биологии живых организмов, к сверхбыстрым процессам типа ядерных реакций и превращению элементарных частиц, а также к гравитации¹, является нетривиальным 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 в данной главе 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 рассогласованию 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 (в рамках классической физики их назвают битами, в квантовой - квантовыми битами или *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 классиче-

¹Возможное сведение гравитации к электромагнетизму обсуждается в последней главе, в диалогах.

ских состояний любого объекта, что необходимо для обеспечения конечномерности рассматриваемого пространства.

Далее нам придется дискретизировать и амплитуды, то есть коэфициенты в линейных 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.

2.1 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 $x_0, x_1, ..., x_{N-1}$.

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, например, вершин ограниченной трехмерной целочисленной решетки с малым шагом.

Занумеруем эти классические состояния натуральными числами: 0, 1, 2, ..., 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 $|0\rangle, |1\rangle, ..., |N-1\rangle$, а произвольный вектор из этого пространства называть квантовым состоянием (или вектором состояния) данной частицы, записывать в виде столбца комплексных чисел λ_j , называемых амплитудами данного состояния:

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |j\rangle = \begin{pmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_{N-1} \end{pmatrix}; \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad ..., |N-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$
(2.1)

Символы | - "бра", и > - "кет" (от английского слова bracket - "скобка") введены Полем Дираком; они очень удобны во всех вопросах, связанных с линейной алгеброй.

Например, при N = 2 наша система представляет собой квантовый бит, или *кубит*: объект, у которого есть только 2 классических состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$, а квантовое состояние имеет вид $\lambda_0 |0\rangle + \lambda_1 |1\rangle$.

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 $x = x_0, x_1 = x_0 + dx, x_2 = x_0 + 2dx, ..., x_N = x_0 + Ndx$, а затем представить приближенно непрерывную функцию $\Psi(x)$ как

$$\Psi(x) \approx \sum_{j=0}^{N-1} \Psi(x_j) d_j(x), \qquad (2.2)$$

где $d_j(x)$ - характеристическая функция *j*- го отрезка $[x_j, x_{j+1}]$, j = 0, 1, ..., N - 1(см. рисунок 2.1). Учитывая скалярное произведение непрерывных функций $\langle f|g \rangle = \int_R \bar{f}g \, dx$, мы можем пронормировать ортогональные векторы d_j , получив ортонормированый 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 (9.1). Для волновой функции, определенной на пространстве R^2 или R^3 , вместо \sqrt{dx} будет стоять $\sqrt{dx^2}$ или $\sqrt{dx^3}$ соответственно².

²Переход от дискретной записи к непрерывной состоит в том, что все суммы заменяются интегралами, а переменные суммирования - переменными интегрирования. Например, формула (2.2) превратится в $\Psi(x) = \int_{\mathcal{P}} \Psi(y) \delta_y(x) dy$ где $\delta_y(x)$ есть предел функций $d_j(x)$ при $dx \to 0$, так что $x_j \to y$.

Такого предела, конечно, не существует в математическом анализе - среди обычных функций, так как при $dx \to 0$ функция $d_j(x)$ превратится в иглу бесконечно высокую и бесконечно тонкую. Это - так называемая обобщенная функция Дирака (см. ниже).



Рис. 2.1: Дискретизация непрерывной функции.

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 $x_j = j/N, \ j = 0, 1, ..., N - 1$ 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 $|e_1 e_2 ... e_n\rangle$, $e_k \in \{0, 1\}$.

Любая такая строка есть базисное состояние системы n кубитов, 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.

В дальнейшем мы будем изучать реальные системы, содержащие различные объекты, обладающие индивидуальностью: частицы и поля. Каждый такой объект будет однозначно связан с набором кубитов, которые называются его атрибутами. Например, объект: точечная частица связан с набором кубитов, представляющих знаки в бинарном разложении ее координаты (или координат). Такая частица обладает индивидуальностью, позволяющей отличить ее от другой частицы того же типа. Объектом будет также являться поле - бозонное или фермионное; атрибуты поля будут определять его состояние. Поле состоит из неразличимых частиц. Это значит, что у этих частиц нет индивидуальности, и они различаются только по своему месту в поле.

Бозонное поле состоит из неразличимых частиц, которые могут находиться в одном состоянии, атрибутом такого поля будет просто число этих частиц, и кубиты атрибутов такого поля будут просто бинарной записью этого числа. Примером бозонного поля является электромагнитное поле фиксированной моды, состоящее из неразличимых фотонов, так что классическое (базисное) состояние данной моды есть просто число фотонов в этой моде. С математической точки зрения фотоны - это кванты колебаний гармонического осциллятора; с этим формализмом можно ознакомиться, решая задачи из Приложения - А.1.1.

Для фермионного поля, в котором в одном состоянии может находиться не более одной частицы, атрибутом будут так называемые числа заполнения: кубиты, выражающие наличие частицы или ее отсутствие в определенном состоянии внутри данного поля. Примером фермионного поля явлются уровни заполнения электронных оболочек атома. Атрибутами одного такого уровня является пара "значение энергии + значение спина электрона". На каждом из таких уровней может находиться не более одного электрона. Таким образом, классическое состояние электронного фермионного поля в атоме будут так называемые числа заполнения: функция F, сопоставляющая каждому уровню ноль, если на нем нет электрона, и единицу, если есть один электрон. Если зафиксировать порядок на уровнях, то числа заполнения можно записывать в виде последовательности нулей и единиц, соответствующей функции F.

Можно сказать, что фермионное поле есть просто набор отдельных бозонных полей, но с дополнительным условием: в каждом поле не более одной частицы. Таким образом, общий вид классического состояния сложной системы будет такой:

$$\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \dots, \mathcal{A}_n; \ \mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2, \dots, \mathcal{B}_b, \ \mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2, \dots \mathcal{F}_f,$$
(2.3)

где \mathcal{A} - атрибуты n частиц + их значения, \mathcal{B} - атрибуты b бозонных полей + их значения, и \mathcal{F} - атрибуты f фермионных полей + их значения.

2.2 Измерение. Матрица плотности

Измерение частицы, находящейся в квантовом состоянии $|\Psi\rangle$ вида (9.1) - это случайная величина, принимающая значения $|j\rangle$ с вероятностями $p_j = |\lambda_j|^2$, j = 0, 1, ..., N - 1. Эти вероятности называют еще населенностями соответствующих базисных состояний³.

Из этого правила, введенного Максом Борном, сразу вытекает равенство

$$\sum_{j} |\lambda_j|^2 = 1$$

для любого квантового состояния $|\Psi\rangle = \sum_{j} \lambda_{j} |j\rangle$, которое называется условием нормировки. Однако, поскольку кввантовые состояния образуют линейное пространство,

³Термин *населенность* говорит о глубокой связи квантовой теории с живой природой, прояснить которую и призван наш проект.

удобно иногда не производить нормировку, и оперировать с ненормированными состояниями $|\Psi\rangle$. Однако перед измерением их надо пронормировать, разделив на их норму.

Для непрерывных волновых функций $\Psi(x)$ правило Борна вглядит так. Вероятность обнаружить частицу в промежутке D равна $\int_{D} |\Psi(x)|^2 dx$. Таким образом, $|\Psi(x)|^2$ есть плотность вероятности нахождения частицы в точке x. Условие нормировки всей функции в трехмерном случае будет иметь вид $\int_{R^3} |\Psi(x)|^2 dx = 1$; в одномерном и двухмерном область интегрирования соответственно изменится. При этом x является классическим параметром вектора состояния. Как правило это будет координата, или набор координат, если частица композитная, то есть фактически является коллективом более элементарных частиц. Однако x может быть и значением импульса, если мы перейдем к так называемому импульсному базису пространства состояний. Возможны и более сложные конструкции, например, для трехмерной частицы по осям X и Y может быть координата, а по оси Z - импульс; тогда у нас будет $x = (X, Y, p_z)$, и т.п. Важно, чтобы набор дискретных значений x составлял ортонормированный базис пространства всех квантовых состояний.

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 некой 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 $|j\rangle$ заполнят 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

$$\Psi(r,t) = C \, \exp(\frac{i}{\hbar}rp - \frac{i}{\hbar}Et) \tag{2.4}$$

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.

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 (2.4), 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 $|\tilde{0}\rangle, |\tilde{1}\rangle, ..., |N-1\rangle$, 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

$$\tilde{p}_i = |\langle \tilde{j} | \Psi \rangle|^2, \tag{2.5}$$

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 состоянии⁴. 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 си-

⁴В более точной терминологии наблюдение отличается от измерения тем, что если последнее дает нам квантовое состояние, то наблюдение дает собственное число эрмитова оператора, соотвтствующе данному состоянию; это будет объяснено более подробно ниже. Как физический процесс наблюдение и измерение идентичны.

стемах 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 имееет физического смысла: не влияет на вероятность, и выносится за скобки при любом линейном преобразовании пространства состояний), 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: $p_j \approx M_j/M, \ j = 0, 1$, где M_j - число измерений, в которых получилось состояние $|j\rangle, M$ - общее число измерений. 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

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

Читателю предлагается вычислить вероятности $\tilde{p}_{0,1}$ по формуле (2.5) 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 амплитуды⁵.

Пусть H - некоторый оператор в C^N . Сопряженный оператор будем обозначать звездочкой (или крестиком): H^* или H^+ . Его матрица получается из матрицы Hотражением от главной диагонали и комплексным сопряжением всех элементов. Эрмитовость оператора H означает его самосопряженность $H = H^*$. Тогда имеется система собственных векторов $H: |\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle, ..., |\phi_{N-1}\rangle$, образующая ортонормированный базис C^N . Пусть $E_0, E_1, ..., E_{N-1}$ - их собственные значения. Тогда **наблюдением**, соответствующим H, над частицей, находящейся в состоянии $|\Psi\rangle$, 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 как физический процесс 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 $exp(A) = 1 + A + A^2/2! + ...$ мы сформулируем универсальную связь эрмитовых и унитарных операторов, которая задается формулой

$$U = exp(iH). \tag{2.6}$$

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

⁵Различные результаты по квантовой томографии можно найти в работе [5].

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 (9.1). Это матрица плотности Ландау данного состояния. Она эрмитова, положительно определена (собственные значения неотрицательны) и ее ранг и след равны единице. Эти условия на матрицу, в свою очередь, означают, что она имеет вид ρ_{Ψ} для некоторого вектора $|\Psi\rangle$ вида (9.1). Читателю предлагается доказать эти утверэсдения самостоятельно. 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: $\rho_{\Psi} \to T \rho_{\Psi} T^*$, 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 восстановать 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.

2.3 Композитные системы.

Пусть у нас имеются две частицы, первая и вторая, причем у первой классические состояния $|0_1\rangle, |1_1\rangle, ..., |(N-1)_1\rangle$, а у второй $|0_2\rangle, |1_2\rangle, ..., |(M-1)_2\rangle$. Тогда у системы, состоящей из этих двух частиц классические состояния будут иметь вид $|j_1k_2\rangle$, где j = 0, 1, ..., N-1, k = 0, 1, ..., 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 произведение нием пространств состояний каждой из частиц: $C^{NM} = C^N \otimes C^M$.

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

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0,\dots,N-1,k=0,\dots,M-1} \lambda_{jk} |j_1k_2\rangle \tag{2.7}$$

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:

$$|\Psi\rangle \otimes |\Phi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |j\rangle \otimes \sum_{k=0}^{M-1} \mu_k |k\rangle = \sum_{j=0,\dots,N-1; k=0,\dots,M-1} \lambda_j \mu_k |jk\rangle$$
(2.8)

Сразу возникающий вопрос о том, исчерпываются ли все элементы тензорного произведения пространств $C^N \otimes C^M$ состояниями вида (2.8) решается отрицательно: читателю предоставляется доказать, что состояние двухкубитной системы

$$|EPR\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \tag{2.9}$$

не представимо в виде тензорного произведения, то есть не имеет вида (2.8). Состояния вида (2.8) называются не запутанными, все прочие - запутанными. Таким образом, состояние $|EPR\rangle$ вида (2.9) - запутанное.

Выясните самостоятельно, каких состояний в общем случае больше: запутанных или незапутанных и насколько больше. Указание: найдите, какой объем памяти нужен для хранения а) незапутанного состояния и б) запутанного состояния. Отсюда сразу получится ответ: львиная доля состояний - запутанные.

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 $C^{N_1} \otimes C^{N_2} \otimes ... \otimes C^{N_n}$, 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 $\mathcal{H} \to C$, 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 $\mathcal{H} \to C$. 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 $\tilde{g} : f \to \int_R \bar{g} f dx$. Тогда мы получим вложение $\mathcal{H} \subset \mathcal{H}^*$. Однако такое вложение не является изоморфизмом, так как, например, функционал $\delta_{x_0} : f \to f(x_0)$ 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 C^N , мы будем иметь изоморфизм \mathcal{H} и \mathcal{H}^* , так как теперь у любого линейного функционала имеется матрица, и это есть матрица - строка, имеющая вид $\langle \psi |$, и все функционалы имеют вид $|\phi\rangle \rightarrow \langle \psi |\phi\rangle$ для каких-то $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

Если $|i\rangle$, $|j\rangle$ - векторы из ортонормированного базиса пространства \mathcal{H} , и A : $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ - линейный оператор, то элемент $a_{i,j}$ матрицы этого оператора в данном

базисе находится по формуле $a_{i,j} = \langle i|A|j \rangle$, 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 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes ... \otimes \mathcal{H}_f$ 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 $T = T_1T_2...T_k$, где для всякого q = 1, 2, ..., 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, ..., s, причем для любого i = 1, 2, ..., 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 \mathcal{H}_i .

Пользуясь данным правилом, мы можем привести тензор T к виду

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

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

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 $\langle \psi_1 | \phi_1 \rangle \langle \psi_2 | \phi_2 \rangle$.

2.3.1 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 |Ψ⟩ 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

$$\rho = \sum_{j',j'',k',k''} \rho_{j',k',j'',k''} |j',j''\rangle\langle k',k''|$$
(2.10)

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 (2.10), 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:

$$\rho_1 = tr_2(\rho) = \sum_k \langle k | \rho | k \rangle \tag{2.11}$$

Если $\rho = \sum_{j',k',j'',k''} \rho_{j'k',j''k''} |j'k'\rangle \langle k''j''|$, можно переписать (2.11) в виде

$$\rho_{1} = \sum_{k} \sum_{j',k',j'',k''} \rho_{j'k',j''k''} \langle k|j'k' \rangle \langle k''j''|k \rangle = \sum_{j',j''} A_{j'j''} \quad |j'\rangle \langle j''|, \ A_{j'j''} = \sum_{k} \rho_{j'k,j''k}.$$
(2.12)

Формула (2.12) 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 (2.12), 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

$$\left(\begin{array}{ccccccccc}
1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\
0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 \\
1/2 & 0 & 0 & 1/2
\end{array}\right)$$
(2.13)

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

$$\left(\begin{array}{ccc}
1/2 & 0\\
0 & 1/2
\end{array}\right)$$
(2.14)

Матрица (2.14) 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 будет называть чистыми, а "состояния", которые описываются матрицами, сходными с (2.14), 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 (2.7) 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

$$\rho_1 = p_2(0)|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + p_2(1)|\psi_1\rangle\langle\psi_1|.$$
(2.15)

Читателю предлагается убедиться, что это в точности совпадает с матрицей (2.12).

Таким образом, и в общем случае, когда система разделена на две подсистемы, матрица "плотности" результата измерения второй подсистемы, найденная по формуле (2.12), будет иметь вид

$$\rho_1 = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \qquad (2.16)$$

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 (2.16) задает общий вид смешанного состояния, которое мы будем отождествлять с матрицей плотности ρ_1 . Однако по заданной матрице плотности ρ_1 разложение (2.16) 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 (2.16) 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 : $\mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_1$, U_2 : $\mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2$ - два оператора в разных гильбертовых пространствах. Их тензорное произведение $U_1 \otimes U_2$ действует на тензорное произведение пространств: $U_1 \otimes U_2$: $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Определяется эта функция естественным образом, как линейное продолжение действия на базисных состояниях: $U_1 \otimes U_2$: $|jk\rangle \to U_1|j\rangle \otimes U_2|j\rangle$.

Вид матрицы тензорного произведения для двухкубитного пространства выглядит так:

$$U_{1} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix}, \quad U_{1} \otimes U_{2} = \begin{pmatrix} u_{11}U_{2} & u_{12}U_{2} \\ u_{21}U_{2} & u_{22}U_{2} \end{pmatrix}$$
(2.17)

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.

Наивной сложностью состояния $|\Psi\rangle$ на множестве M называется размер в кубитах носителя его максимального запутанного тензорного делителя. Иначе говоря, наивная 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 наивно сложное состояние может оказаться очень близко к простому. Однако если мы рассматриваем только состояния, амплитуды λ_j которых имеют "зернистый" вид (6.12), эта близость будет ограничена величиной зерна ϵ . Из дальнейшего будет ясно, что устремлять ϵ к нулю для сложных систем нельзя, и потому наивная сложность определена таким образом корректно. Мы будем обозначать наивную сложность состояния $|\Psi\rangle$ через $\nu(\Psi)$. Определенная наивная сложность зависит от базиса, в котором мы рассматриваем состояния. В дальнейшем мы усовершенствуем это понятие, введя *сложсность* квантового состояния.

2.3.2 Теорема Шмидта

Запутанное состояние в композитной системе, состоящей из двух компонент S_1 и S_2 , имеет вид (2.7) и непредставимо в виде (2.8). Его хранение в памяти компьютера весьма затратно: надо хранить матрицу λ_{jk} в отличие от состояния (2.8), 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 (2.7) композитной системы существуют новые ортонормированные базисы

 $|J_0\rangle,|J_1\rangle,...,|J_{N-1}\rangle;\;|K_0\rangle,|K_1\rangle,...,|K_{M-1}\rangle$ в пространствах - компонентах $C^N,\;C^M,$ такие что

$$|\Psi\rangle = \sum_{q=0}^{S} \alpha_q |J_q\rangle |K_q\rangle \tag{2.18}$$

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

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 $|\psi_1^n\rangle|\psi_2^n\rangle \to |\Psi\rangle$, 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 $|\psi_1^n\rangle|\psi_2^n\rangle \to |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle$ при $n \to \infty$.

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 (2.18). 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 разложени $|A\rangle$ присутствовал один из векторов $|J_0\rangle$, $|K_0\rangle$, мы бы получили противоречие с минимальностью вектора $|A\rangle$, 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 (2.7) 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 (2.12) 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 (2.7) 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 .

2.3.3 Парадокс квантовой энтропии

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

Рассмотрим состояние двух кубитов $|\Psi\rangle = \frac{1}{\zeta}\sqrt{2}|00\rangle + |11\rangle$). 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.

2.4 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.

Мы зафиксируем представление вещественного числа $x \in [0,1]$ с точностью до 1/N в виде

$$x = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{n-1} x_j 2^j, \qquad (2.19)$$

где бинарные символы x_j , j = 0, 1, ..., n - 1 будут значениями кубитов, которые представляют это число x. Для задач, включающих числа, выходящие за пределы единичного отрезка, мы можем просто менять множитель $\frac{1}{N}$, оставляя неизменными бинарные значения x_j . Если же реальные числа меняются в произвольном промежутке [A, B], помимо изменения множителя, надо будет также применить сдвиг на некую константу. В любом случае, мы получим универсальное представление реальных чисел через кубиты по формуле (2.19) с возможным дополнительным линейным преобразованием. Мы не будем впредь специально это оговаривать.

Рассмотрим три примера: наблюдение координаты, импульса и энергии.

2.4.1 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: $x : f(x) \to xf(x)$. Вспоминая переход (2.2) 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, ..., (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 $|0\rangle, |1\rangle, ..., |N-1\rangle$, и будем при записи отождествлять их с самими этими числами. Собственными значениями их будут сами числа 0, 1/N, ..., (N-1)/N. Эти базисные состояния по определению 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 δ_{λ} : $f \to f(\lambda)$. 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 (9.1), 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 будет 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.

2.4.2 Квантовый оператор Фурье и наблюдение импульса

Квантовый оператор импульса в одномерном случае имеет в непрерывном формализме вид

$$p: f(x) \to \frac{\hbar}{i} \nabla f$$
 (2.20)

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,

$$f(x) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{R} exp(-ipx/\hbar)f(x)dx = \phi(p)$$
 (2.21)

переводящим функции (2.20) в дельта-функции Дирака, а также обратным преобразованием Фурье

$$\phi(p) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{R} exp(ipx/\hbar)\phi(p)dp = f(x)$$
 (2.22)

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 (2.21) 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 $A \to +\infty$ 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 х или р не играет никакой роли. Проделайте 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 пронормировать. 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:

$$QFT: |c\rangle \to \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{a=0}^{N-1} exp(-2\pi i a c/N) |a\rangle$$

$$QFT^{-1}: |a\rangle \to \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{c=0}^{N-1} exp(2\pi i a c/N) |c\rangle$$
(2.23)

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 $A = diag(exp(\pi ia))_{a=0,1,...,N-1}$. Его собственные вектора будут иметь вид $A^{-1}QFT^{-1}|a\rangle$ вида (2.23) и их собственными значениями будут числа $\sqrt{N}(a-1/2)$; a = 0, 1/N, ..., (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 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 (2.23) называют прямым и обратным квантовым преобразованием Фурье. С их помощью можно построить полиномиальный квантовый алгоритм, находящий разложение числа на нетривиальные множители ([6]). Реализация обратного квантового преобразования Фурье на квантовом компьютере приведена в Приложении; реализация прямого преобразования получается из него обращением всех входящих операторов и их порядка.

2.4.3 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 от-

дельности, что даст

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

$$(2.24)$$

Оператор же спина имеет вид $\bar{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, где

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(2.25)

- матрицы Паули.

Оператор энергии взаимодействия спина электрона с магнитным полем напряженности $B = (B_x, B_y, B_z)$ имеет вид скалярного произведения $B\bar{\sigma}$. Этот член должен добавляться как слагаемое в гамильтониан, если мы хотим учесть данное взаимодействие.

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 межчастицного взаимодействия также входит в гамильтониан как отдельное слагаемое.

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

2.4.4 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 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!⁶).

⁶Стартуйте с неравенства Коши - Буняковского (косинус не больше 1): $\langle x|AB|x\rangle\langle x|BA|x\rangle = |\langle Bx|Ax\rangle|^2 \leq ||Ax||^2 ||Bx||^2$. Получите затем неравенство Шредингера - Робертсона $|\langle x|[A,B]|x\rangle|^2 \leq 4||Ax||^2||Bx||^2$. Теперь предположите, что величины A и B центрированы, то есть их средние значения в состоянии $|\psi\rangle$ равны нулю: $\langle \psi|A|\psi\rangle = \langle \psi|B|\psi\rangle = 0$. Тогда средние квадратичные отклонения δA и δA будут равны $\langle \psi|A^2|\psi\rangle$ и $\langle \psi|B^2|\psi\rangle$ соответственно, и мы получаем неравенство $\delta A\delta B \geq \frac{1}{2}|\langle \psi|[A,B]|\psi\rangle|$. Теперь для общего случая надо заметить, что центрирование величин есть прибавление к ней константы, которая исчезнет при взятии коммутатора.

Рис. 2.2: Соотношение неопределенностей "координата-импульс" для одного кубита. Если точно определена координата, импульс полностью неопределен, и наоборот.



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 (2.23), а при n = 1 сводится к преобразованию Адамара

$$|0\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \ |1\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle).$$
(2.26)

Измерение состояния $|\Psi\rangle=\lambda_0|0\rangle+\lambda_1|1\rangle$ в обоих базисах изображено на рисунке 2.2 .

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.

2.5 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.

2.5.1 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:

$$i\hbar|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle,$$
 (2.27)

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

$$|\Psi(t)\rangle = U_t |\Psi(0)\rangle, \ U_t = exp(-\frac{\imath}{\hbar}Ht).$$
 (2.28)

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 $|\Phi_0\rangle, |\Phi_1\rangle, ..., |\Phi_{N-1}\rangle$ и их собственные значения $E_0 < E_1 \leq E_2 \leq ... \leq E_{N-1}$ (их всегда можно расположить в этом порядке), то решение задачи Коши выписывается сразу:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=0}^{n-1} \lambda_j e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t} |\Phi_j\rangle, \quad \lambda_j = \langle \Phi_j |\Psi\rangle$$
(2.29)

(Доказать!)

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

2.5.2 Уравнение Шредингера для матрицы плотности

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

$$i\hbar\dot{\rho} = [H,\rho] = H\rho - \rho H. \tag{2.30}$$

Указание: взять сопряжение уравнения (2.27), а затем применить формулу дифференцирования произведения.

Уравнение (2.30) удобнее уравнения (2.27) 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 (2.30).

Тем не менее, мы будем изучать уравнение Шредингера для вектора состояния (2.27), 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 (2.30) - 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.

2.5.3 Матричная динамика

Уравнение (2.27) 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 (см. [2]); мы не будет 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 $|\Psi(0)\rangle = \sum_{i} \lambda_{j} |j\rangle$. 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 $|j\rangle \to |i\rangle$.

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

$$\lambda_i(2t) = \sum_{j,k=0}^{N-1} \lambda_j u_{kj} u_{ik} \tag{2.31}$$

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

$$|j\rangle \to |k_1\rangle \to \dots \to |k_{n-1}\rangle \to |i\rangle$$
 (2.32)

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

$$\lambda_i(nt) = \sum_{j,k_1,r_2,\dots,k_{n-1}} \lambda_j(0) u_{ik_{n-1}} \dots u_{k_2k_1} u_{k_1j}$$
(2.33)

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 [3] для простого объяснения закона квантовой эволюции.

2.5.4 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 (2.32) заменятся на непрерывные кривые вида γ : $x = x(t), t \in [0, T]$. Для простоты снова рассмотрим случай одномерной частицы. Суммирование в (2.33) можно разбить на две суммы: одна по j, другая - по всем промежуточным точкам $k_1, k_2, ..., k_{n-1}$. Первая сумма даст интеграл

$$\Psi(y,t) = \int_{R} K(y,x,t)\Psi(x,0)dx, \qquad (2.34)$$

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

$$K(y, x, t) = \int_{\gamma: x \to y} exp(\frac{i}{\hbar}S[\gamma])\mathcal{D}\gamma, \qquad (2.35)$$

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 (2.35) - фейнмановским интергалом 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. [4]), 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 расплывание 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 (2.35) мы можем увидеть некоторое несоответствие с формулой (9.3), а именно: здесь нет знака минус, и при вычислении показателя экспоненты вместо гамильтониана, как в (9.3) 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 (9.3) как $p^2/2m$ совпадает с выражением через лагранжиан в (2.35): $m\dot{x}^2/2$, но не сходится знак. Однако, в уравнении Шредингера (2.27) импульс входит как квантовый импульс $p = \frac{\hbar}{i} \nabla$ а в (2.35) - 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 (9.3).

Разумеется, это рассуждение не есть доказательство того, что фейнмановские интегралы по путям эквивалентны уравнению Шредингера, формальное доказательство приведено в книге [4], 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 [4]), 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 (2.35). 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:

$$\delta S[\gamma_{class}]/\delta\gamma = 0, \qquad (2.36)$$

который ошибочно называют принципом наименьшего действия (действие там отнюдь не наименьшее, его вариация при вариации траектории нулевая). Можно доказать (см., например, [4]), что уравнение (2.36) 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 (2.35) "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, 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 aконстанта. График вещественной части данной функции изображен на рисунке 2.3.



Рис. 2.3: Вещественная часть ядра Фейнмана свободной частицы. Plot[Cos[x^2], {x, 0, 3 Pi}]

Покажите, что это состояние согласуется с волной де Бройля (2.4) в следующем смысле: экземпляры частицы, достигшие точки х за время t, будут иметь тот же период осцилляций по де-Бройлю, что и по Фейнману в 2.3.

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

Динамику свободной частицы нельзя заменить простыми перемещениями от одной точки к соседней на множестве точек вида $x = \epsilon, 2\epsilon, 3\epsilon, ...,$ 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.

2.6 Открытая квантовая система. Квантовое основное уравнение КОУ

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 (далее мы назваем его КОУ):

$$i\hbar\dot{\rho} = [H,\rho] + i\mathcal{L}(\rho), \quad \mathcal{L}(\rho) = \sum_{j=1}^{N^2-1} \gamma_j (A_j\rho A_j^+ - \frac{1}{2} \{A_j^+ A_j,\rho\})$$
 (2.37)

где $\{A, B\} = AB - BA$ - так называемый антикоммутатор. Здесь 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 $\langle A|B \rangle = tr(A^+B)$. 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 (2.37) 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-Кутты⁷. Решение можно представить в виде последовательности шагов, каждый из которых соответствует времени t_i , начинается с матрицы плотности $\rho(t_i)$ и состоит из двух действий:

⁷Для небольших, с несколько десятков, размерностей пространства состояний, есть очень эффективный вычислительный метод решения квантового основного уравнения - метод Розенброка см. [7]. Однако и метод Эйлера вполне применим, кроме того, последний метод не так чувствителен к размерности.

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 $(\rho(t) + \rho^+(t))/tr(\rho(t))$. 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.

2.7 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. [8]). 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. [9]). 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 - см. рисунок 2.4.

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





классическая часть, управлящая квантовой

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. В классической части содержится информация о том, какие элементарные унитарные операции (гейты) и над какими кубитами делать в данный момент, когда произвести запрос к оракулу и когда останавливать вычисление.

Изменение же квантовой части, подчиненное управлению классической, будет происходить как унитарная эволюция вектора состояния системы кубитов в N- мерном пространстве квантовых состояний. Так что прямое моделирование эволюции квантовой части с помощью классического компьтера будет невозможным уже для сравнительно небольшого размера квантовой части - порядка 40-50 кубитов.

Заметим, что квантовые алгоритмы и соответствущие им вычисления полностью укладывается в схему, изложенную в первой главе. При этом квантовое действие

Рис. 2.5: Моделирование реальности на квантовом компьютере

Квантовая операционная система на суперкомпьютере

Физическая часть квантового компьютера: имитация реальной системы на квантовых точках, оптических полостях и т.п.

Реальная система

оракула, соответствущего классической функции F будет иметь вид

$$F_{quant}: |x, y\rangle \to |x, y \oplus F(x)\rangle.$$
 (2.38)

Здесь x и y могут быть наборами нескольких кубитов; важно, чтобы размерность F(x) совпадала с размерностью y. Формула 2.38 задает обратимую операцию над бинарными строками, которая может, таким образом, быть продолжена на все гильбертово пространство квантовых состояний памяти компьютера; мы обозначаем это продолжение таким же символом. Итак, обращение к функции F как к оракулу в ходе квантового вычисления всегда будет означать применение оператора F_{quant} вида 2.38, и мы не будем этого оговаривать специально.

Схема моделирования реальности на квантовом компьютере изображена на рисунке 2.5. 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 подход, основанный на классических вычислениях, не справляется с задачей управления. Причина состоит в 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. Стандартная квантовая теория предсказывает важнейший из таких эффектов: так называемые быстрые квантовые алгоритмы. Они выходят за рамки обычных представлений физики, потому что результаты вычислений по этим алгоритмам невозможно вопроизвести 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.

2.8 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 заданной точностью (см. [10])⁸.

Таким образом, первая задача реализации фейнмановской схемы квантовых вычислений: реализация однокубитных гейтов и СNOT. 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. [12]), ее схема наиболее проста, хотя представляет определенные трудности, носящие не только технологический характер.

В дальнейшем мы увидим, что реализация квантовых гейтов - сложная задача. Даже в случае идеальной работы физических устройств гейты не могут быть точными. Физические законы вносят дополнительные ограничения в работу гейтов, так что их точность оказывается недостаточной для полного масштабирования квантового компьютера.

Значения гейтового подхода в том, что он позволяет имитировать работу полуклассических схем. Например, если мы хотим представить перемещение точечной частицы в одномерном пространстве между двумя точками, причем имея в распоряжении только один бит, мы можем поступить так. Сделаем этот бит квантовым. Тогда состояние полученного кубита вида $a|0\rangle + b|1\rangle$ можно представлять как положение точечной частицы с координатой a/b.

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

⁸На комбинациях гейтов можно построить огромное разнообразие интересных операторов. Читатель, любящий алгебраические упражнения, может обратиться к книге [11], содержащей много интересных задач на квантовые вычисления.



Рис. 2.6: Квантовая точка в виде двух-ямного потенциала



Рис. 2.7: CiNOT на зарядовых состояниях

(см. рисунок 2.6).

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

Гамильтониан такой системы имеет вид $H = c_1 I - b\sigma_x$, где σ_x - определенная в (2.25) первая матрица Паули, b > 0. Читателю предоставляется показать, что собственными состояниями этого гамильтониана будут

$$|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle, \ |\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle,$$
 (2.39)

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 (2.29), мы находим решение задачи Коши для уравнения Шредингера с таким гамильтонианом в виде

$$|\Psi(t)\rangle = A_0 e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} |\phi_0\rangle + A_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} |\phi_1\rangle = e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} (A_0 |\phi_0\rangle + e^{-\frac{i(E_1 - E_0)t}{\hbar}} A_1 |\phi_1\rangle)$$
(2.40)

и теперь, учитывая что состояния $e^{i\theta}|\Psi\rangle$ физически неразличимы для любого вектора $|\Psi\rangle$, 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 (6.15) 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 $e^{-\frac{iE_0t}{\hbar}}$, 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 σ_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 CiNOT требует двух квантовых точек, расположенных перпендикулярно друг к другу, как показано на рисунке 2.7. 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_{CiNOT} , что через это время произойдет преобразование CiNOT. 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 предоставляются 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 CiNOTпо 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.

2.9 Алгоритм Гровера

Мы разберем лишь один быстрый квантовый алгоритм, найденный Ловом Гровером в 1996 году (см. [13]) - 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

$$f(x) = 1 \tag{2.41}$$

имеет ровно один корень x_{tar} , который нам надо найти, обращаясь к функции f, как к оракулу, 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 (2.41) 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

$$f_{quant}: |x, y\rangle \to |x, f(x) \oplus y\rangle$$
 (2.42)

Продемонстрируем 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 приближенно 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 $|a\rangle$:

$$I_{a}|b\rangle = \begin{cases} |b\rangle, & \text{если} \quad \langle a|b\rangle = 0, \\ - & |a\rangle, & \text{если} \quad |a\rangle = |b\rangle \end{cases}$$
(2.43)

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_{xtar} 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 $I_{xtar}|\Psi\rangle|anc\rangle$ и анциллу можно выкинуть, не опасаясь порчи текущего состояния, поскольку анцилла, сыгравшая свою роль во введения 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

$$H = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} - & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$
(2.44)

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

Рассмотрим оператор $R: |x, y, z\rangle \to T_{x,z,y}CNOT_{x,z}T_{x,y,z}|x, y, z\rangle$. Заведем дополнительно n+1 анциллу, инициализированную состоянием $|0\rangle|\bar{0}\rangle$. Обозначим первый кубит анциллы через *res*, а остальные занумеруем числами 1, 2, ..., n. Будем совершать преобразование R последовательно над *i*-м кубитом основного массива, кубитом *res* и i + 1-м кубитом анциллы, i = 1, 2, ..., 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 $I_{\tilde{0}} = H^{\otimes n} I_{\bar{0}} H^{\otimes n}$.

После этого будем делать последовательные применения оператора $G = -I_{\tilde{0}}I_{x_{tar}}$, 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 (2.41) на уровне, недоступном никакому классическому компьютеру. Можно показать (см. [14], что данный алгоритм является оптимальным в следующем точном смысле. Любой иной алгоритм, работающий существенно быстрее, будет давать неверный ответ для переборной задачи (2.41) для подавляющего большинства функций f^9 .

Если уравнение (2.41) имеет несколько решений: $x_1, x_2, ..., x_l$, 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 сохранятся, только x_{tar} надо заменить на X_{tar} с соответствующей коррекцией времени τ .

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, ...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. [17]).

2.10 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

⁹См. также [15], [16].

представить в виде

$$\underbrace{G_{x_{in}} \ G_{x_{in}} \ \dots \ G_{x_{in}}}_{\tau} WH \tag{2.45}$$

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 2.9, 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

$$GSA_{x_{in}}: |x_{in}\rangle \to |x_{tar}\rangle.$$
 (2.46)

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 $f = f_l f_{l-1} ... f_1$ элементарных классических операций над бинарной строкой, которая преобразуется в строку такой же длины операциями f_i , i = 1, 2, ..., l - 1, а операция f_l преобразует строку длины n в один бит. Пусть оракул функции F представлен аналогичным образом как $F = F_l F_{l-1} ... F_1$.

Рассмотрим бинарные строки x_{tar} и x_{in} . Пусть список $i_1, i_2, ..., i_s \in \{1, 2, ..., n\}$ состоит из всех номеров битов, значения которых у этих строк различны. Рассмотрим классический оператор

 $S = S_f = \sigma_x(i_1)\sigma_x(i_2)...\sigma_x(i_s)$, 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 $F_i = Sf_iS$, $SfS = F_lF_{l-1}...F_1$. Имея начальное состояние $|x_{in}\rangle$, можно построить (квантовый) оракул для F, и если мы, к тому же имеем оракул для f, мы можем реализовать $GSA_{x_{in}}$, и найти x_{tar} .

Пусть $G: \{0,1\}^{2n} \to \{0,1\}$ - 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 x_{tar}^i системы на шаге i надо применить $GSA_{x_{in}}$ к состоянию $|x_{tar}^{i-1} = |x_{in}^i\rangle$ системы на шаге i-1. Так мы получим последовательность состояний нашей системы вида

$$|x_0\rangle = |x_{in}^0\rangle \to |x_{tar}^0\rangle = |x_{in}^1\rangle \to |x_{tar}^1\rangle = |x_{in}^2\rangle \to \dots$$
(2.47)

Это - общая модель эволюции сложной квантовой системы во времени, в которой она переходит их 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 (2.39)). 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 образом¹⁰, 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 ампитуды 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 определенного классического состояния. К этому вопросу мы еще вернемся в главе 3.

2.11 Обратимость операций

Представление классической функции f в виде оператора (2.42) играет важную роль и для классических вычислений. Важнейшим фактором, ограничивающим масштабирование (неограниченное расширение памяти) вычислений на классических суперкомпьютерах, является тепловой шум - рассеивание энергии в окружающее пространство. Причиной шума является необратимость вычислительных операций. Формула (2.42) дает путь введения обратимости даже в классические вычисления, что может быть перспективно в смысле борьбы с шумами.

Рассмотрим задачу очистки классического устройства от шума. Пусть это устройство реализует функцию

$$x \to F(x), \tag{2.48}$$

где x - бинарная строка длины n, F - неизвестная нам функция, значения которой -

¹⁰Оптимальность GSA доказана с разных точек зрения, см., например, [14].

бинарные строки длины m. Шум - это спонтанное возмущение выходного регистра, которое мы обозначим через $\delta(x,t)$, так что вместо значения F(x) на выходе мы получаем $F(x) \oplus \delta(x,t)$, где \oplus - побитовое бинарное сложение по модулю 2, а t - момент времени.

Будем трактовать $\delta(x)$ как случайную величину отклонения результата действия нашей схемы при входном значении x.

Для отделения полезного действия F от мешающего шума δ сначала предположим, что шум распределен по нормальному закону с математическим ожиданием F(x) как функция результата y работы схемы на входе x, так что значение $\delta(x,t)$ в момент t будет просто выборкой одного элемента из нормального распределения. Тогда надо многократно запустить схему, реализующую функцию (2.48) на одном и том же аргументе x, и набрать статистику по результатам y ее действия для разных значений момента запуска t. Превалирующее значение выхода будет равно F(x), а дисперсия - мерой шума. Так можно отделить полезный сигнал от шума для одного значения входа x. Если n мало, мы так можем сделать для всех значений аргумента и определить функцию F.

Если *п* велико, такой метод не годится: перебрать все 2^n значений аргумента невозможно. Более того, если случайные величины $\delta(x)$ при разных *x* зависимы, Это значит, что физический фактор, искажающий результат работы схемы, действует на все значения *x* одновременно; как правило, это и имеет место на практике. Устранить такую помеху, оставаясь в рамках классической физики, невозможно. В этом случае надо с самого начала вместо классической схемы, реализующей функцию (2.48), использовать ее квантовый аналог (2.42). Квантовые вычислительные устройства обратимы, и потому бесшумны.

Однако и у квантовых устройств есть предел - по масштабированию их размера в числе кубитов. Это мы обсудим позже. А пока сделаем вывод. Лучший метод борьбы с шумами был бы - перевод всех элементов компьютера на квантовую основу. Это позволило бы увеличить размер памяти, но не дало бы глобального повышения масштабируемости.

Масштабирование компьютеров по памяти имеет объективный предел, который нельзя изменить, используя квантовую механику. Квантовые приборы могут дать эффект для некоторых специальных задач; одну из них можно найти в Приложении. Однако математические методы квантовой теории способны дать качественный прорыв в моделировании реальности в том случае, если мы прибегнем к интерпретациям - особым разновидностям моделирования, подходящим для сложных процессов. О них пойдет речь в главе 9.

2.12 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 [18] (см. также [19]), который фактически обобщает GSA на случай многих классических состояний каждой частицы. В нем вместо оператора Адамара, "размазывающего" амплитуду по двум возможным состояниями 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 $|j\rangle = |0\rangle, |1\rangle, ..., |N-1\rangle$ 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: $x_k \approx k/N, \ k = 0, 1, ..., N - 1$. Такое представление волнового вектора требует соответствующей дискретизации операторов. Дискретная форма оператора координаты x_{discr} и оператора импульса p_{discr} была рассмотрена в параграфе 2.4.2.

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

$$K = A^{-1}QFT^{-1} K_{diag} QFT A, \qquad (2.49)$$

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

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 ([6] - 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:

$$U_t = exp(-\frac{i}{\hbar}Ht) \approx [exp(-\frac{i}{\hbar}K \ dt) \ exp(-\frac{i}{\hbar}V \ dt)]^{t/dt}$$
(2.50)

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 $\epsilon = const$ 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 частиц 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 вычисление по алгоритму GSA, которое имеет вид $G^{\tau} = (-I_{\tilde{0}}I_{x_{tar}})^{\tau}$, мы видим полную аналогию с формулой (2.50). При этом роль оператора Уолша-Адамара в представлении $I_{\tilde{0}} = WH \cdot I_{\bar{0}} \cdot WH$ играет квантовый оператор Фуре в (2.49). 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 ампитуды для задач переборного типа, в соответствии с общим результатом [17]. В задачах, которые не ускоряются распараллеливанием, квантовый компьютер не проявляет преимуществ по сравнению с классическим, за исключением только лишь удивительного его свойства нелокальности.

2.13 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. Пользовательский интерфейс: квантовые гейты или программные примитивы

Внутренняя часть операционной системы: общая программа управления вычислением (ядро)+ драйверы квантовых устройств

Квантовая часть компьютера: физические кубиты и управляющие устройства

Рис. 2.8: Схема квантового компьютера

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. 2.8).

Р.Фейнман в работе [9] предложил пользовательский интерфейс, основанный на массиве квантовых гейтов, реализующих простейшие унитарные операторы на малом числе кубитов. Этот интерфейс прямо следет 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 свяязаны 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 ([20]) 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. КОУ или onepamopы Kpayca ([21]), применяемое для описания декогерентности, при детальном моделировании на основе фейнмановского 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.

2.13.1 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 реальный 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, ..., 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 2.12.

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 и на размерность гильбертова пространства состояний, которая должны быть жестко ограничена сверху. Эту проблему мы рассмотрим в третьей главе.

Итак, ядро квантовой операционной системы должно быть приспособлено для воспроизведения реальных сценариев физического мира для систем сколь угодно большой сложности на искусственно созданных или выделенных из природы структурах. Качество воспроизведения - это способность управлять сценариями реального мира с помощью такого моделирования. На сегодняшний день носителями квантовой операционной системы могут быть классические компьютеры или суперкомпьютеры.

2.13.2 Перспективы квантового программирования

Программирование для квантового компьютера производится на основе стандартных моделей реальности, которые позволяют проводить численный расчет динамики состояния. Главные требования к таким моделям:

1. Они должны исходить из первых принципов, хорошо проверенных и универ-

сальных.

2. Они должны включать все известные фундаментальные взаимодействия, прежде всего - взаимодействие зарядов и электромагнитного поля.

3. Они должны доопускать масштабирование, то есть расширение модели добавлением в нее новых элементов по мере надобности.

4. Они должны быть достаточно экономичными, чтобы их можно было реализовать на реальных вычислительных машинах.

Только соблюдение всех этих требований сделает квантовое программирование осмысленным занятием. Мы видим, что в точности удовлетворить всем этим требованиям в рамках копенгагенской квнатовой теории невозможно. Требование масштабирования модели при соблюдении первых принципов старой квантовой теории вступает в противоречие с ее экономичностью уже для простых молекул, не говоря о более сложных структурах и процессах. Поэтому мы должны применять редукцию квантовых состояний, принимая все следствия из этой редукции, в том числе и противоречащие традиционным представлениям о главенстве математического анализа при описании физического мира.

Модели, отвечающими данным требованиям при известной редукции формального аппарата квантовой физики, существуют. Это конечномерные модели квантовой электродинамики, которые мы рассмотрим во второй главе.

2.13.3 Дуальность квантового программного обеспечения

Масштабирование ядра квантовой операционной системы налагает серьезные ограничения на ее реализацию и на программирование как таковое. Одно дело, когда мы занимаемся вопросами химии, совсем иное, когда мы пытаемся применить квантовые методы в биологии, или даже выйти на уровень политики. Для суперсложных систем и явлений, какими являются политические процессы, должна применяться отнюдь не эвристика современной физики.

Мы считаем, что все явления окружающего мира имеют физические механизмы, и масштабирование квантового компьютера до размеров управления политикой является неизбежным следствием этого убеждения. Влияние, которое физика сможет оказать, и уже оказывает, на политику, велико; эти вопросы мы рассмотрим в четвертой главе. Но есть и обратное влияние. Проблемы человеческого общества определяют цели и методы самой физики. Это относится и к квантовым вычислениям.

Традиционный подход копенгагенской теории ставит физику сложных процессов на службу менеджменту, на службу управленцам и распорядителям в человеческом обществе. Исходный тезис о суперпозиции базисных состояний предполагает равно технически возможной реализацию любого из таких состояний, что делает эти состояния, в известном смысле, равноправными. Яркая иллюстрация этого тезиса так называемая "теорема" об отсутствии скрытых параметров в квантовой механике. Данный тезис - уже для простых двух-частичных систем имеет ограниченное применение; мы вернемся к нему при обсуждении явления квантовой нелокальности в третьей главе.

Но политика - сфера деятельности людей; в обществе, состоящем из уникальных индивидов, правит индивидуальность, самосознание, и свойственное копенгагенскому подходу представление об одинаковости человеческих "атомов" не работает. Квантовая политика должна давать картину мира со стороны рядового члена общества - простого человека, а не управленца, командующего миллионами. Индивидуальный взгляд на Природу - важнейшая отличительная черта любой научной теории, которая претендует на хоть какую-то эффективность. Квантовая политика должна описывать мир с точки зрения отдельного человека. Ее цель - помочь отдельному индивиду принять верное решение. Квантовое принятие эффективного решения - вот ее задача. Для этого необходимо задействовать биологический уровень организации материи.

Дуальность квантового программирования вытекает из двух противоположных точек зрения: со строны глобальных управленцев и со стороны отдельного индивида. Это касается и обобщения математических моделей на очень сложные системы. Мы кратко коснемся этой темы в третьей главе.

Отмеченные особенности делают квантовое программирование не только чрезвычайно востребованным, но и очень интересным занятием.
Глава 3

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 эфекты 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 дальнодействия: 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 $R^4 \to R^4$ пространства - времени в 4-вектор поля: $\phi(R, t)$, $\bar{A}(R, t)$. Для получения дискретизации K этого классического пространства состояний поля надо а) разбить пространство R^3 и время t на конечное число ограниченных сегментов, 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 \bar{A} (см. [4]). И только после такой процедуры, получив гигантское количество элементов в множестве K классических состояний, рассмотреть отображения вида $|\Psi_{field}\rangle$: $K \to C$, 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 \bar{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.

3.1 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 ($\bar{p}, \bar{\epsilon}$), где \bar{p} - вектор "импульса поля", равный по модулю $\hbar\omega/c$, где *c*- скорость света, ω - частота соответствующего осциллятора, $\bar{\epsilon}$ - направление поляризации. За деталями читатель может обратиться к книге [4].

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 \bar{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

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$
(3.1)

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 A.1.1.

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.

3.2 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 $\omega_{Rb} \approx 10^{10} \ sek^{-1}$ 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 [3]. 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, ...

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

$$g = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{V}} dE(x), \qquad (3.2)$$

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 быстрейшего 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 (3.2) можно найти в книге [4]. Константа g, вообще говоря, комплексна, но можно с помощью домножения базисного вектора $|1\rangle$ на подходящее комплексное число $e^{i\phi}$ добиться,

чтобы *д* было вещественным неотрицательным числом, что мы и будем в дальнейшем

Таким образом, взаимодействие поля с атомом внутри полости есть взаимодействие атома с квантовым гармоническим осциллятором, описанным в Приложении. Из параграфа А.1.1 Приложения вытекает, что условная "координата" x поля с точностью до констант выражается через операторы рождения a^+ и уничтожения aфотона в поле как $x = a^+ + a$.

предполагать.

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

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

$$(3.3)$$

так что число фотонов n = 0, 1, 2, ..., 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 $gxX = g(a^+ + a)(\sigma^+ + \sigma)$. 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:

$$H_{JC} = \hbar\omega a^+ a + \hbar\omega \sigma^+ \sigma + g(a^+ + a)(\sigma^+ + \sigma).$$
(3.4)

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 $H \kappa H + cI$, 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. 3.1: Осцилляции Раби между населенностями состояний $|n, 0\rangle$ и $|n - 1, 1\rangle$.

более удобный вид

$$H_{JC}^{RWA} = \hbar\omega a^+ a + \hbar\omega \sigma^+ \sigma + g(a^+ \sigma + a\sigma^+).$$
(3.5)

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, ..., m = 0, 1, иопускать 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

$$H_n = \begin{pmatrix} & \hbar\omega n & g\sqrt{n} \\ & g\sqrt{n} & \hbar\omega n \end{pmatrix}.$$
 (3.6)

Выражение (3.6) 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 3.1).

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.

3.3 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 (2.37).

Рассмотрим сначала самый простой случай, когда в полости в первоначальный момент находится один фотон и атомов нет вообще. Гамильтониан тогда имеет вид $H_{ph} = \hbar \omega a^+ a$, 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 имеет вид

$$\begin{pmatrix} p_0(t) & \beta(t) \\ \bar{\beta}(t) & p_1(t) \end{pmatrix}, \qquad (3.7)$$

где $p_0(0) = 0$, $p_1(0) = 1$. Уравнение (2.37) в нашем случае имеет вид

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

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

Рассмотрим теперь немного более сложный процесс утечки фотона из полости с одним двухуровневым атомом, первоначально находящимся в возбужденном состоянии $|1\rangle$ в отсутствии 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. [22]). 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

$$\begin{pmatrix} p_{00}(t) & \xi(t) & \alpha(t) \\ \bar{\xi}(t) & p_{01}(t) & \beta(t) \\ \bar{\alpha}(t) & \bar{\beta}(t) & p_{10}(t) \end{pmatrix}.$$
(3.8)

При численном моделировании важно иметь в виду следующее

Рис. 3.2: Динамика диагонали матрицы плотности: левый рисунок - для $g_{out} = 0.5, g_1 = 1$, правый - для $g_{out} = 1, g = 1$. Зеленым цветом изображена зивисимость $p_{00}(t)$, 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 можсно 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 3.2.

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 .

3.4 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 КОУ 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 Поккельса в полость, что повышает γ , или уменьшая площадь ячейки, что уменьшает γ .



Рис. 3.3: 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 $\gamma \to \infty$ наполнение стока падает практически до нуля! Это и есть квантовое бутылочное горлышко.

Объяснение этого эффекта дано на рисунке 3.3. 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. 3.9). Результат моделирования этого эффекта для 2 полостной системы показан на рисунке 3.4.

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



Рис. 3.4: 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 $\gamma_{out} \to \infty$ в квантовом случае график стремится к бесконечности. Рисунок взят из статьи [22].

мерениями - эффет 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 последствиям².

3.5 Модель Тависа-Каммингса

Модель Джейнса-Каммингса-Тависа (TC) описывает динамику группы n двухуровневых атомов в оптической полости, взаимодействующих с одномодовым полем внутри нее с энергиями $g_1, g_2, ..., g_n$. 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, физиче-

²Сфера применимости модели Джейнса-Каммингса с оператором утечки фотонов ограничена естественным условием: энергия полости не должна возрастать. При больших значениях интенсивности утечки это условие нарушается. Физически это означает, что удаление фотона из полости обусловлено приложением дополнительной энергии извне, что делает данную модель не вполне адекватной, так как в ней нет механизма такого притока энергии. Поэтому конкретные применения эффекта квантового бутылочного горлышка нуждаются в уточнении самой модели.

ские 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. [23],[80],[81]) H_{TC}^{RWA} для n двухуровневых атомов в оптической полости, частота которой совпадает с частотой фотона атомного возбуждения имеет вид:

$$H_{TC} = H_c + H_a + H_i, \ H_c = \hbar \omega a^+ a, \ H_a = \hbar \omega \sum_{j=1}^n \sigma_j^+ \sigma_j, \ H_i = (a^+ + a)(\bar{\sigma}^+ + \bar{\sigma}).$$
(3.9)

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

Итак, атомы в данной модели взаимодействуют друг с другом только через поле, то есть через обмен фотонами.³

3.6 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

 $Invis^{RWA} = Ker(\bar{\sigma}) \cap Ker(\bar{\sigma}^+).$

³В модель TC 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.

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 тоже $Dark = Trans = Invis = Ker(\bar{\sigma}^+ + \bar{\sigma})$. Поскольку для любого базисного атомного состояния $|\Psi\rangle_{at}$ его образы при применении операторов $\bar{\sigma}^+$ и $\bar{\sigma}$ не имеют общих ненулевых базисных компонент, причем эти компоненты у них имеют число единиц, различающееся на 2, мы получаем $Ker(\bar{\sigma}^+ + \bar{\sigma}) = Ker(\bar{\sigma}) \cap Ker(\bar{\sigma}^+)$ и $Dark = Invis^{RWA}$.

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

$$|0\rangle_p|j\rangle \longrightarrow |1\rangle_p|j'\rangle, \qquad (3.10)$$

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 состояниий $|j\rangle$, для которых переход вида (3.10) 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

$$\sum_{s \in [j']} \lambda_s = 0, \tag{3.11}$$

для всех $j' = 0, 1, \ldots, 2^n - 1$. Заметим, что достаточно потребовать выполнение данных равенств только для $j' = 0, 1, \ldots, 2^n - 2$, 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, ..., 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

$$\begin{array}{ll} (4,2)_1 &= (|0*1*\rangle - |1*0*\rangle)(*|0*1\rangle - |*1*0\rangle) \\ &= |0011\rangle - |0110\rangle - |1001\rangle + |1100\rangle), \\ (4,2)_2 &= (|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle)^{\otimes 2} = |0101\rangle - |0110\rangle - |1001\rangle + |1010\rangle, \\ (4,2)_3 &= (|0**1\rangle - |1**0\rangle)(|*01*\rangle - |*10*\rangle) \\ &= |0011\rangle - |0101\rangle - |1010\rangle + |1100\rangle). \end{array}$$

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.5.

Отметим, что для трех-уровневых систем доказать аналогичное данной теореме утверждение пока не удалось⁴.

Описание собственных состояний для гамильтониана Тависа- Каммингса приведено в диссертации Михаеля Тависа [81]; 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.

3.7 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. 3.5). Соответствующее КОУ (2.37) будет иметь два фактора декогерентности: $A_{out} = a$, $A_{in} = a^+$.

⁴В работе [26] приведено внешее, алгебраическое описание темных состояний; но из него нельзя непосредственно получить того явного описания, которое дается приведенной Теоремой даже для двухуровневых атомов.



Рис. 3.5: Полость в фотонной "ванне"

Если для начального состояния $\rho(0)$ системы "атомы+поле" решение (2.37) 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 (2.37).

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

$$\mathcal{G}(T)_f = c \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega n}{KT}} |n\rangle \langle n|, \qquad (3.13)$$

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 (2.37) в модели TC (TC-RWA) имеют вид $|0\rangle_{ph}|D\rangle$, где $|D\rangle$ есть темное состояние в соответствующей модели TC (TC-RWA). Смешанные стационарные состояния есть смеси таких состояний.

Действительно, стационарные состояния есть решения квантового основного уравнения (2.37) при $\gamma_{in} = 0$, так что $\dot{\rho} = 0$. Представив чистое стационарное состояние $|S\rangle$ в виде суммы по энергиям поля:

$$|S\rangle = |0\rangle_{ph} |\Phi^{0}\rangle_{at} + |1\rangle_{ph} |\Phi^{1}\rangle_{at} + \dots + |n\rangle_{ph} |\Phi^{n}\rangle_{at} + \dots , \qquad (3.14)$$

где нижний индекс обозначает полевое и атомное состояние, мы видим, что в (3.14) 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.

Набросок доказательства

Мы разложим гамильтониан $H = H_{at} + H_{ph}$ на атомную часть H_{at} и чисто полевую компоненту $H_{ph} = \hbar \omega a^+ a$, 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 (2.37) 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

$$\rho(t) \approx (U_{dt}U'_{dt}L'_{dt})^{t/dt}(\rho),$$
(3.15)

аналогичное формуле Троттера, которое вытекает из приведенного в первой главе эйлерова метода решения уравнения (2.37).

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 $|i\rangle$, $|j\rangle$ - фоковские 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, ..., и опускать обозначения атомных состояний I, J, которые всегда будут одними и теми же. Учитывая определение операторов рождения и уничтожения фотонов, мы имеем:

$$\tilde{\rho}_{ij} = \rho_{ij} + \gamma_{out}(\sqrt{i+1}\sqrt{j+1}\rho_{i+1,j+1} - \frac{i+j}{2}\rho_{ij}) + \gamma_{in}(\sqrt{i}\sqrt{j}\rho_{i-1,j-1} - (\frac{i+j}{2}+1)\rho_{ij}).$$
(3.16)

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 (3.16), это умножение не сможет скомпенсировать в первом порядке по dt изменение ρ_{ij} в (3.16); таким образом, недиагональные элементы матрицы ρ нулевые. Рассмотрим диагональ этой матрицы. Из равенства (3.16) мы имеем:

$$\tilde{\rho}_{ii} = \rho_{ii} + \gamma_{out} \left((i+1)\rho_{i+1,i+1} - i\rho_{ii} \right) + \gamma_{in} \left(i\rho_{i-1,i-1} - (i+1)\rho_{ii} \right).$$
(3.17)

Из уравнения (3.17) мы можем найти рекуррентное уравнение для диагональных элементов, но можно найти их вид и проще.

Мы применим к диагонали ρ представление так называемой квантовой гидродинамики. Так как никаких когерентностей нет, у нас имеется просто распределение вероятностей между состояниями, причем общая вероятность сохраняется с течением времени. Таким образом вероятности просто перераспределяются между базисными состояниями так,что можно вести понятие потока вероятности между двумя соседними состояниями. Поток вероятности от базисного состояния $|i\rangle\langle i|$ к состоянию $|i+1\rangle\langle i+1|$ есть $(i+1)\rho_{ii}\gamma_{in}$, а обратный поток, который должен быть равен ему, 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 (3.17), 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 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

$$\rho_{stat} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |\tilde{0}_n\rangle \langle \tilde{0}_n| + \nu_n |\tilde{1}_n\rangle \langle \tilde{1}_n|.$$
(3.18)

Так как по Теореме 1 $\rho_{stat} = \mathcal{G}(T)_f \otimes \rho_{at}$ и фотонная часть $\mathcal{G}(T)_f$ диагональна, в выражении (3.18) 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.

3.8 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 (2.37), вообще говоря, сходится к аттрактору - замкнутой траектории в операторном пространстве Лиувилля (см. 2.6). 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: $\rho(t) = |\alpha|^2 |s\rangle\langle s| + e^{-i\omega t}\alpha\bar{\beta}|s\rangle\langle 00| + e^{i\omega t}\bar{\alpha}\beta|00\rangle\langle s| + |\beta|^2|00\rangle\langle 00|$. Это и есть простейшая форма термического аттрактора для двухатомного ансамбля. Для четырех и более атомов аналогичным образом можно построить и более сложные аттракторы (см. [22]).

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.

Замечание. Термические аттракторы могли бы возникнуть в реальности, если бы мы смогли получить состояние, компоненты суперпозиции которого имеют различное значение суммарной энергии, например, вида $|\Psi\rangle = |vac\rangle_{ph}|\psi\rangle_{at}$. Однако отсутствуют способы получения таких состояний: любой процесс, изменяющий энергию системы, связан с жестким взаимодействием с окружением, при котором когерентность исчезает. Поэтому термические аттракторы являются чисто математическим курьезом, не имеющим реального воплощения. Этот курьез, однако, показывает ограниченность самого понятия гильбертова пространства квантовых состояний; не всякий вектор из этого пространства является физически реализуемым. Для того, чтобы избежать подобных миражей, надо выбирать начальное состояние всегда в виде классического, базисного состояния. При этом, равноправие базисов, представляющее удобства для вычислений, также не является абсолютным тезисом: глобальное описание нашего мира всегда происходит в пространственно-временном базисе. Только лишь для ограниченного класса очень важных задач микромира, которыми мы занимаемся, этот тезис очень полезен.

3.9 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 $\mu_{i,j}$, а амплитуда обратного перехода будет иметь комплексно сопряженный вид $\bar{\mu}_{i,j}$. Эта амплитуда имеет вид $exp(ia \ l_{i,j})$ где $l_{i,j}$ - длина волновода, соединяющего полости *i* и *j*, *a* - некоторая константа. Подбирая длины волноводов, мы можем добиться, чтобы эти числа были вещественными и неотрицательными, что мы и будем делать всегда по умолчанию.

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_{TC}^i обозначает гамильтониан Тависа -Каммингса для полости с номером i = 1, 2, ..., m. Будем также снабжать нижними индексами номера полости соответствующие ей полевые операторы $a_i^{(+)}$.

Гамильтониан модели TCH с нашим предположением о длинах волноводов, имеет вид

$$H_{TCH} = \sum_{i=1}^{m} H_{TC}^{i} + \sum_{1 \le i < j \le m} \mu_{ij} (a_i^+ a_j + a_i a_j^+).$$
(3.19)

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 3.4.

3.10 Запутывающий гейт в модели ЈСН

Квантовый компьютинг 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. [28]), где используются измерения в качестве эрзаца взаимодействия, и ее усовершенствование [29] с телепортацией (см. [30]), значительно повышающее ее эффективность, а также ряд вариантов этой схемы для атомов (см., например, [31]). 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, [32]). Так, гейт СNOT был реализован с использованием внешних - колебательных - степеней свободы атома (см. [33]). Однако суть квантового компьютинга - 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 [13] на том же оборудовании, что и алгоритм Шора [6]. 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 [34], 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 [34] - 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 $|10\rangle$, родственный гейту CSign, который реализован в [34]; разницы нет никакой, так как $coCSign = CSign\sigma_x(y)$, а однокубитные гейты реализуются линейными оптическими устройствами.

3.11 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" ([80]) имеет вид

$$H = H_{JC} = H_0 + H_{int}; \ H_0 = \hbar\omega a^+ a + \hbar\omega \sigma^+ \sigma, \ H_{int} = g(\alpha^+ \sigma + a\sigma^+), \tag{3.20}$$

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, ... - 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:

$$U_{\tau_1/2} = -i\sigma_x, \ U_{\tau_1} = -I, \ U_{2\tau_1} = I, \tag{3.21}$$

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 (3.21). Как отмечено в работе [34] 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

$$2n_2\tau_2 \approx 2n_1\tau_1 + \frac{\tau_1}{2},\tag{3.22}$$

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

3.12 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 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 3.6, а участвующие полости - на рисунке 3.7. 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



Рис. 3.6: Последовательность операций при реализация гейта coCSign: $|x,y\rangle \rightarrow (-1)^{x(y\oplus 1)}|x,y\rangle$ на асинхронных атомных возбуждениях в оптических полостях, $\delta \tau = \tau_{jump}/2$



Рис. 3.7: Реализация гейта coCSign

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 [37] 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.

3.13 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 3.8. Это устройство реализует преобразование фотонов в волноводах 1 и 2 вида:

$$|n_1 m_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} (a_1^+)^n (a_2^+)^m |0_1 0_2\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{n!m!}} [\frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ + a_2^+)]^n [\frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ - a_2^+)]^m |0_1 0_2\rangle,$$
(3.23)

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.



Рис. 3.8: Светоделитель.

3.14 Качество реализации гейта coCSign

Мы рассмотрели схему реализации гейта соCSign в предположении, что все устройства срабатывают идеально, что само по себе очень оптимистично: например, скорость срабатывания реальных ячеек Поккельса на два порядка ниже, чем требуется для использования их в подобных схемах (см. [34]). Но даже при этом предположении работа гейта может быть лишь приближенной, в силу неточности равенства (3.22). Попытка повысить точность этого равенства увеличением n_1 и n_2 приводит к увеличению времени работы гейта, и к увеличению вероятности потери фотона, жизнь которого в полости не превосходит нескольких миллисекунд.

Однако основной источник нарушения когерентности в предложенной схеме уширение спектральных линий полости. Дело в том, что для времени переноса фотона $\delta \tau$ по оптическому волокну из полости в полость и разбросом энергии ΔE фотона имеется соотношение неопределенностей "энергия - время":

$$\delta \tau \cdot \Delta E = \hbar. \tag{3.24}$$

Это означает, что при быстром переносе фотона мы получаем большую ошибку в его частоте, и, следовательно, сильно уменьшаем время его жизни в полости. Здесь мы, фактически, выходим за пределы применимости модель Джейнса-Каммингса-Хаббарда, и оценить роль такого фактора точно не представляется возможным. Грубые оценки показывают, что для такой модели вычисления можно реализовать алгоритм Гровера для 4 кубитов (см. [35]).

3.15 О гейтовой модели вычислений

Гейтовая модель вычислений была фактически предложена еще в 80-х годах Фейнманом, и до сих пор является основной в квантовых вычислениях. Однако само конструирование гейтов является трудной задачей. Проблема в том, чтобы обеспечить нужный результат действия гейта на всех 4 состояниях двухкубитной системы. Мы видим, что даже при идеально работающей аппаратуре выполнить это условия можно лишь приближенно.

В то же время, тогда как однократная ошибка, сделанна в ходе квантового вычисления, благодаря унитарности эволюции не меняется, то систематическая ошибка, которая совершается в каждом гейте, приводит к экспоненциальному росту результирующей ошибки с ростом числа операций. Если точность одного гейта равна 0.9, что само по себе великолепный и труднодостижимый результат, то уже для четырех последовательных применений такого гейта ошибка 1 – 0.9⁴ будет почти такой же, как и результат, то есть неприемлемо большой. Точность одного гейта должна быть почти идеальной, с величиной ошибки около 10⁻⁴, для того, чтобы можно было говорить о перспективах применения квантового процессора как массива гейтов.

Технические модификации гейтовой модели, например, адиабатические вычисления, могут служить некоторой полезной альтернативой, но не в состоянии радикально изменить ситуацию.

Тем не менее, гейтовая модель квантовых вычислений очень важна для создания операционной системы квантового компьтера, которая управляла бы гибридным вычислительным процессом, целью которого было бы не соревнование с классическим суперкомпьютером на быстроту решения задач, а принципиальное повышение качества моделирования сложных процессов. Именно такое моделирование и является целью проекта квантового компьютера.

3.16 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, ..., 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 $A_1 = a_N a_{sink}^+$ будет представлять вытекание фотона из последней полости в сток (sink). Физически сток будет не полостью, а детектором, соединенным с концевой полостью оптоволокном. Задавая начальное состояние в виде нахождения фотона в начальной полости $|1\rangle$, мы, решая КОУ 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 $P(t) = \langle sink | \rho | sink \rangle$, 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 фиксациях 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.

3.16.1 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.

3.16.2 Оптическая полупроводимость

Для любого графа G можно исследовать не только равенство нулю функции проводимости P(t), но и ее поведение при $t \to \infty$. Назовем проводимость данного графа полной, если $P(t) \to 1$ $(t \to \infty)$, и неполной, если $P(t) \to a$, $(t \to \infty)$, 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_1G_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} , склееных из двух одинаковых "половинок", показатель полупроводимости равен 1/2.

Численное моделирование показывает, 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.

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

$$\{k_B \succ = \frac{1}{\sqrt{C_n^k}} \sum_{\substack{j \in J(B) \ 1(j) = k}} |j\rangle, \tag{3.25}$$

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 {, }, ≻, ≺ примем дираковские правила, аналогичные правилам обращения с символами |, >, <.

Пусть L_{eq}^{B} - равномерное подпространство, то есть линейная оболочка состояний вида $|p\rangle\{k_B \succ для$ всех $k = 0, 1, \ldots, |B|; p = 0, 1, \ldots,$ 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

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

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

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

Тогда имеем

$$\tilde{H}^{B}_{i_{p},i_{B};j_{p},j_{B}} = \begin{cases} & h\omega(p+b), & \text{если } i_{B} = j_{B}, \ i_{p} = j_{p}, \\ & g(n-b)C^{b}_{n}\sqrt{\frac{p+1}{C^{b}_{n}C^{b+1}_{n}}}, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$
(3.26)

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 (3.25), 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 + 1уровнями: $\{0 \succ, \{1 \succ, \{2 \succ, ..., \{n \succ, так, что энергетические щели между двумя$ $соседними уровнями будут одинаковыми: <math>E_k - E_{k-1} = \hbar \omega, k = 1, 2, ..., n$.

Для равномерных состояний имеет место аналог осцилляций Раби - коллективные осцилляции. Пусть n = 2k четно. Разобъем атомы на две группы, и будем обозначать первую группу нижним индексом 1, а вторую - нижним индексом 2. Рассмотрим два базисных состояния: $|\psi_1\rangle = |0\rangle_{ph}|00...0\rangle_1|11...1\rangle_2$ и $|\psi_2\rangle = |0\rangle_{ph}|11...1\rangle_1|00...0\rangle_2$. 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 супернозицию, 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.



Рис. 3.9: Коллективные осцилляции для системы 16+16. Острота пиков при переходе от возбуждения одной группы атомов к другой

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 синусоидального вида одноатомных осцилляций (см. рисунок 3.9). 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.

3.17.1 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 участву-



Рис. 3.10: 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 [22].)

ют 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 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. [83]); он имеет место, например, в светособирательном комплексе зеленых серных бактерий (так называемый FMOкомплекс, см. [84]).

Эффект DAT численно моделируется с помощью квантового основного уравнения для цепочки из двух полостей с одним атомом в каждой, результат приведен на рисунке 3.10.

3.18 Системы много-уровневых 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*^{*j*} взаимодействия с полем выделенной моды *i* имеет вид

$$H_{TC}^{i} = \hbar \omega_{i} a_{i}^{+} a_{i} + (a_{i}^{+} + a_{i}) \sum_{j=1}^{n} (\sigma_{ji}^{+} + \sigma_{ji}),$$

$$H_{TC}^{i,RWA} = \hbar \omega a_{i}^{+} a_{i} + (a_{i}^{+} \bar{\sigma}_{i} + a_{i} \bar{\sigma}_{i}^{+}), \ \bar{\sigma}_{i} = \sum_{j=1}^{n} g_{i}^{j} \sigma_{ji},$$
(3.27)

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. При этом для d - уровневых атомов одна мода соответствует конкретному переходу $i_0 \leftrightarrow i_1$ между двумя выделенными уровнями $|i_0\rangle$ и $|i_1\rangle$ любого атома.

Пусть для ансамбля A, состоящего из d одинаковых d- уровневых атомов, различающихся только энергиями взаимодействия с модами поля, определен граф Gвозможных разрешенных переходов между уровнями для каждого j-го атома, j = 1, 2, ..., 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

$$H_{TC}^{G} = \sum_{i \in J_{G}} H_{TC}^{i}, \ H_{TC}^{G,RWA} = \sum_{i \in J_{G}} H_{TC}^{i,RWA}.$$
(3.28)

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 $j \in \{1, 2, ..., n\}$, 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 имеет место 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

$$|D_{G,A}\rangle = \sum_{\pi \in S_d} (-1)^{\sigma(\pi)} w(1,\pi(1)) w(2,\pi(2)) \dots w(d,\pi(d)) | \pi(1),\pi(2),\dots,\pi(d)\rangle, \qquad (3.29)$$

где π пробегает все перестановки на множестве атомов 1, 2, ..., 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 (3.29) примет вид

$$g^1|01\rangle - g^2|10\rangle \tag{3.30}$$

с точностью до нормировки; это состояние темное в RWA. Из определения весов w(j,i) следует, что сумма двух слагаемых из (3.29), отличающихся только перестановкой состояний одной пары атомов, будут с точностью до коэффициента иметь вид (3.30). С другой стороны, состояние (3.30) 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 $G_1, G_2, ..., G_r$ графа G назовем накрытием, если он состоит из полных подграфов и их объединение дает G. Накрытие точное, если любой G_i , i = 1, 2, ..., rявляется компонентой связности графа G.

Для ансамбля *n d*-уровневых атомов в свете работы [26] 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 накрытий $\{G_i\}$ графа G и разбиений множества всех атомов A на подмножества A_i .

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

 G_i, A_i -мультисинглетов для точных накрытий $\{G_i\}$ 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 [40]. 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 3.11, RWA-темное подпространство будет иметь размерность 7 и один из его базисов выглядит так:



Рис. 3.11: 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.

3.19 Оптический отбор темных состояний

Оптический отбор темных состояний впервые предложен в работе [27]; здесь мы будем использовать результаты данной работы и графики, взятые из нее.

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 приготовленного 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 3.12) 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



Рис. 3.12: 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.

полости.

Время срабатывания детектора $d\tau_{click i}$ на шаге *i* является случайной величиной, 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 (2.37), 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 (2.37), 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 КОУ. 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 $P(t) = \langle 0_{ph} 0_1 0_2 | \rho(t) | 0_{ph} 0_1 0_2 \rangle + \langle 0_{ph} s | \rho(t) | 0_{ph} s \rangle$, 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 Поккельса, 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 Поккельса 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 КОУ с оператором Линдблада $A_1 = a$ - удаление фотона из полости:

$$i\hbar\dot{\rho} = [H,\rho] + i\mathcal{L}(\rho), \quad \mathcal{L}(\rho) = \gamma(a\rho a^+ - \frac{1}{2}(\{a^+a,\rho\}), \quad H = H_{TC}.$$
 (3.31)

Его решение $\rho(t)$ можно приближенно найти, представив в виде последовательности двух шагов, из которых на первом делается один шаг в решении унитарной части (3.31): $\tilde{\rho}(t+dt) = e^{-iHdt/\hbar}\rho(t)e^{iHdt/\hbar}$, а на втором - шаг в решении уравнения (3.31) 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 Поккельса 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 длительно 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



Рис. 3.13: 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.

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 разобранному случаю двух несовместных альтернатив. Подавление внедиагональных элементов матрицы плотности установлено 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 3.13.

На рисунке 3.14 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 3.15.

Моменты щелчков детектора $d\tau_1, d\tau_2, ..., d\tau_{L_{s,t}}$ 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. 3.14: Наполнение стока при одном испытании: слева при $\gamma=0.01g,$ справа при $\gamma=g.$



Рис. 3.15: 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 $dt_{\rm click}$ моделируется измерение стока, то есть статистическое испытание факта вылета фотона из полости, исходя из рассчитанной по уравнению (3.31) вероятности. При этом уравнение (3.31) решается методом Эйлера с шагом по времени dt, причем временные интервалы в вычислительной модели выбирались так, чтобы для любого

0.035

0.03

0.025

p ^{0.02}

0.015

0.01

0.005

0

0

200

шага по времени выполнялись бы неравенства $dt < dt_{click} \ll d\tau_{click} i \leq dT$. Если фотон вылетел, испытание считается завершенным, мы снова запускаем его в полость, изменяя начальное условие для (3.31), 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 (3.31): $dt = 10 \, \text{ns}$, 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 $n_{bor} = 2T_{gen}/(a_s + a_t)$ как среднее число щелчков детектора за общее время T_{gen} наблюдения, $T_{gen} = NdT$ и применим наш статистический критерий так: при числе щелчков $n_{click} > n_{bor}$ мы имеем синглетное состояние $|s\rangle$, в противном случае - триплет $|00\rangle$.

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



1000

1200

1400

1600

800

Многоуровневый случай 3.20

400

600

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

Рис. 3.16: Плотность распределения среднего времени вылета фотона за 1000 испытаний, точность моделирования dt = 1 ns

p(t), T_{click} = 50 ns

 $|t_0\rangle$

|s₂>

вида (3.29) и дополнить его до ортонормированного базиса "светлыми" состояниями. При этому 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, $\gamma = g$, $dt_{\text{click}} = 100 \text{ ns}$, N = 1000. Графики функции распределения времени срабатывания детектора даны на рисунке 3.17, плотность распределения среднего времени щелчка детектора для разных состояний даны на рисунке 3.18.



Рис. 3.17: 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,

 $a_{|10\rangle_{ph}|0\rangle_2(|0_11_3\rangle - |1_10_3\rangle)} = 22.423 \text{ mks}, a_{|10\rangle_{ph}(|01\rangle - |10\rangle)|0\rangle} = 22.423 \text{ mks}.$



Рис. 3.18: Плотность распределения среднего времени вылета фотона за 1000 испытаний, $dt_{click} = 100 \ ns, \ \gamma = g.$

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.

Итак, мы изучили теорию темных состояний при постоянном гамильтониане. Поведение этих состояний при переменном гамильтониане рассмотрено в Приложении, в секции А.9.

Глава 4

Адиабатические квантовые вычисления

До сих пор мы рассматривали вычисления операционного типа, состоящие из последовательных применений квантовых гейтов. Существуют и непрерывные квантовые вычисления, называемые адиабатическими. Они основаны на медленном изменении управляющего гамильтониана системы кубитов. При этом основное состояние исходной системы будет переходить в основное состояние измененной системы - в этом суть адиабатической теоремы.

Рассмотрим уравнение Шредингера с меняющимся гамильтонианом H(t)

$$i\hbar|\Psi\rangle = H(t)|\Psi\rangle.$$
 (4.1)

Его решение будет так же, как и в стационарном случае, задаваться формулой

$$|\Psi(t)\rangle = exp(-\frac{i}{\hbar}H(t)t)|\Psi(0)\rangle, \qquad (4.2)$$

но только теперь экспоненту надо понимать как хронологическую экспоненту. Как при плавном изменении гамильтониана H будут меняться его собственные состояния? Если бы H вообще не менялся, они оставались бы неизменными (за исключением фазы, разумеется). Но если H меняется, причем очень медленно, то как будут изменяться собственные состояния этого гамильтониана? Оказывается, они будут эволюционировать как решения задач Коши для уравнения Шредингера с константой $\hbar = 1$.

Таким образом, адиабатическая теорема устанавливает особый статус уравнения Шредингера: этот уравнение является математическим фактом. Физический элемент в нем - только значение постоянной Планка.

4.0.1 Адиабатическая теорема

Сначала мы рассмотрим идею квантовых адиабатических процессов, и докажем ослабленный вариант адиабатической теоремы.

Рис. 4.1: Отклонение основного состояния от результата плавно меняющейся унитарной эволюции. Прямое вычисление по данной схеме ведет к очень громоздким выражениям. Для доказательства адиабатической теоремы надо охватить весь процесс сразу на большом интервале времени. Здесь ключевую роль играют интерференционные эффекты - изменение фазы начального состояния с периодом $2\pi/E_0$ и первого возбужденного с периодом $2\pi/E_0$, причем периоды также меняются со временем! Поэтому роль играет разность энергий $E_1 - E_0$.



Пусть у нас имеется основной гамильтониан H_0 и целевой гамильтониан H_1 . Мы хотим рассмотреть медленное изменение первого гамильтониана, которое приводит в итоге ко второму. Это изменение - гомотопия, задаваемая вещественной функцией s(t): s(0) = 0, s(T) = 1, где T - большое число, так что $H(t) = (1 - s(t))H_0 + s(t)H_1$ - значение измененного гамильтониана в момент времени t.

Адиабатическая теорема состоит в том, что при очень малом значении $\partial H/\partial t$ любое собственное состояние $|\Phi_k^0\rangle$ гамильтониана H_0 в результате квантовой эволюции, индуцированной гамильтонианом H(t), перейдет с большой точностью в соответствующее собственное состояние $|\Phi_k^1\rangle$ гамильтониана H_1 . При этом медленность изменения H(t) означает, что максимальное значение $\partial H/\partial t = \partial s/\partial t$ очень мало по сравнению с минимальной энергетической щелью g - то есть минимальным значением разности собственных энергий $E_k(t) - E_s(t)$ по всем k > s и по всем значениям $t: 0 \le t \le T$. Мы предполагаем собственные состояния невырожденными, так что равенство $E_k(t) - E_s(t) = 0$ достигается только при s = k.

Более детальный анализ показывает, что для точного приближения собственных состояний целевого гамильтониана образами собственных состояний основного гамильтониана необходимо еще усилить требование, а именно, надо потребовать, чтобы $max|\partial s/\partial t|/g^2$ было бы очень малой величиной.

Мы не будем доказывать адиабатическую теорему в этой сильной форме, а только покажем идею адиабатической теоремы, и перейдем к ее использованию в квантовых вычислениях.

Для удобства будем через $|n\rangle = |n(t)\rangle$ обозначать собственное состояние гамильтониана H(t) с номером n, а через E_n - соответствующее собственное значение энергии, и опускать явное упоминание о времени.

Пусть зафиксировано некоторое n_0 , так что $|\Psi(0)\rangle = |n_0(0)\rangle$.

Состояние системы $|\Psi\rangle$ в момент tподчиняется нестационарному уравнению Шредингера

$$i\hbar|\Psi\rangle = H(t)|\Psi\rangle$$
 (4.3)

и мы можем разложить его по собственным состояниям текущего гамильтониана: $|\Psi\rangle = \sum_{n} a_n |n\rangle$, где все состояния и коэффициенты будут зависеть от времени t.

Мы имеем:

$$a_n(0) = \delta_{n,n_0}.$$
 (4.4)

Подставляя это разложение в (4.3), мы получаем

$$\sum_{n} (\dot{a}_{n}|n\rangle + a_{n}|\dot{n}\rangle) = H \sum_{n} a_{n}|n\rangle = \sum_{n} E_{n}|n\rangle.$$
(4.5)

Теперь умножим слева это равенство на $\langle m |$ и воспользуемся ортонормированностью базисных векторов $|n\rangle$: $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$. Нам будет важно значение индекса суммирования, и мы разделим сумму на две части так:

$$i\hbar\dot{a}_m + i\hbar\sum_{n\neq m} a_n \langle m|\dot{n}\rangle + i\hbar a_m \langle m|\dot{m}\rangle = a_m E_m.$$
(4.6)

Теперь преобразуем равенство $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, продифференцировав его по времени t и умножив полученное равенство на $\langle m|$:

$$\dot{H}|n\rangle + H|\dot{n}\rangle = \dot{E}_n|n\rangle + E_n|\dot{n}\rangle, \langle m|\dot{H}|n\rangle + \langle m|H|\dot{n}\rangle = \dot{E}_n\delta_{nm} + E_n\langle m|\dot{n}\rangle.$$
(4.7)

Далее предполагаем, что $m \neq n$, и, учитывая, что $\langle m | H = E_m \langle m |$ получаем:

$$\langle m|\dot{n}\rangle = \frac{\langle m|\dot{H}|n\rangle}{E_n - E_m}.\tag{4.8}$$

С учетом (4.8) равенство (4.6) приобретает вид

$$i\hbar\dot{a}_m + i\hbar\sum_{n\neq m} a_n \frac{\langle m|H|n\rangle}{E_n - E_m} + i\hbar a_m \langle m|\dot{m}\rangle = a_m E_m.$$
(4.9)

Отсюда мы сразу получаем дифференциальное уравнение на a_m :

$$\dot{a}_m = -c_m \left(\frac{i}{\hbar} E_m + \langle m | \dot{m} \rangle\right) + \sum_{n \neq m} a_n \frac{\langle m | H | n \rangle}{E_m - E_n} \tag{4.10}$$

Мы видим, что если частное $\frac{\langle m|\dot{H}|n\rangle}{E_n-E_m}$ очень мало для любых $m\neq n$ по абсолютной величине, то есть интегралы

$$\Delta_{n,m} = \int_{0}^{T} a_n \frac{\langle m | \dot{H} | n \rangle}{E_n - E_m}$$
(4.11)

для $n \neq m$ очень малы, то последнее слагаемое в (4.10) можно отбросить. и мы получаем для коэффициента a_m задачу Коши:

$$\dot{a}_m = A(t)c_m, \ a_m(0) = 0$$

Учитывая начальное условие (4.4) и теорему единственности решения задачи Коши, мы получаем $a_m = 0$ для любого $m \neq n_0$.

Итак, если выполнено условие $\Delta_{n,m} = o(1)$, адиабатическое приближение работает хорошо.

Однако, для квантовых адиабатических вычислений нам понадобится более точная формулировка адиабатической теоремы, которую можно найти в книге [42]:

Адиабатическая теорема (уточненный вариант).

Eсли $|0(t)\rangle$ - основное а $|1(t)\rangle$ - возбужденное состояния гамильтониана H(t), такое что $g = \min_{0 \le t \le T, k=1,2,...,N-1} |E_k - E_0|$, где минимум достигается при k = 1,

то существует константа C, такая что для любого $\varepsilon > 0$ если для всех $t: 0 \le t \le T$ выполнены неравенства:

$$\left|\frac{\langle 1|\dot{H}|0\rangle}{g}\right| \le C\varepsilon, \quad \left|\frac{\langle 1|\dot{H}|0\rangle}{g^2}\right| \le C\varepsilon \tag{4.12}$$

 $u |\Psi\rangle$ - решение задачи Коши для уравнения Шредингера с гамильтонианом H, и начальным условием $|\Psi(0)\rangle = |0(0)\rangle$, то $|\langle 0(T)|\Psi(T)\rangle|^2 \leq 1 - \varepsilon^2$.

Таким образом, по сравнению с нашим предыдущим рассуждением, надо потребовать, чтобы скорость изменения гамильтониана была бы меньше квадрата минимальной щели между энергиями.

Мы не будем строго доказывать этот вариант адиабатической теоремы, отсылая слушателя к книге [42]; покажем лишь, почему надо требовать малости скорости изменения H большей, чем g^2 .

Итак, предположим, что выполнено соотношение $\Delta_{n,m} = o(1)$ и условие $\left|\frac{\langle 1|\dot{H}|0\rangle}{g^2}\right| = 0(1)$. Из вида интеграла (4.11) такого требования прямо не следует. Однако рассмотрим малый промежуток времени dt, на котором гамильтониан мало меняется, так что можно считать его константой. Тогда решение уравнения (4.1) запишется в виде разложения по собственным состояниям текущего гамильтониана $|\phi_i\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{i} e^{\frac{1}{\hbar}E_{i}dt} \lambda_{i} |\phi_{i}\rangle \tag{4.13}$$

Если взять основное состояние, можно считать, что $E_0 = 0$, сдвинув спектр на величину E_0 , и тогда мы увидим, что все возбужденные состояния будут иметь коэффициент в виде осциллирующего множителя $exp - \frac{i}{\hbar}(E_i - E_0)t$, так что в случае плавного изменения гамильтониана эти осцилляции дадут в итоге знакопеременный ряд Лейбница, в котором члены будут почти полностью сокращать друг друга, так что интеграл (4.11) сведется к интегралу по одному периоду такой осцилляции, который равен примерно O(1/g), и от него останется величина, по порядку равная $O(\langle 1|\dot{H}|0\rangle/g^2$, то есть пропорциональная скорости изменения самого гамильтониана H (см. рисунок 4.2).

Рассмотрим основной интеграл (4.11), и оценим его грубо. Пусть гамильтониан меняется медленно, так что на промежутке $[0, \Delta t]$ он мало меняется, но основные состояния меняют фазу существенно. Считаем, что $\hbar = 1$. Тогда состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ - основное и возбужденное, на этом промежутке - эволюционируют таким образом:

$$|0(dt)\rangle = e^{-iE_0t}|0(0)\rangle, \ |1(t)\rangle = e^{-iE_1dt}|1(0)\rangle, \tag{4.14}$$

Тогда числитель в выражении (4.11) примет вид

$$e^{i(E_1 - E_0)t} \langle 1(0) | H(t_{average}) | 0(0) \rangle$$
 (4.15)

и будет осциллировать с периодом порядка $O(1/(E_1 - E_0))$. Предположим, что гамильтониан меняется плавно, так что $\langle 1|\dot{H}|0\rangle$ имеет ограниченно число монотонных Рис. 4.2: Интерференция в отклонении основного состояния от результата плавно меняющейся унитарной эволюции.



участков. Оценим величину (4.11), учитывая сокращение в интерференции, порожденное осцилляциями комплексной экспоненты в (4.15) на участке монотонности числителя. Здесь у нас будет ряд Лейбница, сумма которого равна по порядку старшему члену ряда. Так что интеграл сведется к интегралу по участку длины $O(1/E_1 - E_0)$ от выражения $max(\dot{H})$, что и даст в итоге формулу (4.12). Графическая иллюстрация приведена на рисунке 4.2.

4.0.2 Адиабатическая форма алгоритма Гровера

Алгоритм Гровера, первоначально сформулированный в терминах квантовых операций (последовательности гейтов), может иметь и непрерывную форму.

Впервые такая форма вычислений была предложена в работе [57]. Она состоит в следующем. Пусть нам надо найти неизвестное базисное состояние $|m\rangle$, которое мы назовем целевым. Мы создадим начальное состояние $|s\rangle$ - произвольное начальное состояние, которое нам удобно построить. Возьмем гамильтониан $H = E|m\rangle\langle m| + E|s\rangle\langle s|$.

Тогда шредингеровская эволюция, индуцированная гамильтонианом H, приведет нас из начального состояния в целевое за время $\pi/(2E\langle m|s\rangle)$. Это утверждение можно доказать непосредственно, диагонализировав гамильтониан H, и найдя решение уравнения Шредингера в явном виде, считая $\hbar = 1$. Однако это утверждение не является тривиальным. Действительно, в канонической версии алгоритма Гровера применется преобразование поворота $U = I_0 I_m = e^{-i|m\rangle\langle m|} e^{-i|s\rangle\langle s|}$, что не сводится к применению эволюции, индуцированной гамильтонианом H, так как гамильтонианы $|m\rangle\langle m|$ и $|s\rangle\langle s|$ не коммутируют. Как видно, непрерывная версия алгоритма Гровера доставляет то же самое квнатовое ускорение решения переборной задачи, что и GSA.

Однако с адиабатической формой алгоритма Гровера все обстоит не так просто. Мы создадим начальное состояние $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{a=0}^{N-1} |a\rangle$, как в операционной форме GSA, и допустим, что мы можем создать эволюцию, индуцированную гамильтонианом $\tilde{H}(s) = (1-s)H_0 + sH_m$, где

$$H_0 = I - |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|, \ H_m = I - |m\rangle\langle m|$$

Адиабатический алгоритм состоит в применении к начальному состоянию $|\Psi_0\rangle$ переменного гамильтониана H(s), где функция s(t) такова, что s(0) = 0, s(T) = 1 для большого T. Искусство адиабатического вычисления состоит в выборе функции замедления s(t).

Заметим, что $|\Psi_0\rangle$ и $|m\rangle$ есть основные состояния гамильтонианов H_0 и H_m соотвественно, с нулевыми собственными значениями.

Будем через H(t) обозначать зависимость гамильтониана от реального времени t, для отличения от $\tilde{H}(s)$ - зависимость от абстрактного параметра s. Зависимость s от t означает замедление эволюции.

В условиях адиабатической теоремы для гамильтониана H(t) мы опять будем считать $|0\rangle$ - основным, а $|1\rangle$ - возбужденным состоянием, для которого реализуется щель энергии размера g. Тогда мы имеем:

$$\langle 1|\dot{H}|0\rangle = \frac{ds}{dt} \langle 1|\frac{d\tilde{H}}{ds}|0\rangle = \frac{1}{T} \langle 1\frac{\tilde{H}}{ds}|0\rangle.$$
(4.16)

Сначала мы попробуем пойти по простому пути, и выберем s(t) - линейной функцией: s = t/T для достаточно большого T; тогда гамильтониан будет меняться медленно. Решая задачу на собственные значения для гамильтониана H, мы можем найти и энергетическую щель. Результат вычислений таков:

$$g = \sqrt{1 - 4\frac{N-1}{N}s(1-s)},\tag{4.17}$$

при этом $|\langle 1|\frac{d\tilde{H}}{ds}|0
angle|\leq 1.$

Формула (4.17) графически проиллюстрирована на рисунке 4.3. Теперь мы найдем минимальную щель, которая равна $g_{min} = 1/\sqrt{N}$ (получается при s = 1/2). Тогда условие адиабатической теоремы дает нам неравенство $T \ge N/\varepsilon$. Мы, таким образом, получаем то же время вычисления $|m\rangle$, что и на классическом компьютере, и адиабатический алгоритм не дает квантового ускорения.

Для получения квантового ускорения мы зададим более сложное, нелинейное замедление времени s(t). Поскольку критическое значение щели g достигается не в любой момент, а только при s = 1/2, мы можем улучшить оценку общего времени работы алгоритма, подобрав нелинейное замедление. Для этого мы применим соотношение (4.12) локально, получив формулу

$$|\dot{s}| \le g^2(t)/|\langle 1|\frac{dH}{dt}|0\rangle|. \tag{4.18}$$

Рис. 4.3: Собственные значения гамильтониана \hat{H} при N = 64. Рисунок взят из статьи Roland, Cerf, Quantum Search by Local Adiabatic Evolution (arxive.org, quant-ph/0107015).



Используя соотношение (4.17) при условии $|\langle 1|\frac{d\tilde{H}}{ds}|0\rangle| \leq 1$, мы получаем уравнение на замедление времени вида:

$$\dot{s} = \varepsilon g^2(t) = \varepsilon (1 - 4(1 - 1/N)s(1 - s))$$
(4.19)

для малого ε . Интеграция (4.19) дает

$$t = \frac{N}{2\varepsilon\sqrt{N-1}}(\operatorname{arctg}((2s-1)\sqrt{N-1} + \operatorname{arctg}\sqrt{N-1})), \qquad (4.20)$$

инвертируя, мы находим окончательное выражение для замедления времени в виде графика, представленного на рисунке 4.4. Здесь видно, что наиболее быстро время течет в тех областях, где щель велика, и медленно - где щель мала.

Полное время работы алгоритма найдем, подставляя s = 1 в (4.19): $T = \pi \sqrt{N}/2\varepsilon$ - это именно то ускорение, которое дает стандартный алгоритм Гровера.

Теперь покажем, что найденное квантовое ускорение адиабатическим методом является оптимальным. Для этого рассмотрим два конкурирующих базисных состояния $|m\rangle$ и $|m'\rangle$, каждое из которых может быть целевым для алгоритма Гровера. Пусть $\psi_m\rangle$ и $|\phi_{m'}\rangle$ - состояния квантового компьютера при адиабатическом вычислении с некоторым замедлением времени s(t). Правильно работающий алгоритм должен их достоверно различать за время T, то есть должно выполняться неравенство

$$1 - |\langle \psi_m(T) | \psi_{m'}(T) \rangle|^2 \ge \varepsilon \tag{4.21}$$

Рис. 4.4: Оптимальное замедление времени для адиабатической версии GSA. Рисунок взят из статьи Roland, Cerf, Quantum Search by Local Adiabatic Evolution (arxive.org, quant-ph/0107015).



Во введенных нами обозначениях, мы разобъем гамильтониан на два слагаемых: $\tilde{H}(s) = \tilde{H}_1(s) + \tilde{H}_{2m}(s)$, где

$$\tilde{H}_1(s) = I - (1-s)|\psi_0\rangle\langle\psi_0|, \ \tilde{H}_{2m}(s) = -s|m\rangle\langle m|$$

Для зависимости от времени t мы, как и прежде, используем обозначение H без тильд. Тогда $|\psi_m\rangle$ и $|\psi_{m'}\rangle$ будут решениями уравнений

$$i|\dot{\psi}_m\rangle = (H_1 + H_{2m})|\psi\rangle, \ i|\dot{\psi}_{m'}\rangle = (H_1 + H_{2m'})|\psi\rangle$$

с общим начальным условием $|\psi_m(0)\rangle = |\psi_{m'}(0)\rangle = |\psi_0\rangle$.

Мы имеем:

$$\frac{d}{dt}(1 - |\langle \psi_{m} | \psi_{m'} \rangle|^{2}) =
2Im(\langle \psi_{m} | H_{2m} - H_{2m'} | \psi_{m'} \rangle \langle \psi_{m'} | \psi_{m} \rangle)
\leq 2|\langle \psi_{m} | H_{2m} - H_{2m'} | \psi_{m'} \rangle| |\langle \psi_{m'} | \psi_{m} \rangle|
\leq 2(|\langle \psi_{m} | H_{2m} | \psi_{m'} \rangle| + |\langle \psi_{m} | H_{2m'} | \psi_{m'} \rangle|).$$
(4.22)

Теперь возьмем сумму по m, m' и получим:

$$\frac{d}{dt} \sum_{m,m'} (1 - |\langle \psi_m | \psi_{m'} \rangle|^2) \le 4 \sum_{m,m'} |\langle \psi_m | H_{2m} | \psi_{m'} \rangle|
\le 4 \sum_{m,m'} ||H_{2m} | \psi_m \rangle || |||psi_{m'} \rangle || \le 4N \sum_m ||H_{2m} | \psi_m \rangle ||.$$
(4.23)

В последнем переходе использовалось неравенство Коши - Буняковского - Шварца.

Заметим также, что для нормированного состояния $|\psi\rangle$ из $\sum_{m} ||H_{2m}|\psi\rangle||^2 = s^2$ следует $\sum_{m} ||H_{2m}|\psi\rangle|| \le \sqrt{N}s$ (неравенство между нормами в пространствах l_2 и l_1).

В результате мы имеем:

$$\frac{d}{dt} \sum_{m,m'} (1 - |\langle \psi_m | \psi_{m'} \rangle|^2) \le 4N\sqrt{Ns}.$$
(4.24)

Интегрируя это неравенство, мы имеем:

$$\sum_{m,m'} (1 - |\langle \psi_m | \psi_{m'} \rangle|^2) \le 2N\sqrt{N} \int_0^T s(t) dt$$

и, учитывая (4.21), находим

$$T \geq \varepsilon (N-1)/(4\sqrt{N})$$

что и доказывает, что правильно работающий адиабатический алгоритм для задачи перебора не может работать быстрее корня из классического времени.

У адиабатической теоремы есть множество форм, и оценок погрешностей. Самая простая принадлежит Ландау и Зенеру; она справедлива только для двух-уровневой системы, то есть для одного кубита. Она имеет вид

$$err = O(e^{-C\Delta^2 t_f})$$

где t_f - полное время процесса.

4.0.3 Построение гамильтонианов для адиабатических вычислений

Для реализации адиабатическсого метода необходимо практически построить гамильтонианы с нужным свойством: для начального H_0 его основное состояние должно быть достаточно простым, а для целевого H_1 основное состояние должно давать решение искомой задачи.

Как правило, основное состояние начального гамильтониана выбирается, как и в операторной версии алгоритма Гровера, в виде $|\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle$. Такой гамильтониан, с таким основным состоянием, имеет вид

$$H_I = \sum_{i=1}^m \frac{1 - \sigma_i^x}{2}.$$

Действительно, при m = 1 это проверяется непосредственно, а для больших m гамильтониан распадается на сумму слагаемых - операторов, для каждого из которых собственными состояниями будут состояния, имеющие в обозначениях из линейной



Рис. 4.5: Поведение 4 собственных значений для алгоритма 2-bit Disagree. Рисунок взят из статьи Adiabatic quantum computation and quantum annealing (Catherine McGeoch).

алгебры вида $(...a, a...)^*$, где выделены позиции в векторе - столбце - базисного состояния, соответствущие значениям 0 и 1 фиксированного кубита, а многоточие обозначает произвольные состояния. Но это и означает, что сумма таких операторов имеет собственное состояние $|\tilde{0}\rangle$.

Теперь мы займемся целевым гамильтонианом H_1 . Рассмотрим сначала простой пример. У нас есть два кубита и задача в том, чтобы определить, равны ли их значения. Для такой задачи поиска совпадений основное состояние целевого гамильтониана будет

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle.$$

а целевой гамильтониан будет иметь вид

$$H_1 = \frac{1}{2}(I + \sigma_1^z \sigma_2^z).$$

Это - так называемый 2-bit Disagree алгоритм. На рисунке 4.5 изображено поведение его спектра в зависимости от режима s(t). Склеивание двух собственных значений в конце процесса не является фатальным, так как нам все равно, какое из основных состояний будет выдано при измерении конечного состояния.

Рассмотрим немного более сложную задачу - точного покрытия. Это задача определения истинности конъюнкции $\&_c C_c$ где каждый сомножитель C_c имеет вид $x_1^c, x_2^c, x_3^c, x_3^c, x_1^c = x_i$ или $x_j^c = x_i$ или $x_j^c = x_i$ и C_c истинно тогда и только тогда, когда из x_1^c, x_2^c, x_3^c ровно один член истинен.

Мы для каждого с введем функцию покрытия

$$f_c = (1 - x_1^c - x_2^c - x_3^c)^2$$

и положим $f(\bar{x}) = \sum_{c} f_{c}(\bar{x})$. Теперь мы имеем

$$f(\bar{x}) = -2m - \sum_{i} (B_i x_i + B_i x_i x_i) + \sum_{i < j} C_{ij} x_i x_j = -2m + \sum_{i < j} C_{ij} (1 - s_i)(1 - s_j)$$

где $x_i = (1 - s_i)/2$ - формула для перехода между булевскими переменными $x_i = 0, 1$ и спиновыми переменными $s_i = \pm 1$.

Целевой гамильтониан для этой задачи имеет вид

$$H_1 = \sum_{i < j} C_{ij} (1 - \sigma_i^z) (1 - \sigma_j^z)$$

Теперь рассмотрим общий вид *SAT* - проблемы - выполнимости формулы логики выказываний. Достаточно считать, что эта формула задана в конъюнктивной нормальной форме, более того, что каждый конъюнктивный член имеет вид f_c , только теперь истинность определяется по правилам логики высказываний.

В этом случае определение элементарной функции f_c будет иметь вид

$$f_c(s_1, s_2, s_3) = (5 - s_1 - s_2 - s_3 + s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_1 s_3 + 3s_1 s_2 s_3)/8$$

Модель Изинга. Функция энергии для базисного состояния *n* спинов, соединенных попарно, имеет вид

$$H(\bar{s}) = \sum_{i} h_i s_i + \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j.$$

Проблема нахождения \bar{s} , минимизирующей данную функцию NP-полна если спины соединены в виде трехмерной структуры (Истрал). Fu и Anderson показали, что она NP- полна даже для 2D соединений при условии присутствия ненулевых h_i . Задача нахождения минимума функции $H(\bar{s})$ эквивалентна нахождению основного состояния гамильтониана

$$H = \sum_{i} h_i \sigma_i^z + \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$$

Для решения этой задачи можно применить метод квантового отжига.

Он состоит в следующем. У нас есть целевой гамильтониан H_{tar} , основное состояние которого нам надо найти. Мы выбираем возмущающий гамильтониан H_d и расписание G(t), выражающее интенсивность возмущения. Это расписание устроено так: $G(0) \gg 1$, $G(t) \to 0$ $(t \to \infty)$. Текущий гамильтониан выбирается в виде

$$H(t) = H_{tar} + G(t)H_d.$$

Иллюстрация квантового отжига приведена на рисунке 4.6



Figure 3.2: The objective function and neighborhood rule define a solution landscape. A heuristic search algorithm steps from node to neighbor node looking for an optimal solution while avoiding getting stuck in local minima.

Рис. 4.6: Схематическое изображение квантового отжига. Рисунок взят из статьи Adiabatic quanatum computation and quantum annealing (Catherine McGeoch).

Глава 5

Квантовое дальнодействие

В этой главе мы изучим удивительное явление: квантовую нелокальность. Мгновенное действие на расстоянии прямо противоречит теории относительности, постулирующе, что никакое материальное тело не может двигаться со скоростью, превосходящей скорость света, примерно 300000 километров в секунду. Причем если тело обладает ненулевой массой, то его скорость не может даже достигнуть световой, поэтому со скоростью света могут перемещаться только кванты самого света - фотоны. Из этого, в частности, следует, что никакой сигнал, передаваемый с помощью материальных носителей, не может перемещаться быстрее света; в этом суть локальность нашего мира.

Если под информацией мы будем понимать последовательность бинарных знаков, придуманную неким субъектом Алисой, то можно придать этому постулату иную, информационную форму: никакая информация, созданная одним субъектом - Алисой, не может передаваться другому субъекту - Бобу быстрее света.

Такое определение информации не является строгим математическим определением, так как оно обращается к понятиям "создание" и "субъект", которые еще более туманны. Можно дать точное определение взаимной информации между двумя частями *A* и *B* единой системы кубитов, находящейся в смешанном состоянии с матрицей плотности *ρ*:

$$I(A:B) = N(tr_A(\rho)) + N(tr_B(\rho)) - N(\rho),$$
(5.1)

где $N(\rho)$ - квантовая энтропия, определенная нами в 2.3.3. Такое определение позволяет отличить смешанное состояние $\frac{1}{2}(|00\rangle\langle00| + |11\rangle\langle11|$ от чистого ЭПР состояния $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$. Действительно, убедитесь сами, что взаимная информация кубитов в смеси равна 1, в то время как взаимная информация кубитов, связанных в ЭПР пару, равна 2.

Однако такое определение взаимной информации - статичное. Оно ничего не говорит нам о процедуре ее передачи от одного кубита к другому. Ключевой вопрос: с какой скоростью эта информация передается от *A* к *B*, остается неясным.

Найденное нами количественное различие между классической корреляцией в смеси и квантовой коррелицией в чистом состоянии еще не означает качественного различия этих двух типов корреляции. Между тем, это различие - именно качественное. Но для установления этого факта не достаточно иметь только лишь точное определение информации. Дело в том, что определение (5.1) предполагает равенство статусов носителей информации - субъектов A и B. Но возможна такая ситуация, когда есть нечто, а-приори связывающее эти носители.

Например, если Алиса измеряет свой кубит, который с кубитом Боба образует ЭПР- пару, и получает значение $|0\rangle$, то Боб, даже ничего не предпринимая, также получает значение $|0\rangle$ своего кубита, хотя никакой физический носитель он от Алисы не получил. Обоих участников информационного обмена может разделять много километров, но эта корреляция будет иметь место. Пока в этом факте нет ничего удивительного, он имеет место и в случае смеси. Но ести в смеси все уже заранее известно, включая результаты измерений, то в случае ЭПР пары а-приори, до измерения, ничего не известно! Смесь означает, что у Алисы и Боба есть либо состояние $|00\rangle$, либо состояние $|11\rangle$, так что если это состояние им кто-то выдал, то этот "кто-то", уже знает точно до всяких измерений, их исходы.

В случае ЭПР пары все гораздо сложнее. Даже если кто-то выдал такую пару кубитов Алисе и Бобу, никто не знает результата измерения до тех пор, пока оно физически не произошло. Это наводит уже на мысль о мгновенном действии на расстоянии, что и побудило Эйнштейна к критике квантовой механики. Пока что мы не можем точно сказать, что мгновенное действие имеет место, наши рассуждения до этого места были туманными. А теперь мы опишем эксперимент, который способен точно зафиксировать факт мгновенного действия на расстоянии.

Трактовка этого эксперимента непроста. Все выглядит так, что нечто (не информация), действительно передается от Алисы к Бобу мгновенно. Как будто есть некий административный канал, недоступный нам, но имеющийся у Природы, так то наши приборы "узнают" о событии, происшедшем за много километров практически мгновенно, но не в состоянии передать нам свое "знание" явно. Мы можем только зафиксировать факт такого "узнавания", но - увы - не можем использовать этот канал для мгновенной передачи задуманной нами информации.

Если Алиса захотела бы передать Бобу некое значение кубита, скажем, 0, все, что она смогла бы сделать - это измерить свой кубит в ЭПР паре. Но тогда 0 получится только с вероятностью 1/2, так что Боб не сможет понять, что хотела ему передать Алиса. Буква теории относительности - не нарушается! Но мгновенное действие на расстоянии существует.

Разберем схему эксперимента, доказывающего наличие квантового мгновенного действия на расстоянии. Он был предложен Дж.Беллом в начале 60-х годов ([58],[59]); сами же эксперименты были проведены впервые в 1980-х годах А.Аспеком и А.Цайлингером ([55], [56], а также ссылки в работах [60] и [61]). В этих экспериментах запутанность проявляется не на ангстремных расстояниях, как в молекуле водорода, а на расстояниях в несколько сотен километров.

В эксперименте получаются 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. При этом $|0\rangle$ означает вертикальную поляризацию фотона, а $|1\rangle$ -горизонтальную. 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 (поляризации фотона), и у Боба - тоже две возможности. А именно, Алиса может выбрать наблюдаемую (собственные вектора эрмитова оператора, см. Главу 1) 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). Итак, каждый участник эксперимента выбирает наблюдаемую 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

$$E = Xa + Xb + Ya - Yb, (5.2)$$

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

$$M(\xi) \le 1/2,\tag{5.3}$$

которое называется неравенством Белла.

А теперь подсчитаем $M(\xi)$ для выписанных нами наблюдаемых с помощью квантово - механического правила $\langle A \rangle_{\Psi} = tr(\rho_{\Psi}A)$ определения среднего значения (собственных чисел) эрмитова оператора A в состоянии Ψ^1 . Несложный расчет² покажет, что $M(\xi) = \frac{1}{4}2\sqrt{2}$ (множитель 1/4 везде возникает из-за равновероятности выбора

¹Оно вытекает из определенния 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.

²Надо рассмотреть все случаи ориентации детекторов, и для каждого составить редуцированную матрицу плотности нашего состояния, а затем применить правило полной вероятности.

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, bиспользовалось 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 эксперимента³.

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 задачи 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 $P : S \longrightarrow [0,1]$, 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.

³То обстоятельство, что мы не знаем структуры Ω , не играет никакой роли. Мы все равно должны рассматривать этот объект явно, если говорим о вероятностях.

Случайной величиной называется любая функция вида

$$\xi: \ \Omega \longrightarrow R$$

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

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 определеными 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 (5.3), 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 (5.2) 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 половинке 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 половинке элементарного исхода, подчиняется релятивизму, то должно выполняться неравенство

$$\Delta t + \delta t \ge d/c,\tag{5.4}$$

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 (5.4) говорит о том, что $\tilde{\omega}$ не может быть скрытым параметром ни одного из фотонов.⁴ 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.⁵

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

⁴В реальных экспериментах, как правило, проверяют не нарушение (5.4), а непосредственно предотвращают обратное перенесение информации самими фотонами, выставляя заглушки после их прохождения.

⁵Познакомиться с различными точками зрения на квантовую нелокальность можно, например, по статьям из [62].

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 постквантовый 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 дальнодействие позволяет создавать удивительные протоколы информационного обмена, один из которых мы рассмотрим ниже.

5.1 Квантовая телепортация

Квантовое состояние обладает удивительным свойством строгого сохранения своей индивидуальности. На первый взгляд, это противоречит статистической интерпретации вектора состояния, однако такая инивидуальность подтверждается следующей теоремой о запрете клонирования произвольного квантового состояния.

Теорема о запрете клонирования квантовых состояний

Не существует унитарного оператора U, такого что для любого квантового состояния $|\Psi\rangle$ имеет место равенство

$$U|\Psi\rangle|\bar{0}\rangle = |\Psi\rangle|\Psi\rangle. \tag{5.5}$$

Здесь $|\bar{0}\rangle$ - анцилловые кубиты в том же числе, что и носитель вектора $|\Psi\rangle$. Доказательство этой теоремы просто. Надо последовательно взять в качестве состояния $|\Psi\rangle$ состояния $|0\rangle$, $|1\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, применить определение тензорного произведения операторов и линейность U и получить противоречие. Детали предоставляются читателю. Заметим, что результат применения подобного оператора U, если бы он существовал, клонировал бы любое состояние $|\Psi\rangle$ в том смысле, что две копии этого состояния можно было бы использовать в разных независимых преобразованиях совершенно не зависимо друг от друга.

Если бы, например, взяли в качестве U оператор CNOT, то попытка клонировать состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ привела бы к результату $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$, что совершенно не соответствует понятию "клонирование", предполагающему создание независимых копий данного состояния.

Запрет на клонирование квантовых состояний означает неделимость индивидуальности квантовых состояний. История одного состояния не может разветвиться по его физическому носителю. Это удивительным образом напоминает поведение живого существа, каждое из которых, даже самое малое, обладает именно таким свойством неделимости.

Однако мы можем переместить квантовое состояние на другой физический носитель, причем сделать это с помощью одной универсальной схемы, в которой мы будем передавать только классическую информацию.

Квантовая телепортация - перемещение на расстояние неизвестного квантового состояния, причем при этом реально передается только классическая информация. Этот протокол был опубликован в работе [30]. Пусть у Алисы с Бобом есть ЭПР - связь: у каждого кубит, причем эта пара кубитов находится в состоянии $|EPR\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle)$. 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 иноформации 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.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle)(|\lambda|0_C\rangle + \mu|1_C\rangle) = \\
\frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda|000\rangle + \lambda|110\rangle + \mu|001\rangle + \mu|111\rangle) \rightarrow_{CNOT} \\
\frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda|000\rangle + \lambda|110\rangle + \mu|101\rangle + \mu|011\rangle) \rightarrow_{H_C} \\
\frac{1}{2}(\lambda|00\rangle(|0\rangle + |1\rangle) + \lambda(|11\rangle(|0\rangle + |1\rangle) \\
+ \mu|10\rangle(|0\rangle - |1\rangle) + \mu|01\rangle(|0\rangle - |1\rangle)) = \\
\frac{1}{2}(\lambda|000\rangle + \lambda|001\rangle + \lambda|110\rangle + \lambda|111\rangle + \\
\mu|100\rangle - \mu|101\rangle + \mu|010\rangle - \mu|011\rangle).$$
(5.6)

Пусть Алиса получила результат A = C = 0. Тогда из результата преобразований (5.6) 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



локальные процессоры

Рис. 5.1: Схема одностороннего управления

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 - это следует из теоремы о запрете клонирования квантовых состояний.

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

5.2 Распределенные квантовые вычисления

Построение квантового компьютера - сложный и многосторонний процесс, и важную роль в нем играют ограниченные модели квантовых вычислений, например, квантовые ветвящиеся программы ([63]) или программы моделирования биохимии ([64].) 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. [65]), 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.

5.2.1 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 центральный 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 5.1. 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 сингалы 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 переферийными 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 огранизации 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.

5.2.2 Квантовые бифотонные сигналы

В рассматриваемой ситуации использование CPU бифотонов (запутанных состояний фотонов) дает преимущество по сравнению с чисто классическим CPU. Для то-



Рис. 5.2: Распределенный синтез цепочек

го, чтобы продемонстрировать это, мы рассмотрим следующую абстрактную задачу. Предположим, что требуется синтезировать две полимерные молекулы, химическая структура которых имеет вид $C_1 = (c_1^1, c_2^1, ..., c_M^1), C_2 = (c_1^2, c_2^2, ..., c_M^2)$, так что они состоят из моноблоков двух типов: *a* и *b*: $c_i^j \in \{a, b\}$ (см. рисунок 5.2).

Качество такой взаимной сборки двух полимеров проверяется наложением готовых 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 5.3.

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 $s_i^{1,2} \in \{+, -\}$.

Из наших правил (см. рисунок 5.3) следует, что склейка соответствует парам наложенных моноблоков вида: aa + +(--), ab + +(--), bb + +(--), ba + -(-+),тогда как пары иного вида: aa + -(-+), ab + -(-+), bb + -(-+), ba + +(--) 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 несклееных пар наложенных моноблоков была бы минимальной, или, иначе говоря, чтобы число склеек было максимальным.

Подобная задача может возникнуть при моделировании синтеза гена и антигена 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 CPU 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

$$E(a_1b_2 + b_1b_2 + a_1a_2 - b_1a_2) \le 2.$$
(5.7)

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.



Рис. 5.3: 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.

Работающий на принципах классической физики центральный процессор может, таким образом, управлять сборкой только выбирая знак сдвига + или – в обеих точках сборки. СРU 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 некритично (есть склейка), и Cr = -1в противном случае. Нас интересует результирующее число некритических 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

$$E(Cr) = \frac{1}{4}(a_1b_2 + b_1b_2 + a_1a_2 - b_1a_2), \qquad (5.8)$$

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 (5.8) среднее число критических наложений удовлетворяет неравенству

$$E(NonCr) \le \frac{1}{2}(1+\frac{2}{4}) = \frac{3}{4} = 0.75$$

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 (5.7) 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 $a_1b_2 + b_1b'_2 + a'_1a_2 - b'_1a'_2$ вместо левой части неравенства (5.7), что сделает 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:

$$a_{1} = \sigma_{x}, \qquad b_{1} = \sigma_{z}, a_{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{x} - \sigma_{z}), \quad b_{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{x} + \sigma_{z})$$
(5.9)

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 (5.8) для среднего значения индекса критичности.

Теперь имеем: $E = E(a_1b_2+b_1b_2+a_1a_2-b_1a_2) = E(a_1b_2)+E(b_1b_2)+E(a_1a_2)-E(b_1a_2)$. Используя определение наблюдаемых (5.9) и применяя правило вычисления средних $\langle A \rangle_{\psi} = tr(A\rho_{\psi})$ для всех наблюдаемых A, взятых из (5.9), мы найдем $E = 2\sqrt{2}$ и для среднего значения числа некритических наложений (склеек) мы получим значение $E(NonCr) = \frac{1}{2}(1 + \frac{2\sqrt{2}}{4}) \approx 0.85$. Итак, использование EPR пар фотонов в управлении сборкой дает существенный выигрыш в качестве - немного более 1.138 для такой формулировки задачи.

Глава 6

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 ([50], [51]). И это - действительно так, но лишь для "простых" процессов, описание которых не требует привлечение 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 ([21]) - 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 ([9]). 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 компьютинга. 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, [52]) невозможно, так как это противоречит существованию быстрых квантовых алгоритмов (см., например, [13]). Результат работы такого алгоритма принципиально невозможно предсказать быстрее, чем он возникнет в реальности; именно это обстоятельсто 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 кончного 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 [3].

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 роем виртуальных частиц, который подчиняется уравнениям Гамильтона-Якоби с квантовым псевдопотенциалом Бома ([53]). 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 рой 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 микропричинность 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. [54]). 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, [55], [56]).

6.1 Дискретность амплитуд

Длительная история экспериментов по квантовому компьютингу 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 [66].

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, невоспроизводимыми, 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 [3]. Неясным остается только то, какой объект перемещается по этим "всевозможным траекториям"? Из матричной формулировки квантовой динамики следует, что этот объект - порция амплитуды обязан разделяться 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 попарно, 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 ([40], см. Приложение). Однозначность траектории порции амплитуды, определяемая для произвольной матрицы эволюции, отличается от детерминизма Бома ([53]): 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 некой "оркестрованности", связывая процедуру измерения с актом самосознания ([67]), 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 Qядра 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 ([21]).

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 аммпитуды 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.

6.2 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, $j \in \{0, 1, ..., N - 1\}$. Определим $\{\psi\} = \sum_{i=0}^{N-1} \{\langle i | \psi \rangle\}.$

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 переходом 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 связные 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 $|n\rangle_{ph}|m_1, m_2, ..., m_k\rangle_{at}$, где n- число фотонов в полости, $m_j \in \{0, 1\}$ - состояние атома j, основное и возбужденное. Пусть g_j , j = 1, 2, ..., k - энергии 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:

$$H_{TC}^{RWA} = \hbar\omega(a^+a + \sum_{j=1}^k \sigma_j^+ \sigma_j) + a^+\bar{\sigma} + a\bar{\sigma}^+, \quad \bar{\sigma} = \sum_{j=1}^k g_j\sigma_j, \quad (6.1)$$

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 $\eta \sum_i |j\rangle = \sum_i \eta |j\rangle$.

Обозначим через G_H подгруппу S_n , состоящую из всех перестановок кубитов τ , таких что $[H, \tau] = 0$. Пусть $A \subseteq \{0, 1, ..., 2^n - 1\}$ - 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 Hподпространству, 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 $|n\rangle_{ph}(a|10\rangle_{at} + b|01\rangle_{at} + c|00\rangle_{at} + d|11\rangle_{at})$, при ненулевых значениях амплитуд a, b, c, d будут не связными.

Предложение.

 $E_{CAU} |\Psi\rangle = \sum_{j} \lambda_{j} |j\rangle$ - связное относительно H, то любые два столбца матрицы H с номерами j_{1} , j_{2} , такими что $\lambda_{j_{1}}$ и $\lambda_{j_{2}}$ 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 Hсвязности, существует $\tau \in G_H$, такое что $j_2 = \tau(j_1)$. Столбцы с номерами j_1 , j_2 состоят из амплитуд состоянй $H|j_1\rangle$ 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.

6.3 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

$$|\Psi\rangle = \sum_{j} \lambda_{j} |j\rangle.$$
(6.2)

Мы введем важное понятие кванта амплитуды как простую формализацию превращения малой порции амплитуды между различными базисными состояниями при умножении вектора состояния на матрицу А. 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

$$\kappa = (\varepsilon, id, |b_{in}\rangle, |b_{fin}\rangle, t_{in}, t_{fin}), \tag{6.3}$$

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:

$$t_{in}(\kappa) = t_{in}, \ t_{fin}(\kappa) = t_{fin}, \ s_{in}(\kappa) = b_{in}, \ s_{fin}(\kappa) = b_{fin}.$$

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 "→" 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

$$|\theta_{in}\rangle = \sum_{j} \lambda_j |j\rangle, \ |\theta_{fin}\rangle = \sum_{i} \mu_i |i\rangle,$$
(6.4)

по естественному правилу: для любых базисных состояний $|j\rangle, |i\rangle$ должны выполняться равенства

$$\lambda_j = \langle j | \theta_{in} \rangle = \varepsilon \sum_{\kappa \in \theta: \ s_{in}(\kappa) = j} t_{in}(\kappa), \quad \mu_i = \langle i | \theta_{fin} \rangle = \tilde{\varepsilon} \sum_{\kappa \in \theta: \ s_{fin}(\kappa) = i} t_{fin}(\kappa), \quad (6.5)$$

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 (6.5).

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 амплитуд $\theta(\varepsilon)$ называется согласованным с оператором A и состоянием $|\Psi\rangle$ если для некоторых скалярных функций $c(\varepsilon)$

$$\theta_{in}(\varepsilon) \to |\Psi\rangle, \ c(\varepsilon)\theta_{fin}(\varepsilon) \to A|\Psi\rangle \ (\varepsilon \to 0).$$
 (6.6)

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 для состояний 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 квадратная матрица. Для всякого равновесного относительно A состояния $|\Psi\rangle$ существует параметрическое квантование амплитуд $\theta(\varepsilon)$, согласованное с оператором A.

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

$$\lambda_j = \langle j | \Psi \rangle \approx sign_{re}(\underbrace{\varepsilon + \varepsilon + \ldots + \varepsilon}_{M_j}) + sign_{im}i(\underbrace{\varepsilon + \varepsilon + \ldots + \varepsilon}_{N_j}), \tag{6.7}$$

где $sign_{re} \varepsilon M_j + sign_{im} i \varepsilon N_j \approx \lambda_j$ есть наилучшее приближение амплитуды λ_j с точностью ε ; M_j , N_j - натуральные числа, $sign_{re\ (im)} = \pm 1$. Таким образом, первое соотношение стремления из (6.6) будет выполнено, и надо обеспечить выполнение второго соотношения при согласованности параметрического квантования с гамильтонианом.

Приблизим каждый элемент матрицы *А* так же, как мы приблизили амплитуды исходного состояния:

$$\langle i|A|j \rangle \approx \pm (\underbrace{\varepsilon + \varepsilon + \dots + \varepsilon}_{R_{i,j}}) \pm i(\underbrace{\varepsilon + \varepsilon + \dots + \varepsilon}_{I_{i,j}}),$$
(6.8)

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 (6.7) на всевозможные выражения (6.8):

$$\lambda_j \langle i|A|j \rangle \approx (sign_{re} M_j \varepsilon + i \ sign_{im} N_j \varepsilon) (\pm R_{i,j} \varepsilon \pm i \ I_{i,j} \varepsilon).$$
(6.9)

Раскроем в правой части выражения (6.9) скобки, но не будем производить сокращений. Каждое вхождение выражения ε^2 в амплитуды результирующего состояния после раскрытия скобок в правой части (6.9) будет получаться умножением определенного вхождения ε в правую часть (6.7) на определенное вхождение ε в правую часть (6.8). Проблема заключается в том, что одно и то же вхождение ε в (6.7) соответствует не одному, а нескольким вхождениям ε^2 в результат, и потому мы не можем сопоставить кванты амплитуды непосредственно вхождениям ε в (6.7).

Скольким вхождениям ε^2 в амплитуды состояния $A|\Psi\rangle$ из результата раскрытия скобок в (6.9) 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 (6.8); это число ν имеет порядок $1/\varepsilon$ при $\varepsilon \to 0$.

Обозначим через $Z_{i,j}$ множество вхождений буквы ε в правую часть выражения (6.8), 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 (6.7) вместо каждого вхождения ε его формальное разложение вида $\varepsilon = \epsilon + \epsilon + \epsilon + \epsilon$, получив разложение амплитуд исходного состояния на числа меньшего размера:

$$\lambda_{j} = \langle j | \Psi \rangle \approx sign_{re}(\underbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu} + \underbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu} + \underbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{M_{j}} + \underbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{M_{j}} + \underbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{M_{j}} + \underbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}_{N_{j}} + \underbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}_{N_{j}}$$

Пусть $W_1^j, W_2^j, ..., W_{M_j+N_j}^j$ - множества вхождений буквы ϵ в правую часть выражения (6.10), 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 ξ : $W_s^j \to Z_j$. Для каждого вхождения ε в (6.7) естественно определяются его потомки - вхождения ϵ в (6.10); 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 (6.10) для всех *j*. Определим, как требуется в (6.3), 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 $j \to i$ для такого i, что $\xi(w_s^j) \in Z_{i,j}$; переход же типов $t_{in} \to t_{fin}$ определяется так, что t_{in} есть тип вхождения² 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 (6.10) (см. Рис. 6.1).

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 (6.8) нет сокращающихся членов. Поэтому мы определили квантование амплитуды.

²Тип вхождения определяется естественным путем после раскрытия скобок, например, для вхождения ... $-i\epsilon$... типом будет -i.

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 (6.9) 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 (6.9) соответствующим этим переходам, если $j = s_{in}$, $i = s_{fin}$, и это вхождение получается умножением вхождения ε типа t_{in} в первый сомножитель правой части (6.9) 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^2 (см. Рис. 6.2).

Итак, вхождения ε^2 в (6.9) находятся во взаимно-однозначном соответствии с вхождениями ϵ в (6.10) и мы получаем $c(\varepsilon) = \varepsilon \nu$.

Заметим, что если A = 0, мы можем взять $c(\varepsilon) = 0$ и любое квантование амплитуды будет подходить.

Теорема доказана.

Заметим, что если отказаться от условия \mathbf{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 $\varepsilon - \varepsilon$; 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 потомкаим 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, [34]) состояния, возникающие в результате реализации гейтов, являются связными, так что интерференция в ходе таких квантовых вычислений также обладает отмеченным выше свойством.

6.4 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.



Рис. 6.1: 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 .

Пусть вычисление начинается с состояния $WH|ar{0}
angle$ и имеет вид

$$G^{\tau}, \quad G = -WH \cdot I_{\bar{0}} \cdot WH \cdot I_{x_{tar}}. \tag{6.11}$$

Рассмотрим вспомогательный оператор $D_0 = -WH \cdot WH$, равный, очевидно, тождественному с обратным знаком. Этот оператор получается из записи G (6.11) 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 (6.11), 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 $c(\varepsilon)$ ((см. 6.3).

Вычисление по GSA можно, таким образом, представить в виде операций над квантами амплитуды. При этом условие **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 $|x_{tar}\rangle$.

6.5 Константа масштабируемости и ее нахождение

В представлении амплитуд в классическом вычислении они всегда квантуются, то есть имеют вид:

$$\lambda_j = (k_j + il_j)\epsilon, \tag{6.12}$$

где ϵ - малая ненулевая величина - квант амплитуды, а k_j , l_j - натуральные числа. Такое представление ампитуд 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 (6.12), помимо их простоты, имеет и другое обоснование - возможность введения микропричинности, что было показано в параграфе 6.3.

Итак, при нашем компьютерном подходе, мы должны считать, что существуют только состояния вида

$$|\Psi\rangle = \sum_{j\in J} \lambda_j |j\rangle, \tag{6.13}$$

где амплитуды имеют вид (6.12). Так что суммирование в (6.13) распространяется на не более чем $1/\epsilon^2$ слагаемых из множества $J = \{0, 1, ..., N-1\}, N = 2^n$.

Вся точность предсказаний квантовой теории связана с компьютерными вычислениями, в которых участвуют только числа вида (6.12) 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 алоритмической 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,



Рис. 6.2: Детерминизм траекторий при умножении вектора состояния $|\Psi\rangle$ на матрицу *А*. Каждый квант ампитуды переходит в определенный квант амплитуды результирующего состояния, ветвлений нет.

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 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 подвергать 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 очень велика.

6.5.1 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

$$|\Psi\rangle|\bar{0}\rangle_{meas} \to \sum_{j\in J} \lambda_j|j\rangle \sum_{i_j\in I_j} \mu_{i_j}|i_j\rangle_{meas}.$$
(6.14)

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 (6.14) 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.

6.5.2 Понятие о Главном Компьютере

Формализм квантовой теории не может точно копировать реальность, во-первых, потому что квановое состояние - понятие статистическое, и во-вторых, потому что существует квантовая нелокальность. Необходимо понятие о классическом устройстве, которое моделирует реальность, то есть представляет ее в форме, доступной человеку. Это устройство мы назовем Главным Компьютером (ГК).

ГК не может иметь слишом большую память, включающую в себя всю материю, участвующую в рассматриваемой нами области. Память ГК должна использоваться максимально эффективно. Например, если речь идет о наборе статистики, ГК обязан запоминать только общее число исходов при применении формулы $p_j \approx M_j/M$ для расчета вероятности исхода $|j\rangle$ но не хранить в памяти все исходы.

Какой размер памяти должен иметь ГК для расчета вероятностей p_j , ели у нас имеется M экземпляров какой-то системы, приготовленных в состоянии $|\Psi\rangle$? Для хранения чисел M_j надо иметь память порядка log(M) - это длина записи чисел $M_j \leq M$.

6.6 Соотношение неопределенностей "сложность - точность" для квантовых состояний

Любое квантовое состояние $|\Psi\rangle$ не является состоянием всего лишь одной системы кубитов. Квантовое состояние есть характеристика огромного числа одинаково приготовленных систем. Состояние $|\Psi\rangle$ фактически является атрибутом некого абстрактного аппарата, который готовит ансамбли именно в этом состоянии. Например, говорить о состоянии $|1s\rangle$ электрона в атоме водорода можно только лишь благодаря тому, что у нас в наличии имеется огромное число таких атомов. Если бы атом был единственным, ни о каком квантовом состоянии его не могло бы идти и речи.



Рис. 6.3: Ограниченность памяти главного компьютера.

Итак, точность кванового состояния есть точность определения его амплитуд посредством измерений. Чем больше копий такого состояния мы имеем, тем более точно могут быть определены его амплитуды с помощью последовательного или параллельного измерения этих копий.

Пусть нам дана система n кубитов, относительно которой мы считаем, что она находится в состоянии $|\Psi\rangle$. Мы назовем точностью $A(\Psi)$ этого состояния максимально возможное число одинаково приготовленных образцов данной системы. Точность есть, таким образом есть максимально возможное число копий данной системы, которые доступны нам одновременно так, чтобы мы могли их независимо измерять, и, набирая статистику, определить амплитуды этого состояния.

Мы организуем такие образцы n кубитного ансамбля S_j , имеющие (предположительно!) одинаковые состояния в виде последовательности nB кубитов вида

$$S_1, S_2, \dots, S_B, \quad S_j = (s_1^j, s_2^j, \dots, s_n^j),$$

но в памяти некого абстрактного Главного Компьютера (ГК), посредством которого мы сможем определить, в каком именно состоянии находятся наши образцы, надо хранить не все S_j , а только величины, порядка *B*. Память ГК не может быть неограниченной, так что существует константа Q, такая что

$$An \le Q,\tag{6.15}$$

см. рисунок 6.3.

Однако число *n* кубитов не является точной мерой сложности состояния $|\Psi\rangle$, даже если все эти кубиты в нем запутаны. Для определения настоящей сложности мы должны принять во внимание так называемое каноническое преобразование, которое может радикально снизить число *n* без изменения состояния $|\Psi\rangle$.

Для верного определения сложности C состояния $|\Psi\rangle$ имеет место следующее соотношение:

$$AC \le Q. \tag{6.16}$$

Мы приведем аргументы в пользу такого соотношения точности и сложности в общем случае, а также покажем, что квантование амплитуд позволяет ввести в квантовую динамику подобие детерминизма, который не сводится к детерминизму классической физики. 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 $(q_1, q_2, ..., q_n)$, а преобразование Фурье над этой последовательностью вида $Q_k = \alpha \sum_j q_j e^{-\beta \ i k j}$ 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 Приложении, А.3; дополнительные сведения можно узнать из книги [68]).

Второй пример канонического преобразования дает электродинамика, где с математической точки зрения все происходит точно так же, как и для системы гармонических осцилляторов. Уравнения Максвелла алгебраическими преобразованиями можно свести к уравнениям на класическое (базисное) состояние электромагнитного поля вида $\bar{A}(\bar{R},t), \phi(\bar{R},t)$, где \bar{A} и ϕ - векторный и скалярный потенциалы, зависящие от пространственных координат $\bar{R} \in R^3$ и времени. Поле распадется на так называемые моды, каждая из которых определяется, если зафиксировать ветор импульса поля \bar{k} и направление его поляризации (электрического поля) $\bar{\varepsilon}$. Однако применить квантовую механику непосредственно в таком виде к полю совершенно не возможно. Дискретизации надо подвергнуть не только обыкновенное пространство-время \bar{R}, t , но и сами величины \bar{A}, ϕ , что делает задачу неподъемной.

Решение дает каноническое преобразование. Вместо аргумента пространственных координат \bar{R} можно рассмотреть импульсные "координаты" k, совершив над функциями \bar{A}, ϕ преобразование Фурье имеющее вид "точка в точку" - то есть перестановку базисных векторов. После чего уравнения Максвелла для одной моды примут вид уравнения гармоничского колебания с вынуждающей силой, пропорциональной плотности тока (см. подробное описание в книге [90]). Теперь можно с успехом применить описание электромагнитного поля на квантовом уровне. Квантование гармонических осцилляторов (А.3) дает квазичастицы поля - фотоны, так что свободное (без зарядов) поле оказывается очень просто описываемым - в виде состояний $|n\rangle_{ph}$ - чисел фотонов данной фиксированной моды.

Итак, переход от конкретных значений обычных координат $q_1, q_2, ..., q_n$ к конкретным значений для обобщенных координат $Q_1, Q_2, ..., Q_n$ 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 рассмотренных нами случаях - это не квантовое преобразование Фурье, о котором шла речь выше, а именно перестановка базисных векторов квантового пространства. При кубитовом представлении базисного состояния кубиты, представляющие бинарные значения координат в "новом" базисном векторе, будут иметь совершенно иной смысл по сравнению с кубитами, представляющими "старый" базисный вектор.

Мы всегда упорядочиваем бинарные записи координат лексикографически, в соответствии с приближенным разложением вещественного числа вида $a = a_0 + a_1 \cdot 2 + a_2 \cdot 2^2 + ... + a_{n-1} \cdot 2^{n-1}$. При изменении порядка на базисных векторах кубиты обретают совершенно новые значения, никак не связанные с предыдущими. Поэтому перестановка базисных векторов - очень существенное преобразование, ни в коем случае не сводящееся к простому переобозначению векторов базиса. Оно способно, например, распутать имеющуюся в старом порядке базисных векторов запутанность. Поэтому преобразование $q_1, q_2, ..., q_n \rightarrow Q_1, Q_2, ..., Q_n$ называют каноническим. В примере с цепочкой осцилляторов оно распутывает квантовое состояние реальных частиц: для квазичастиц - фононов запутанность уже не будет иметь места; то же саммое верно и для фотонов.

Вот еще совсем простой пример: обобщенное GZH - состояние вида $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00...0\rangle + |11...1\rangle)$, 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?

Его наивная сложность, обозначаемая через $\nu(|\Psi\rangle)$, определяется как число частиц в максимальном запутанном тензорном делителе $|\Psi_1\rangle$ состояния $|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes$ $|\Psi_2\rangle$.

Сложность $C(|\Psi\rangle)$ состояния $|\Psi\rangle$ есть минимальная наивная сложность состояний вида $\tau|\Psi\rangle$ по всем перестановкам τ базисных векторов.

Например, сложность обобщенного GHZ состояния $|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00...0\rangle + |11...1\rangle)$ равна единице, так как его можно полностью распутать последовательностью операторов СNOT. Если мы стартуем с базисного состояния $|\Psi(0)\rangle$ в каноническом представлении гамильтониана H, то его эволюция, индуцированная этим гамильтонианом, не может содержать состояний сложности, большей чем C(H).

Теперь мы сформулируем гипотезу о соотношении между точностью и сложностью в окончательном виде:

$$C(|\Psi\rangle)A(|\Psi\rangle) \le Q,\tag{6.17}$$

где Q есть максимальное число полностью запутанных кубитов, которые нельзя распутать какой-либо перестановкой базисных векторов.

Рассмотрим, для примера, состояние *n* кубитов вида

$$\Psi_{GSA}(t)\rangle = \alpha \sum_{j \neq j_0, 0 \le j < N} |j\rangle + \beta |j\rangle, \qquad (6.18)$$

где $\alpha = \cos(t)/\sqrt{N-1}, \ \beta = \sin(t)$ для некоторого t, и $N = 2^n$.

Данная суперпозиция имеет то свойство, что все ее базисные компоненты, за исключением ровно одного, имеют одинаковую ненулевую амплитуду, а эта одна компонента имеет другую амплитуду.

Это свойство сохраняется при любой перестановке базисных векторов, то есть при любом квазичастичном представлении. Но если бы это состояние было редуцируемым, оно имело бы вид $\lambda_1|i_1\rangle + \lambda_2|j_2\rangle + ...) \otimes (\lambda_3|j_3\rangle + \lambda_4|j_4\rangle + ...)$ для некоторых

базисных $|j_i\rangle$, а такая суперпозиция не может содержать ровно 2 значения амплитуд для всех базисных состояний, потому что здесь должно быть либо как минимум 3 разные ненулевые значения амплитуд, или она должна содержать ровно две разные ненулевые амплитуды, соответствующие двум группам базисных векторов, содержащим равное число элементов. Обе эти возможности исключены для состояний вида (6.18).

Сложность этого состояния равна таким образом n, если только $t \neq k\pi/2$ для любого целого k. Данное состояние обладает максимальной возможной сложностью из всех n кубитных состояний, и потому может быть использовано как измеритель сложности.

Такое представление волновой функции мы назовем событийным. Здесь вероятность пребывания системы в любом базисном состоянии считается как сумма квадратов чисел вещественных и комплексных квантов амплитуды, которые соответствуют состояниям, папавшим в малую окрестность в классическом пространстве с центром в данном состоянии; эту величину надо еще нормировать на единицу. Такое правило выглядит неуклюже и 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. Ценность событийного представления может быть именно для сложных систем, где правило Борна утрачивает ценность, так как набор статистики становится невозможным.

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.

6.7 Главный Компьютер

Поведение сложной системы нельзя свести к поведению независимых частиц. Поведение сложных систем можно понять, только опираясь как на квантовые представления, так и на идеологию вычислений, поскольку здесь традиционная техника математического анализа не работает. Мы должны ввести понятие Главного Компьютера, который адекватно представляет реальный процесс для нас, как абстрактного устройства, законы которого для сложных систем имеют приоритет перед обычными физическими законами; сфера же действия последних ограничена простыми системами и процессами.

Физические прототипы ГК имеют лишь ограниченную мощность, однако они способны адекватно представить процессы, традиционно относимые к химии, так же как и к тем разделам физики, для которых успешно применяются квантовые методы: прежде всего это электродинамика. Ядерные процессы пока не относятся к этому типу, их сложность радикально превышает сложность электродинамических процессов (см. [40]).

В рамках предложенного ограничения возможностей ГК мы имеем баланс между точностью и сложностью, которые определяются отдельно в каждом конкретном случае.

Для одного кубита мы можем найти амплитуды его состояния с максимальной точностью. Для простых систем, которые были в фокусе физики 20 века, возможная точность, как правило, совпадала с точностью экспериментов и мы могли определить амплитуды довольно точно. Но для еще более сложных объектов, таких как прототипы квантового компьютера, мы всегда сталкиваемся с барьером, который называют декогерентностью, то есть отклонением реальной эволюции от унитарной. Обычно это связывают с влиянием окружения в рамках концепции открытой квантовой системы (см. [21]).

Но в действительности декогерентность есть следствие соотношения неопределенностей "сложность - точность" (6.17). Для простых состояний мы имеем картинки верхнюю и левую нижнюю из рисунка 6.4, и предсказания квантовой теории работают с высокой точностью. Однако для более сложных систем мы приближаемся к ситуации, изображенной на нижней правой картинке из того рисунка.

Для экстремально сложных систем A = 1 и мы имеем единственный экземпляр такой системы, так что мы можем получить только одно базисное состояние. Здесь квантовый формализм микромира теряет силу и мы должны искать иную форму представления эволюций. Возможным путем к такой форме является квантование амплитуды, дающее своеобразную форму детерминизма, описанную выше. В любом случае, пост-квантовая механика, необходимость которой вытекает из соотношения (6.17), должна естественным образом переходить в стандартную квантовую теорию при малых сложностях возникающих состояний.

6.8 Сложность гамильтонианов

Для корректного определения сложности квантового состояния *n* частиц рассмотрели каноническое преобразование - главный метод редукции сложности, принятый в физике. Перейдем теперь к сложности гамильтонианов.

Мы будем представлять классическую координату частицы на единичном отрезке как вещественное число в его бинарной записи $2^{-l} \sum_{j=0}^{l-1} a_j 2^j$ с точностью 2^{-l} , где $a_j = 0.1$ - значения l кубитов, представляющих эту координату³ Упорядочивая кубиты лексикографически, мы получим стандартный порядок базисных векторов, в

³Для представления координаты на другом отрезке надо совершить нужное линейное преобразование. Например, если частица находится на отрезке $[-2^{l/2}, 2^{l/2}]$ приближенное кубитовое представление будет иметь вид: $2^{-l/2} \sum_{i=0}^{l-1} a_j 2^j - 2^{l/2-1}$.



Рис. 6.4: Представление вектора состояния. Кривые обозначают гипотетическую волновую функцию $|\Psi\rangle$, предсказанную копенгагенской теорией. Прямоугольники обозначают информацию о ней, которую мы можем получить, используя Главный Компьютер. Слева внизу показан случай, когда основная часть вычислительного ресурса занята точностью: $|\Psi\rangle = \lambda_0 |0\rangle + |\lambda_1\rangle$; если мы ограничим число базисных состояний до 2, как для частицы в двухъямном потенциале, мы получим удовлетворительное сходство с экспериментом. Вверху изображен случай, когда вычислительный ресурс распределен равномерно между точностью и сложностью; это область максимального совпадения с экспериментом - типичная область приложений квантовой механики.

Внизу справа основной ресурс занят сложностью: $|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \varepsilon |j\rangle$, $\varepsilon \in \{0, \epsilon\}$. Наше знание здесь ограничено только одним базисным состоянием, которое получается в одном единственном измерении. Эта область применения траектории кванта амплитуды.

котором всякий оператор будет иметь определенную матрицу.

Пусть классическое состояние частицы *i* есть вещественный вектор x_i . Тогда классическое состояние системы *n* частиц будет вектором вида $\bar{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$. Все эти объекты подлежат дискретизации так, как было указано ранее. Пусть \bar{x}' и \bar{x}'' - два вектора с непустыми множествами координат, такие что их декартово произведение совпадает с \bar{x} . Это означает, что мы разбили множество частиц на два непустых подмножества X' и X'', так что данные векторы являются наборами координат для этих подмножеств. Пусть $H(\bar{x})$ - гамильтониан нашей системы, имеющий вид

$$H(\bar{x}) = H_1(\bar{x}') + H_2(\bar{x}''); \tag{6.19}$$

где мы, как обычно, принимаем по умолчанию, что $H(\bar{x}')$ есть $H(\bar{x}') \otimes I(\bar{x}'')$, то есть на частицах, не включенных в первое подмножество этот член гамильтониана действует как идентичный оператор, и также со вторым членом. В этом случае мы назовем гамильтониан H редуцируемым. Пусть X'-максимальное подмножество компонент вектора \bar{x} (по числу элементов) такое что выполнено равенство (8.26), и гамильтониан $H_1(\bar{x}')$ не редуцируемый. Тогда X' мы назовем ядром данного гамильтониана.

Примем по умолчанию, что любая эволюция начинается с базисного состояния рассматриваемой системы. Так как (8.26) влечет равенство $exp(-\frac{i}{\hbar}Ht) = exp(-\frac{i}{\hbar}H_1t) \otimes exp(-\frac{i}{\hbar}H_2t)$, мы видим, что ядро гамильтониана - это максимальное подмножество частиц, состояние которых в эволюции, индуцируемой данным гамильтонианом Hможет быть запутанным; мы обозначаем число частиц в нем через $\nu(H)$, и назовем его *наивной* сложностью данного гамильтониана.

Рассмотрим преобразование координат частиц вида

$$q_i = q_i(x_1, x_2, ..., x_n), \ i = 1, 2, ..., n;$$
(6.20)

обозначим $\bar{q} = (q_1, q_2, ..., q_n)$ и пусть $H_q = H(x_1(\bar{q}), x_2(\bar{q}), ..., x_n(\bar{q}))$ - первоначальный гамильтониан, но записанный в новых координатах $q_i, \bar{x} = \bar{x}(\bar{q})$ которые получаются инвертированием (6.20). Мы введем новые виртуальные частицы с координатами $q_1, q_2, ..., q_n$, и назовем их квазичастицами (подробное описание дано в Приложении см. А.3).

Классическое состояние системы в первоначальном представлении есть набор определенных значений $x_1, x_2, ..., x_n$. Каждое классическое состояние будет соответствовать другому классическому состоянию той же системы, которое находится с помощью формул (6.20). Базисный вектор гильбертова пространства переходит, тем самым, в другой базисный вектор того же самого пространства. Стандартное упорядочение базисных векторов, соответствующее кубитовому представлению координат, переходит в другое упорядочение, то есть преобразование классических координат (6.20) есть перестановка базисных векторов в гильбертовом пространстве квантовых состояний.

При этом преоразовании кубитовое представление значений координат будет иметь уже другой, новый смысл. В новых координатах, координатах квазичастиц, гамильтониан примет новый вид H_q . Мы назовем преобразование координат (6.20) каноническим, если $\nu(H_q)$ минимальное из всех возможных для всех таких преобразований.



Рис. 6.5: Квантовое представление квазичастиц

Тогда переход к квазичастицам будет означать редукцию сложности первоначального гамильтониана. Итак, каноническое преобразование есть перестановка базисных векторов, минимизирующая наивную сложность гамильтониана.

Переход к описанию эволюции в виде квазичастиц имеет вид $H = \tau^{-1}H_q\tau$ где перестановка базисных векторов τ есть переход к квазичастицам при каноническом преобразовании. Тогда представление оператора эволюции имеет вид $exp(-\frac{i}{\hbar}Ht) = \tau^{-1}exp(-\frac{i}{\hbar}H_qt)\tau$ и требует меньших вычислительных ресурсов, чем прямое вычисление $exp(-\frac{i}{\hbar}Ht)$, так как главный ресурс тратится на ядро, которое для квазичастичного представления имеет наименьший размер.

Графическое представление квантового состояния в терминах квазичастиц показано на рисунке 6.5.

6.8.1 Простые примеры

Рассмотрим гамильтониан H замкнутой цепочки четырех взаимодействующих кубитов, который редуцируется каноническим преобразованием CNOT до полностью редуцированного гамильтониана $H_q = \sigma_x^{(1)} \otimes I_2 + I_1 \sigma_x^{(2)}$:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = CNOT \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} CNOT.$$

Заметим, что перестановка базисных векторов, являющаяся каноническим преобразованием, должна быть запутывающим, и, одновременно, распутывающим преобразованием, так как она редуцирует ядро гамильтонииана. Например, оператор *CNOT*, примененный последовательно к состоянию $|00...0\rangle + |11...1\rangle$ полностью его распутывает. Противоположный пример дает гамильтониан Тависа-Каммингса для n двухуровневых атомов, взаимодействующих с резонансной модой в оптической полости. Здесь имеется базисное состояние поля и атомов вида $|n\rangle_{ph}|00...0\rangle_{at}$, так что столбец матрицы гамильтониана, соответствующий этому состоянию, состоит из чисел $g\sqrt{n}$ и одного числа $n\hbar\omega$, причем такой столбец единственный. Никакой гамильтониан вида (8.26) не может иметь этого вида даже для n = 2.

Для двухатомной системы с общей энергией $2\hbar\omega$ гамильтониан имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} 2\hbar\omega & g & g & 0\\ g & 2\hbar\omega & 0 & g\sqrt{2}\\ g & 2\hbar\omega & 0 & g\sqrt{2}\\ 0 & g\sqrt{2} & g\sqrt{2} & 2\hbar\omega \end{pmatrix}$$
(6.21)

У него есть то свойство, что ровно у одного столбца есть два члена вида $g\sqrt{2}$, а в других столбцов таких членов меньше. Однако этого не может быть в матрице вида $H_1 \otimes I + I \otimes H_2$ ни при каких H_1 и H_2 , что легко проверяется непосредственно.

Поэтому неидентичного канонического преобразования для гамильтониана Тависа-Каммингса не существует.

Сложность гамильтониана H, обозначаемая через C(H), есть минимальная наивная сложность оператора $\tau^{-1}H\tau$ по всем перестановкам τ базисных векторов.

В примерах с системой гармонических осцилляторов и четырехмерным гамильтонианом, приведенных выше, сложность гамильтонианов будет равна 1, то есть они могут быть полностью редуцированы каноническим преобразованием (для системы гармонических осцилляторов этот факт доказан в Приложении А.3).

6.8.2 Экспериментальное нахожение константы Q

Мы можем найти приблизительную оценку константы Q, строя состояния вида (6.18). Это - состояния квантового компьютера, реализующего алгоритм Гровера GSA для единственного целевого состояния $|j_0\rangle$ (see [13]). Пусть $N = 2^n$. Мы положим $t_0 = \arcsin(1/\sqrt{N})$. Начнем с состояния

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle = (\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)^{\otimes n},$$

сложность которого равна единице. После выполнения первого шага алгоритма t становится равным t_0 , и мы получаем состояние сложности n вида (6.18). Уже на первом шаге сложность прыжком от единицы достигает максимального значения. Если $N = 2^Q$, мы выходим за пределы допустимых состояний в амплитудами вида (6.3), имеющих свойство (6.17).

Таким образом, мы можем оценить константу Q, увеличивая число кубитов n, для которого алгортм GSA работает корректно. Здесь под корректной работой подразумевается возможность повышения амплитуды целевого состояния до уровня, скажем,



Рис. 6.6: Граница работы GSA в терминах кванта амплитуды

 $1/\sqrt{2}$ по сравнению с остальными, которые будут иметь амплитуду порядка $1/\sqrt{N}$. для более грубой оценки мы можем фиксировать подскок амплитуды на $1/\sqrt{N}$ по сравнению с остальными, но это имеет смысл только для малых n, не превосходящих 20.

Рисунок 6.6 иллюстрирует границу работы алгоритма Гровера в терминах кванта амплитуды.

Вопрос в том, что произойдет с текущим состоянием, если амплитуды, вычисленные по стандартной квантовой теории, становятся по абсолютной величине меньше ϵ , формально открыт. Однако естественно предположить, что малые амплитуды просто исчезают с соответствующей перенормировкой вектора состояния. Это означает, что применение GSA в окрестности $N \approx 2^Q$ даст целевое состояние очень быстро, гораздо быстрее чем при реализации GSA в стандартной модели. Однако этот эффект мог бы проявиться лишь при идеальной реализации GSA; практически, амплитуды основной массы состояний в $|\Psi_{GSA}(t)\rangle$ in (6.18) не могут быть одинаковыми, так что обнуление не произойдет одновременно для всех состояний, не являющихся целевыми, что сильно испортит картину.

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 диинамики совершенно необычна, но именно она, вероятнее всего, окажется адекватной реальным сложным системам, которые являются предметом проекта квантового компьютера.

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 (6.13).

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

$$N \log_2(1/\varepsilon) \le Q,\tag{6.22}$$

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.

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 *ст* мы имеем:

$$\omega \approx 10^{10} \ sek^{-1}, \ E_{QED} = \hbar \omega \approx 10^{-17}, \ dt \approx \hbar / E_{QED} = 10^{-10}$$

Учитывая время рабиевской осцилляции $t \approx 10^{-6} sec$, мы получаем $N = t/dt \approx 10^4$. Тогда $Q \ge 10^4 < 2^{14}$ 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 $Mev \approx 10^{-5} \ erg$, и соотношение неопределенности "энергиявремя" даст $dt \approx 10^{-22} \ sec$. 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. [69]). Она занимает примерно 10^{-11} sec. Для нее оценки, аналогичные вышеприведенным, 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.

6.9 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 КОУ.

Во-вторых, это дает точную модель декогерентности, при которой эксперименты по масштабированию квантового комьютера 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 точной отладки 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 ядерной физики на языке стандартной квантовой теории требуется уже работа GSA на более чем 70 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.

В основе успехов квантовой теории многих частиц, развитой в 20 веке лежит существование канонического преобразования в важнейших случаях: системы взаимодействующих гармоническох осцилляторов и для электромагнитного поля, а также и иных системах, допускающих редукцию сложности переходом к квазичастицам. Все такие системы обладают невысокой сложностью - в нашем понимании этого термина.

Однако квантовый компьютер требует для своей полноценной работы операций с состояниями, сложность которых растет непрерывно с ростом самой системы. Это выводит нас за пределы сферы применимости квантовой теории как таковой. Физика квантового компьютера требует разработки пост-квантовой теории, способной описывать на микроуровне огромные коллективы разнообраных частиц.

Соотношение (6.17) означает жесткое ограничение на масштабирование фейнмановского квантового компьютера числом кубитов Q. Это принципиально меняет сам путь развития проекта квантового компьютера в направлении от абстрактных математических задач перебора к практически важным задачам, связаннным с химией и биологией (см. [43]).

6.10 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 копенгагентской теории, са-

мо 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.

КОУ, 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 применения 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 7

Правило отбора: путь в пост-квантовую механику

До конца 20 века физики исследовали, в основном, простые системы, к которым квантовая физика применялась в виде матричного формализма, так что главная трудность заключалась в нахождении адекватной модели и решении уравнения Шредингера или его производных - вручную или на компьютере. Эта копенгагенская теория оказалась ограниченной современными приборами на квантовых эффектах; именно они и составляют экспериментальную базу, на которой теория проверялась и показала свою необычайную эффективность.

Квантовый компьютер принципиально отличается от таких приборов. Этот проект - шаг в сторону от сферы применимости квантовой теории как таковой, и причина тому - экспоненциальный рост размерности гильбертова пространства состояний. Эксперименты, которые проводились над ограниченными прототипами квантового компьютера, выявили существование границы применимости копенгагенской теории. Прежде всего - это попытки реализовать алгоритм Гровера GSA, которые завершились на уровне не более полутора десятков кубитов из-за декогерентности, под которой понимают отклонение реальной эволюции системы кубитов от предсказания копенгагенской теории. Трактовка декогерентности как влияния окружения не может считаться удовлетворительным объяснением этого явления, когда разрушаются именно те состояния кубитовой системы, которые критически важны для квантового вычисления, в то время как запутанные состояния даже многих тысяч кубитов вполне достижимы в экспериментах.

Итак, мы видим, что применение квантового подхода к сложным системам означает очень существенную модификацию самой квантовой механики, и не может быть сведено к уже известному арсеналу средств вроде подбора подходящей модели или базиса, в котором матричная техника приводила бы к тому, что видит экспериментатор. Вместе с тем сама приборная база - устройства на квантовых эффектах, для которой мы работали прежде, также должна претерпеть очень существенные изменения. Реальные сложные системы и процессы принадлежат миру живого и формально оказываются в сфере биологии, поэтому и распространение квантовых методов на сложные системы не может опираться только лишь на фейнмановскую схему квантового компьютера как устройства, состоящего из кубитов и связывающих их гейтов. Здесь необходимо опираться на эвристику биологии, а сами процессы, в идеале, должны представлять собой динамические сценарии жизни.

Гигантская концептуальная пропасть, отделяющая физические приборы от живых существ, не дает возможности непосредственно говорить о квантовой биологии - такой науки не существует. Однако представление о единстве мироздания заставляет нас двигаться именно в эту сторону, и делать первые шаги по пути от точного естествознания к живому, как бы ни был этот путь длинен.

Но и сама биология не является единственной конечной точкой; она тесно взаимодействует с социальными процессами. Политика, непосредственно затрагивающая интересы людей понятным для них образом (в отличии от естественных дисциплин, осознание роли которых требует интеллектуальных усилий, не всем доступных), наряду с биологическими опытами, дает не только обширный экспериментальный материал, но и новые понятия, необходимые для квантовой теории сложных систем.

Соотношение точности и сложности влечет необходиомсть радикального сокращения пространства состояний, что необходимо для моделирования реального процесса. Необходим очень жесткий отбор базисных состояний, на которых концентрируется основная доля амплитуды - именно так видится квантовый формализм со стороны физики. И начнем мы с естественного ограничения копенгагенской теории, связанного со сложностью квантовых состояний, возникающих при эволюции рассматриваемой системы. После такого, четко формулируемого математического вступления мы рассмотрим дальние цели квантового компьютера - возможные квантовые эвристики для биологии и социального поведения.

Физика сложных процессов представляет собой совершенно новую, пост-квантовую науку, а не простое применение методов копенгагенской теории атомов, молекул и простых сред, изучавшихся в 20 веке. Традиционная квантовая теория есть лишь стартовая точка для развития этой новой науки; главной же задачей ее будет раскрытие механизмов жизни на всех уровнях организации - от вирусов и бактерий до сложных сообществ, включая человеческое.

Математический аппарат пост-квантовой механики будет алгоритмическим, а не аналитическим, как было в копенгагенской теории. Метод отбора, заимствованный из биологии, и связанные с ним квантовые нейронные сети - вот те формальные инструменты, которые должны дать нам средство преодоления экспоненциального барьера сложности, и открыть путь к пониманию механизмов жизни.

7.1 Рейтинг базисных состояний - нулевое приближение

Ввиду ограниченности возможной размерности пространства квантовых состояний мы не можем рассчитывать на неограниченное масштабирование фейнмановского квантового компьютера. Таким образом, актуальной задачей становится нахождение эвристики для построения динамических сценариев сложных процессов в классических терминах, но эвристики, опирающейся на квантовый подход. Искомый нами классический алгоритм для простых систем должен давать тот же результат, что и квантовая эволюция, так что декогерентность должна трактоваться только как результат ограниченности классической памяти моделирующего компьютера, который мы назвали Главный Компьютером.

Обозначим через \mathcal{O} множество всех возможных базисных состояний рассматриваемой сложной системы. Это множество - необозримо, оно не может войти в память даже самого мощного суперкомпьютера, поэтому мы будем называть его *ойкуменой*. В каждый момент времени t в нашем распоряжении будет находиться только очень малая часть B(t) ойкумены, назовем ее рабочим базисом, а подпространство L(t) = L(B(t)), натянутое на этот базис - рабочим пространством. Размерность L(t)не должна превышать нескольких миллиардов, так что операции со строками такий длины были бы доступны для современных суперкомпьютеров.

Время мы разобьем на интервалы продолжительности Dt: 0, Dt, 2Dt, ..., и вектор состояния в интервале *n* обозначим через $|\Psi_n(t)\rangle$, где $nD \leq t \leq (n+1)D$. Внутри каждого интервала рабочее пространство L_n не будет меняться, так что мы сможем применять к текущему состоянию $|\Psi(t)\rangle$ приемы линейной алгебры:

$$|\Psi_n((n+1)Dt)\rangle = U_t |\Psi_n(nD)\rangle.$$

Однако переход от $|\Psi_n(nD)\rangle$ к $|\Psi_{n+1}((n+1)D)\rangle$ будет особым: здесь результирующий вектор будет принадлежать уже другому пространству L_{n+1} . Базис B_{n+1} этого пространства получается из базиса B_n предыдущего пространства с помощью *правила* отбора, который мы сейчас и сформулируем.

Смысл этого правила: отбирать в новый базис B_{n+1} надо только такие вектора из старого базиса, которые могут порождать *перспективные* состояния, и включать в новый базис новые вектора из ойкумены только в том случае, когда эти новые вектора являются перспективными.

При этом перспективными, говоря кратко, являются такие базисные состояния, значение вектора состояния в которых принципиально важно для определения вида эволюции. Наиболее общим принипом отбора является рейтинг базисного состояния $|j\rangle$, который, в нулевом приближении, определяется как вероятность, соответствущая данному базисному состоянию:

$$R(|j\rangle) = |\langle j|\Psi\rangle|^2,$$

так что (в нулевом приближении) перспективным может считаться любое базисное состояние $|j\rangle$, для которого рейтинг не ниже некоторой границы $\epsilon = 1/2^Q$, где Q-константа соотношения "точность-сложность" (6.17).

Здесь возникает естественный вопрос. Предположим, что мы удалили из некоторой суперпозиции, имеющей вид тензорного произведения $\phi_1 \otimes \phi_2 \otimes \ldots$ все состояния с малым рейтингом. Это может привести к повышению сложности состояния. Мы исходим из того, что с самого начала выбирается каноническое преобразование, и соответствующее ему назначение кубитов, значения которых составляют базисные состояния. Мы занимаемся моделированием только ядра рассматриваемой системы, но не всей системы. Предполагаем, что именно ядро - набор кубитов, который описывает максимальный по размеру запутанный тензорный компонент в каноническом представлении, именно это ядро определяет всю динамику реальной системы. Если размер ядра не превосходит константы Q, и мы обеспечим, с помощью рейтинга, правдоподобное моделирование динимики ядра, мы овладеем всей динамикой системы.

Таким образом, выбрав ядро на начальном этапе, мы в дальнейшем можем уже не заботиться о возможных упрощениях текущего состояния, если оно вдруг окажется разложимым на тензорные сомножители; урезание его по рейтингу даст нам всю инструкцию о его динамике. Вопрос свелся к выбору такого рейтинга.

Нулевое приближение рейтинга имеет большой недостаток. Рабочее пространство, составляющее лишь очень малую часть ойкумены, должно изменяться. Но те состояния, которые в будущем могут стать перспективными, сначала не будут иметь большого рейтинга. Если мы на этом основании отбросим их, мы никогда не сможем получить правильной модели динамики. Таким образом, нулевое приближение рейтинга надо дополнить первым приближением, когда для состояний с малой аплитудой мы будем принимать во внимание также не только абсолютную величину амплитуды, но и скорость ее роста во времени.

Мы, таким образом, приходим к биологической эвристике отбора, когда рабочая область уподобляется популяции, в которой есть родительские особи, обладающие достаточно большой амплитудой, и детские особи, величина амплитуды которых не столь важна, зато очень важна скорость ее роста.

7.2 Стратификация рабочих состояний по родительству

Мы пришли к следующей картине динамики сложной системы. По ойкумене движется рабочее пространство, причем это продвижение осуществоляется прыжками с интервалом Dt каждый. В промежутке между прыжками происходит перераспределение амплитуды согласно унитарному закону для старой рабочей области, и эта перераспределенная амплитуда используется для нового прыжка $B_n \to B_{n+1}$ (см. рисунок 7.1).

Нулевое приближение рейтинга приводит к чрезвычайно затратной схеме численного моделирования. Здесь мы должны взять Q настолько большим, чтобы величина зерна амплитуды ϵ была бы равна зерне разрешения при применении численных методов решения уравнения Шредингера. Это требование сильно завышает оценку для Q, ведя к неоправданно большой размерности рабочего пространства и затрат на обработку длинной строки - вектора состояния. В реальности амплитуда для разумно организованной эволюции никогда не размазывается по всем состояниям; она концентрируется на небольшом их числе, которые и целесообразно включить в новое множество B_{n+1}^{1} . Вместе с тем необходимо также обеспечить включение в него новых состояний с быстро растущей амплитудой, так как именно такие состояния указывают на направление движения рабочего пространства по ойкумене.

Мы приходим к необходимости разделять состояния как по амплитуде, так и по скорости ее роста. Для этого мы введем понятие родителей и детей. Пусть $|i\rangle$ и $|j\rangle$

¹Исключение составляет уникальный тип эволюции по алгоритму GSA; но в ней результат ясен заранее - уже на первом шаге любой метод отбора даст результирующее состояние.

такие состояния, что $|j\rangle \in B_n$, $|i\rangle \notin B_n$ и $\langle i|H|j \rangle \neq 0$. Мы назовем $|j\rangle$ родителем, а $|i\rangle$ - ребенком, и обозначать такое отношение родительства через R(i, j). Состояние из B_n , не являющееся потенциальным родителем, назовем пожилым. В новую область B_{n+1} войдут некоторые дети, рейтинг которых достаточно быстро растет, их родители, имеющие не слишком низкий рейтинг, и пожилые, также имеющие не слишком низкий рейтинг. Границы рейтинга для всех трех категорий будут различны.

Модель с отбором разделяет рабочую область базисных состояний B_n на несколько частей: фронт волны, новая область, основная часть и арьергард. Фронт волны - родители, новая область - дети, основная часть - пожилые с высоким рейтингом, включаемые в рабочую область, и арьергард - пожилые с низким рейтингом, готовые к исключению из рабочей области.

Нетривиальный эффект, получаемый при такой стратификации рабочих состояний - обратная волна, идущая от фронта по направлению к арьергарду. Жесткость отбора детей по степени роста их рейтинга ведет к заметному торможению фронта; этот эффект подобен столкновению с препятствием на пути волны - он рождает обратную волну. Эта волна движется в направлении, противоположном основному направлению движения рабочей области по ойкумене, вызывая неожиданный рост рейтинга арьергарда. Общее направление движения сохраняется, однако пики рейтинга будут неожиданно мигрировать; этому есть интересная интерпретация.

Стандартная квантовая теория теоретически допускает процессы, применение к которым алгоритма отбора дает неожиданный результат - это быстрые квантовые алгоритмы. Например, в вычислении по алгоритму Гровера для случая единственного решения будет наблюдаться быстрый рост амплитуды одного единственного состояния, так что амплитуды всех других состояний будут стремиться к нулю, оставаясь при этом равными. Если число кубитов велико, алгоритм отбора сразу даст тогда именно это единственное целевое состояние сразу, как только будет совершен первый шаг эволюции. Это наводит на мысль о том, что возникающие на практике переборные задачи, которые в точной математической формулировке требуют экспоненциального ресурса памяти, в реальности решаются очень быстро, так что трудности перебора во многом являются следствием излишних абстракций.

Итак, наша рабочая область будет охватывать ничтожную часть ойкумены - именно ту часть, которая критически важна для сценария с данным начальным условием. Эта рабочая область - носитель текущего вектора состония, будет перемещаться по ойкумене, используя унитарную динамику в своих стационарных положениях, и трансформацию рабочей области при переходе от одного стационарного положения к другому. Так мы обеспечим высокую степень экономии памяти моделирующего комьютера и возможность строить длинные и содержательные сценарии важнейших процессов, даже выходящих далеко за пределы традиционной физики.

7.2.1 Как избежать использования матрицы плотности

Алгоритм отбора рабочей области предполагает представление состояния системы в виде вектора, то есть все состояния должны быть чистыми. Таким образом, фундаментальный принцип отбора оказывается неприменимым к смешанным состояниям, которые получаются в виде решения квантового основного уравнения. Дей-


Рис. 7.1: Эволюция рабочей области по правилу отбора

ствительно, в матрице плотности есть только произведения различных амплитуд, где большая амплитуда может умножаться на малую, так что нет никакого разумного критерия отбора. Более того, матрица плотности очень расточительна в смысле копьютерной памяти, требующейся для ее представления: память квадратична по отношению к размерности пространства состояний.

Однако отказ от матрицы плотности автоматически означает отказ от марковости рассматриваемого квантового случайного процесса, а именно, отказ от того предположения, что окружение не имеет долговременной памяти.

Описание эволюции с помощью только вектора состояния $|\Psi(t)\rangle$ в случае того или иного типа декогерентности предполагает автоматический отказ от унитарной динамики даже в том случае, когда оператор эволюции $|\Psi(t)\rangle \rightarrow |\Psi(t+dt)\rangle$ определен для всех начальных векторов $|\Psi(t)\rangle$. От такого описания мы должны потребовать лишь условия нормировки $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. Соблюдения линейности требовать мы уже не можем.

Линейность квантовой эволюции, между прочим, означает, что оператор эволюции U_{dt} : $|\Psi(t)\rangle \rightarrow |\Psi(t+dt)\rangle$ действует не на один лишь вектор $|\Psi(t)\rangle$, а на все пространство состояний, преобразуя его в соответствии с унитарным законом $U_{dt} = exp(-\frac{i}{\hbar}H \ dt)$. Однако этот закон линейности в чистом виде работает только на узкой площадке в несколько десятков кубитов; дальше его действие недостоверно (6.6). Дальше - в сторону увеличения сложности, лежит область, которую можно назвать "постквантовой механикой", и которую только предстоит создать. Отказ от квантового основного уравнения и замена его эволюцией вектора состояния - важный шаг на пути создания такой теории.

Хорошей тестовой задачей в случае многоатомной системы будет эволюция вектора состояния, начинающаяся с $|\Psi(0)\rangle = |0\rangle_{ph}|01\rangle_{at}$. Такое состояние является суперпозицией синглета и триплета:

$$|0\rangle_{ph}|01\rangle_{at} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s\rangle + |t\rangle), \ |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle), \ |t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle).$$

Здесь эволюция с утечкой фотона из полости должна давать состояния $|0\rangle|s\rangle$ и

 $|0\rangle|00\rangle$ - каждое с вероятностью 1/2.

Мы могли бы попробовать немного изменить КОУ, заменив его дифференциальным уравнением на вектор $|\Psi(t)\rangle$, вида

$$i\hbar|\Psi\rangle = (H + i\gamma \ a^+a)|\Psi\rangle,$$
(7.1)

для случая единственного фактора декогерентности - утечки фотона из полости $A = a; \gamma > 0$. Решение такого уравнения не будет сохранять норму вектора состояния, так что нам придется еще специально его нормировать.

В простом случае системы двух атомов в полости с общей энергией, равной $\hbar\omega$, базисные векторы пространства состояний будут: $|0\rangle_{ph}|01\rangle_{at}$, $|0\rangle|10\rangle$, $|1\rangle|00\rangle$, так что уравнение (7.1) является системой 3 дифференциальных уравнений для 3 функций от t. Одно собственное значение, соответствующее синглету $|s\rangle$, будет нулевым, а вещественные части двух других собственных чисел матрицы этой системы будут отрицательными (проверьте!), поэтому мы будем иметь угасание нуля модулей всех амплитуд при $t \to \infty$ кроме амплитуды синглета, которая будет постоянной.

Это соответствует правильному решению тестовой задачи. Однако уравнение (7.1) не может служить полноценной заменой квантового основного уравнения, поскольку оно не отображает необратимое "перетекание" амплитуды в состояние наименьшей энергии $|0\rangle|00\rangle$. Это "перетекание" никак нельзя выразить с помощью модификации уравнения (7.1) из-за проблемы с нормировкой.

Практика показывает, что описать требуемую эволюцию с помощью дифференциального уравнения вряд ли возможно вообще. Далее, в параграфе 8.10 следующей главы мы увидим, как можно добиться желаемого типа описания с помощью итерационной схемы, не являющейся разностной схемой какого-либо дифференциального уравнения. Этот алгоритм позволит нам формулировать эволюцию системы в терминах чистого состояния, к которому можно будет практически применять принцип отбора.

7.3 Простейший алгоритм отбора, основанный на рейтинге

Рейтинг r(j) базисного состояния $|j\rangle$ - основа алгоритма отбора рабочей области B_n . Целью данного алгортма является отбор очередной рабочей области B_n таким образом, чтобы она представляла всю значимую часть квантовой эволюции во всей ойкумене. Для возможности компьютерного моделирования процесса необходимо, чтобы число элементов в B_n не превышало некоторого значения N, которое выбирается так, чтобы вектор длины M = Nc допускал быстрые манипуляции на компьютере, где c - верхняя граница числа детей для всех базисных состояний.

Сам шаг алгоритма состоит в следующем.

По заданной рабочей области B_n строится ее расширение - множество $B_n = B_n \cup B'_n$, где B'_n - множество детей состояний из B_n .

Затем производится α шагов разностной схемы

$$|\Psi(t+dt)\rangle = (1 - \frac{1}{\hbar}H \ dt/\alpha)|\Psi(t)\rangle, \qquad (7.2)$$

или аналогичной, приближающей унитарную динамику в пространстве состояний \tilde{B}_n .

После этого вычисляется рейтинг $r_n(j)$ для каждого состояния $|j\rangle \in \tilde{B}_n$ и определяется граничное значение r_n^0 так что число состояний $|j\rangle \in \tilde{B}_n$, для которых $r_n(j) \ge r_n^0$ не превосходит N, причем r_n^0 - минимальное число с данным свойством.

Теперь в множество B_{n+1} включаются те и только те состояния из \tilde{B}_n , для которых рейтинг не меньше r_n^0 .

Таким образом, алгоритм отбора сводится к способу подсчета рейтинга r_n базисных состояний.

7.4 Рейтинг базисных состояний - уточнение

Для определения рейтинга мы будем использовать отношение родительства R(i, j), введенное в параграфе 7.2.

Определим скорость роста первого и второго порядка $g_n^1(i)$ и $g_n^2(i)$ базисного состояния $|i\rangle \in B_n$ как

$$g_n^1(j) = \frac{|\langle i(|\Psi_n\rangle - |\Psi_{n-1}\rangle)|}{dt}, \ g_n^2(j) = \frac{|\langle i(|\Psi_n\rangle - 2|\Psi_{n-1}\rangle + |\Psi_{n-2}\rangle)|}{dt^2}.$$

Положим

$$R_n(i) = \max_j \{ r_n(j) \mid R(i,j), \ |j\rangle \in \tilde{B}_n \}$$

$$(7.3)$$

то есть как максимальный рейтинг из всех его родителей, принадлежащих \tilde{B}_n - расширению текущей рабочей области.

Мы будем представлять рейтинг $r_n^{\Psi}(i)$ базисного состояния $|j\rangle$ в суперпозиции $|\Psi\rangle = \sum_{i\in B_n}\lambda_i|i\rangle$ в виде

$$r_{n+1}(i) = \mathcal{P}(|\lambda_i|, g_n^1(i), g_n^2(i), R_n(i))$$

где \mathcal{P} - полином, коэффициенты которого предстоит найти путем численных экспериментов. Один из способов их нахождения - обучение квантовой нейронной сети (см. 7.8).

Неизвестно, как зависит полином \mathcal{P} от модели, то есть от гамильтониана задачи, и зависит ли от гамильтониана вообще. Сам подбор этого полинома предусматривает сравнение вычислений на суперкомпьютере без применения отбора рабочей области с вычислениями на ноутбуке, но с отбором рабочей области. Полином считается эффективным, если результаты этих вычислений сходны друг с другом (совпасть точно они не могут). Первоначально можно искать линейную форму этого полинома, что сильно сузит область поиска.

7.5 Улучшенный алгоритм отбора рабочей области

Простейший алгоритм отбора, изложенный в предыдущем параграфе, обладает существенными недостатками. Он требует ряда манипуляций с рейтингом детей, включаемых в рабочую область, что существенно увеличивает сложность. Кроме того, приближение (7.2) дает ошибку порядка $O(dt^2)$ на каждом шаге, что может дать большое расхождение на временах реальных процессов. И наконец, понятие родительства должно включать не только унитарную эволюцию, но и изменение вектора состояния в результате обмена со средой, что особенно важно для немарковских эволюций.

Пусть α - положительное целое число, которое будет определять точность представления эволюции в наше модели.

Пусть $|j\rangle$ - состояние, входящее в рабочую область, и $|i\rangle$ - произвольное базисное состояние из ойкумены. Мы скажем, что $|j\rangle$ - родитель для $|i\rangle$, а $|i\rangle$ - ребенок $|j\rangle$, если выполнено одно из условий:

1)

$$\exists a: \ 0 < a \le \alpha \quad \langle i | H^a | j \rangle \neq 0 \tag{7.4}$$

2) $|i\rangle$ - акцептор, а $|j\rangle$ - донор в смысле 8.10.1, если мы рассматриваем модель с декогерентностью в виде обмена фотонами с окружением, или или в аналогичных случаях, возникающих при замене КОУ каким-либо алгоритмом изменения вектора чистого состояния.

Пусть k обозначает максимальное возможное число детей у базисных состояний из рабочей области.

Мы определим совместную динамику вектора состояния и рабочей области: $|\Psi(t)\rangle$, B(t) в виде итераций следующего основного шага, в начале которого у нас имеется пара $|\Psi(t)\rangle$, B(t).

Мы определим множество базисных векторов B'(t + dt) как объединение B(t)и всех детей состояний из B(t). Пусть H' обозначает ограничение оператора H на подпространство, порожденное B'(t + dt).

Определим вектор $|\Psi'(t+dt)|$ равенством

$$|\Psi'(t+dt) = (1 - \frac{i}{\hbar}H' dt/\alpha)^{\alpha}|\Psi(t)\rangle.$$
(7.5)

Зададим числа N_0 и $N_{max} = N_0 k^{\alpha}$; последнее число будет размером доступной нам памяти компьютера.

Выделим некоторые состояния, которые назовем лишними; они будут образовывать множество Y. Безусловные требования к Y состоят в том, что а) при удалении из B'(t + dt) лишних состояний получится множество, состоящее из не более чем N_0 элементов и б) если некоторое состояние $|j\rangle$ является лишним, то для любого другого состония $|i\rangle$ если оно не является лишним, то $|\langle i|\Psi'(t + dt)\rangle| \geq |\langle j|\Psi'(t + dt)\rangle|$. Эти два требования гарантируют ограничение памяти моделирующего компьютера и то, что удаляемые из рабочей области состояния будут иметь заведомо меньшую амплитуду, нежели оставляемые в ней.

Теперь мы определим рабочую область B(t+dt) как результат удаления из B'(t+dt) лишних состояний.

Наконец, определим $|\Psi(t+dt)\rangle$ как результат удаления из $|\Psi'(t+dt)\rangle$ всех лишних компонент и соответствующей перенормировки полученного состояния.

Заметим, что если первоначальное состояние имело N_0 компонент, то в процессе описанной эволюции все состояния $|\Psi(t)\rangle$ будут иметь не более N_0 компонент, причем для их получения не будут использоваться пространства более чем с N_{max} измерениями. Схематически эволюция состояния и рабочей области с процессом отбора показана на рисунке 7.2.

Данный алгоритм представляет собой всего лишь схему, которая должна быть уточнена в ходе практического моделирования. Прежде всего, уточнению подлежит определение лишних состояний. Рассмотрим два варианта такого определения.

Вариант 1. Назовем лишним такое состояние $|j\rangle$, что $|\langle j|\Psi'(t+dt)\rangle|^2 < \varepsilon = 1/\sqrt{N_0}$.

Это определение накладывает равномерные жесткие ограничения на скорость роста амплитуды детей: чтобы не попасть в разряд лишних, состояние должно за время dt достичь амплитуды ε . С другой стороны, данное определение лишних состояний поддается очень простой проверке, и не занимает времени в вычислении.

Вариант 2. Выберем множество лишних состояний \mathcal{L} таким образом, чтобы любое из состояний, входящих в множество $B(t+dt) = B'(t+dt) - \mathcal{L}$, имело бы не меньший модуль амплитуды, чем любое лишнее состояние, и число состояний в B(t+dt)не превосходило бы N_0 . Иными словами, чтобы были выполнены безусловные требования к лишним состояниям.

Такое определение требует больших затрат времени, чем при первом варианте. Для его реализации можно упорядочить состояния, входящие в B(t + dt), и выбрать первые не более чем N_0 состояний по порядку. Однако здесь мы можем сохранить в рабочей области состояния с амплитудой, меньшей ε , среди которых могут оказаться перспективные для будущей эволюции состояния. Эта возможность реализуется при относително малых множествах B'(t + dt); такое моделирование может дать лучшее приближение к реальности, чем при варианте 1.

Дальнейшие усовершенстования могут быть связаны с выбором промежуточного множества B'(t+dt). Здесь можно, во-первых, варьировать константу α , и во-вторых, выбирать знечения k не одинаковым для всех состояний. Последняя возможность связана с а-приорным знанием о конечном результате эволюции, и может существенно редуцировать сложность моделирования. Например, для k = 2 можно выбрать $\alpha = 10$ - сложность будет той же, что и для сочетания k = 10, $\alpha = 3$. Конкретный выбор параметров k и α может быт сделан в результате обучения квантовой нейронной сети (КНФ, см. параграф 7.8 ниже).



Рис. 7.2: Эволюция состояния и рабочей области при отборе.

7.6 Дальнейшие усовершенствования: метод одного куста

Представим, что у нас имеется ансамбль из миллиарда атомов в ограниченном пространстве, которое мы условно разделим на полости, связанные волноводами. Если мы допустим наличие детей у состояния $|j\rangle$ этого ансамбля, которые получаются, например, перемещениями любого из атомов в 6 возможных направлениях, мы уже получим 6 милллиардов детей - и это только у одного базисного состояния. Между тем, интересный динамический сценарий вряд ли будет зависеть от одновременного движения всех атомов, тем более что среди этого миллиарда наверняка большинство будут однотипными атомами, и положение их львиной доли не будет играть вообще никакой роли. Так что подавляющее большинство из этого числа детей будет иметь одинаковый и очень маленький рейтинг, что не просто сильно осложнит отбор, а сделает его вообще невозможным. Проблема еще более усугубится, если точность метода α существенно больше 1.

Возможный выход состоит в том, чтобы сделать α зивисимым от того, какой именно атом движется. Пусть для небольшой группы близко расположенных атомов α составляет, к примеру, 3, а для всех других 0. Это означает, что мы будем следить именно за перемещением этой группы выделенных атомов, предполагая, что все остальные неподвижны.

Итак, у нас теперь будет "рабочая область" \mathcal{R} из реальных частиц, числом n не более нескольких десятков, такая, что мы будем учитывать только динамику этой

"рабочей области" реального пространства. В \mathcal{R} будут входить не только частицы материи - атомы и молекулы, но и фотоны и фононы окружения. Эта "рабочая область" будет зависеть от времени: она будет меняться. На каждом шаге в нее могут быть включены новые элементы реального мира: новые атомы, фотоны и фононы, первоначально находившиеся в окружащей среде, а какие-то элементы могут быть, наоборот, исключены и переведены в окружающую среду. Вообще, разница между "рабочей областью" и окружением состоит только в том, что рабочая область изменяется во времени, имея вид $\mathcal{R}(t)$.

Для того, чтобы отличить $\mathcal{R}(t)$ от рабочей области B(t) в гильбертовом пространстве состояний, мы будем называть $\mathcal{R}(t)$ кустом. Куст не обязательно состоит из близко лежащих частиц; перемещение фотонов может включать в него далекие друг от друга области реального пространства \mathbb{R}^n , которые окажутся, тем самым в запутанном квантовом состоянии.

Если, например, dim(B(0) = 20, куст первоначально состоял из 20 частиц, каждая из которых может перемещаться в 5 новых положений, то на первом шаге эволюции в популяции B(1) будет 2000 членов, а на втором шаге в B(2) 10000. После этого мы сможем реализовать отбор по одному из предложенных выше вариантов, отобрав в рабочую область B(3) не более 100 состояний, амплитуда которых будет меньше, чем у состояний в $|\Psi(0)\rangle$. Тогда на следующей итерации эволюционного процесса для сохранения размерности рабочей области нам необходимо будет сократить число возможных перемещений реальных частиц и число детей, вводимых в рабочую область. Таким образом, параметры отбора, описанного в предыдущем параграфе, будут зависеть от времени; эти параметры невозможно задать априори.

Далее мы будем предполагать, что гамильтониан H обладает тем свойством. что для любых базисных состояний $|i\rangle$ и $|j\rangle$, таких что $\langle i|H|j\rangle \neq 0$ переход вида $|i\rangle \rightarrow |j\rangle$ или обратный к нему индуцируется изменением состояния только одной реальной частицы, или, в крайнем случае, двух реальных частиц (например, туннелирование частицы из одной ямы в другую, или испускание фотона заряженной частицей). Тогда любой отбор рабочей области в гильбертовом пространстве состояний автоматически будет связан с выбором некоторого куста в класическом пространстве, а именно - набором тех физических частиц, перемещения которых вызывают переходы в рабочей области, индуцируемые гамильтонианом (или необратимыми операциями, заменяющими линдбладовский оператор, которые рассматриваются ниже).

Таким образом, изменение во времени рабочей области будет индуцировать изменение куста: включение в него новых частиц, важных дя динамики, или, наоборот, исключение из него тех частиц, роль которых в динамике стала не существенной.

7.7 Дальнейшие усовершенствования: усложнение популяции и практические рекомендации

Дальнейшее усовершентвование метода отбора заключается в том, чтобы ввести, кроме родителей и детей, еще два типа состояний в рабочей области - членов популяции: юных и пожилых членов. В юные мы можем зачислить тех детей, рейтинг которых превысил некоторый барьер P_0 , превосходящий граничный рейтинг детей, но меньший рейтинга родителей. Ограничение для юных заключается вв том, что они могут стать родителями только одного ребенка.

В пожилые мы будем зачислять таких членов популяции, которые не были родителями на протяжение некоторого времени T_m и рейтинг которых ниже некоторого порогового значения R_m . При достижении пожилым членом некоторого значения рейтинга $R_d < R_m$ он исключается из популяции. Таким образом, для получения статуса пожилого необходимо отслеживать историю данного члена популяции.

Итак, данное усложнение состоит в том, чтобы вместе с состоянием и его амплитудой в рабочей области сохранять также и историю данного состояния, то есть добавить к рейтингу еще и рейтинг на каком-то числе предыдущих шагов. В частности, эта история может включать как элементы рейтинга родителей данного состояния, так и элементы рейтинга его детей. Это делает рейтинги разных состояний взаимо-зависимыми.

Практические рекомендации состоят в том, что параметры отбора образуют сложную систему, и потому было бы неверным задать их с самого начала и запускать программу расчета рабочей области на компьютере или суперкомпьютере, ожидая результата, как это происходит, например, при реализации численных методов решения дифференциальных уравнений.

Целесообразно сначала сделать одну-две итерации метода отбора с выбранными его параметрами, для того, чтоб оценить правильность их выбора, и скорректировать их значения в случае возникновения проблем. Проблемы же здесь могут быть двух типов.

1. Превышение допустимого порога сложности вычисления на данном компьютере. Эта трудность возникает в результате неверного - слишко мягкого подбора рейтинга, ведущего к чрезмерному увеличению численности популяции.

2. Отсутствие ожидаемых результатов моделирования из-за слишком жестких условий назначения рейтинга.

Причиной появления этих двух проблем может быть также неверный подбор физических значений параметров гамильтониана или зерна разрешения пространства времени.

Обход этих препятствий может быть осуществлен в рамках идеологии обучения квантовых нейронных сетей, которые обсуждаются ниже.

7.8 Квантовые нейронные сети

Биологическая эвристика в вычислениях включает в себя модели, имитирующие работу мозга: нейронные сети.

Нейронная сеть - это ориентированный граф без циклов (циклом мы называем

путь вдоль ориентации графа, состоящий из хотя бы одного ребра, с совпадающей начальной и конечной вершинами), в узлах которого находятся искусственные нейроны, а ребра - аксоны - снабжены численными весами. В этом графе выделены некоторые вершины, называемые входными, и некоторые другие, называемые выходными. Каждый нейрон в любой момент времени имеет состояние 0 - неактивен, или 1 - активен. Фиксируется также алгоритм, который для любого момента времени t и любого нейрона a по набору значений $a, a_1, a_2, ..., a_k; w_1, w_2, ..., w_k$ состояний самого нейрона a и всех нейронов, аксоны которых входят в a и весов w_i всех таких нейронов в момент t выдает значение a в следующий момент времени. Пусть R(a) множество таких активных в момент t нейронов, аксоны которых входят в a.

Чаще всего этот алгоритм просто суммирует значения w_i для активных в момент t нейронов из R(a) и применяет некоторую функцию f к данной сумме, чтобы получить состояние a в момент t.

Этот алгоритм определяет эволюцию сети во времени. Начальное состояние сети получается, если подать на входные нейроны некую бинарную последовательность x, которая, тем самым, активирует какие-то начальные нейроны. При этот все остальные нейроны должны быть неактивными. Сеть заканчивает работу, если последовательные применения нашего алгоритма впервые активирует какой-либо конечный нейрон, и в этот момент состояния конечных нейронов дает результат работы данной сети.

Собственно работа сети заключается в определении значений нейронов при фиксированных весах аксонов. Но по результату работы сети ее можно перестроить, поменяв веса аксонов - это называется обучением сети.

Целью обучения нейронной сети является достижение экстремума какой-либо функции от ее состояний; эта функция наывается целевой для обучения.

Нейронная сеть не является универсальной моделью вычислений в силу того, что в ней нет циклов, так что работа сети однонаправленная. Однако в ней могут быть разные пути, согласованные с направлением ребер, и при это имеющие совпадающие начала и совпадающие концы; для квантовых нейронных сетей эта особенность принципиальна, так как она позволяет отобразить интерференцию амплитуд.

Нейронные сети были введены в математику в работе [44] в середине 20 века. Их применение было, в основном, сосредоточено на задаче распознавания образов ([45],[46]); а также и на других задачах, например, на определении свойств химических соединений ([47],[48]). Имитация интеллектуальной работы средствами программирования в виде нейронных сетей сейчас превратилась в большую область вычислительной науки, решаюшей самые разные вопросы оптимизации и распознавания.

Нас же будут интересовать нейронные сети, которые представляют эволюцию вектора состояния сложной системы с заданным гамильтонианом и рабочей областью, меняющейся с течением времени в соответствии с алгоритмом отбора. Такую нейронную сеть мы будем называть *квантовой нейронной сетью (КНС)*, пример которой приведен на рисунке 7.3.

В вершинах КНС расположены базисные состояния рассматриваемой системы, и комплексные амплитуды, которые им соответствуют. При этом разные нейроны содержат разные базисные состояния. Вершины делятся на слои, соответствущие выбранным моментам времени. Аксоны всегда идут от любого слоя к последующему. Переход от слоя к следующему происходит либо применением унитарного оператора эволюции, либо, в случае декогерентности, в виде замены донора акцептором (см. 8.10.1).

В случае унитарного перехода аксоны КНС помечены амплитудами перехода от начального состояния - нейрона $|j\rangle$ в конечное $|i\rangle$, так что такая амплитуда равняется $w_{ij} = \langle i | U_{dt} | j \rangle$, где $U_t = exp(-\frac{i}{\hbar}H \ dt)$. Последнее равенство можно заменить приближением с точностью $O(dt^2)$: $U_{dt} \approx 1 - \frac{i}{\hbar}H \ dt$, или более точным приближением экспоненты (разница только в том, какое время надо будет затратить на моделирование эволюции). При этом вычисление амплитуд состояний слоя k происходит по стандартному квантовому правилу² :

$$\lambda_i^k = \sum_j \lambda_j^{k-1} w_{ij}.$$

КНС - удобная графическая форма представления квантовой эволюции. Размер КНС ограничивается методом отбора. КНС дает возможность решить очень важные практические задачи: найти оптимальный метод отбора и уточнить вид гамильтониана эволюции, а также параметров декогеренции (см. 8.10.1). И то, и другое никогда не бывает нам известно в точности: здесь содержатся пробные парамеры, нахождение значений которых может дать *обучение КНС*.

Обучение КНС проходит по такой схеме. Мы задаем параметры гамильтониана и декогерентности, параметры отбора, начальное состояние и конечное состояние в какой-либо момент времени, и, рассчитав КНС по приведенному выше правилу, устанавливаем ошибку по сравнению с конечным состоянием (оно может быть взято из эксперимента). Если ошибка допустима, надо взять другое начальное состояние и сделать с ним то же самое. Если ошибка велика, надо поменять параметры КНС.

Целевой функцией для обучения КНС будет, таким образом, расстояние от результата работы сети до конечного состояния, которое получается из эксперимента. Такой выбор целевой функции дает нашим моделям наилучшее сходство с реальностью даже если мы и упустим какие-ибо детали конструкции настоящей системы, не включив их в модель.

Важное отличие КНС от обыкновенной модели многоатомной системы состоит в том, что КНС позволяет учитывать небольшие изменения параметров гамильтониана и факторов декогеренности в течение времени и в зависимости от конкретных атомов, находящихся в разной локальной среде. Например, при сближении атомов перед их ассоциацией в молекулу их электронные орбитали и энергии перехода сильно деформирутся. В модели с фиксированным гамильтонианом этого эффекта учесть нельзя. Между тем, данный эффект может сущестенно полиять на предсказательную силу моделей. В процессе обучения КНС подобные деформации

²В случае декогерентного перехода от слоя k-1 к слою k аксоны никак не помечены, все нейроны, кроме донора и акцептора, при данном переходе не меняют амплитуды, донор не имеет выходных аксонов, а акцептор получает в слое k амплитуду, равную амплитуде акцептора при эволюции, описанной в 8.10.1 (α).

параметров для моделей мгновенных взаимодействий (гамильтониана плюс факторов декогерентности, включая отбор) можно найти с большой точностью.

Эта грубая схема обучения КНС может быть уточнена; например, можно потребовать, чтобы гамильтониан был взят из модели ТСН или химической модели, построенной на основе ТСН (см. следующую главу). Обучение КНС сразу по всем параметрам эволюции и отбора "вслепую" - нецелесообразно: это привело бы к лобовому пути решения переборной задачи. Лучше выделить ровно один параметр, по которому ведется обучение, и итерировать этот процесс, выбирая на следующем этапе другой параметр; однопараметрическая задача обучения решается гораздо эффективнее.

Например, при обучении на основе гамильтониана JC, целью которого является определение параметров гамильтониана H_{JC} , надо эмпирически найти энергию фотона полости, а затем искать единственный неизвестный параметр - энергию взаимодействия поля и атома с помощью однопараметрического обучения КНС для этой модели.

Нахождение физических значений параметров гамильтонианов - важнейшая задача, о успеха в решении которой зависит весь проект КК. Эти значения позволяют перейти от качественных предсказаний квантовых эффектов, которые могут оказаться и нереалистическими (как, например, показанный выше термический аттрактор), к реальности. Решить задачу точного определения параметров гамильтонианов можно, применяя обучение квантовых нейронных сетей. Ограниченность сложности квантовых состояний несколькими десятками логических кубитов дает возможность решить эту проблему на существующих вычислительных системах. Поэтому проблема обучения КНС является важнейшим вопросом в проекте квантового компьютера.

Принципиальное отличие КНС от обыкновенных нейронных сетей заключается в том, что правило эволюции сети основано на физических моделях микромира, подтвержденных в тысячах эспериментах. Начальные значения параметров сети согласованы друг с другом соотношениями, вытекающими из этих моделей, а не берутся "с потолка". Ликвидация ненужных нейронов (прореживание сети) и включение в сеть нужных происходит по совершенно определенному строгому критерию - поведению модуля комплексной амплитуды базисных состояний, то есть по методу отбора рабочей области. Выборка начальных и конечных состояний, используемая для обучения КНС, основана на физических экспериментах, проводимых не в сфере IT, а на реальных приборах или химических реактивах. Это придает КНС особый статус среди огромного числа нейронных сетей разных назначений.

Одновременно сама идеология нейронных сетей, применная к задачам квантового компьютера, обещает серьезное продвижение и новые важные результаты.

Квантовые нейронные сети не являются концептуально самостоятельным объектом; они есть лишь форма развития компьютерных моделей сложных систем на квантовом уровне. Эта форма удобна тем, что она объединяет физико-химическую часть (гамильтонианы, начальное и конечное состояния) с биологической эвристикой отбора, позволяя одновременно использовать уже накопленный опыт обучения нейронных сетей.

Отметим важную особенность КНС: каждый нейрон в ней содержит информа-

цию обо всей моделируемой системе. Число аксонов, исходящих из одного нейрона, может быть очень большим, по порядку величины равным числу элементарных единиц - атомов и фотонных состояний - в рассматриваемой системе, умноженной на число возможностей перехода для каждой единицы. В биологических нейросетях все обстоит так же: у нейрона может быть очень много аксонов. Эта особенность КНС дает возможность естественного представления запутанных состояний и выявлении их роли в динамических сложных сценариях.

Еще одним свойтвом КНС является ее своеобразная обратимость: процесс работы в некотором смысле обратен процессу обучения. Если работа КНС является моделированием квантовой эволюции, то обучение как бы обращает время: мы движемся от конечного состояния к начальному. В условиях унитарной динамики обратимость достигается изменением знака перед гамильтонианом (или перед *i*); для неунитарной динамики (см. 8.10.1) также есть некоторый аналог обратимости. Обратимость отбора также возможна, но нахождение конкретной формы такой обратимости представляет интересную и нетривиальную задачу, в особенности, для биологических систем.

7.9 Метод отбора и пост-квантовая теория

Ограниченность стандартной копенгагенской квантовой теории небольшим числом кубитов оставляет нам единственный путь к построению пост-квантовой теории сложных систем: метод отбора.

Биологическая эвристика, лежащая в основе отбора, дает ясное понимание того, к каким объектам должна прежде всего применяться пост-квантовая механика - это живые объекты. Такие формально сложные системы, как, например, атомные ядра, интересуют нас только в связи с их влиянием на живое; это влияние еще предстоит определить.

Но огромное значение отбора рабочей области в том что он определяет постквантовую эволюцию в полном согласии со старой, традиционной квантовой теорией, великолепно показавшей себя в области простых систем и процессов.

Отбор подчиняется главному критерию - абсолютной величине амплитуды, и делает скорость ее роста главным механизмом изменения рабочей области во всей ойкумене возможных состояний системы. Квантовый механизм эволюции очень сложных объектов, включающих живые организмы и биополе, оказывается явным и может быть изучен так же, как в классической механике изучаются неживые объекты.

Однако, несмотря на то, что квантовая сложность состояний принципиально ограничена, метод отбора сильно отличается от методов классической механики. Рабочая область гильбертова пространства квантовых состояний, размерность которой ограничена несколькими тысячами, меняется, двигаясь по ойкумене всех возможных классических состояний системы. Параллельно с ней по обычному пространству R^n перемещается куст - избранный малый ансамбль реальных частиц, которые мы наделяем функцией представления всей динамики системы. Сам отбор элементов рабочей области определяет и отбор реальных частиц в кусте. Этот отбор подчиняется биологической эвристике, и его параметры находятся обучением квантовой нейронной сети, которая фактически повторяет саму эволюцию нашей модели.

192 Глава 7. ПРАВИЛО ОТБОРА: ПУТЬ В ПОСТ-КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

Все эти особенности предполагают большую степень индивидуальности модели; например, найденные для одной системы параметры квантовой нейронной сети могут не подойти к другой. В любом случае описанный довольно грубо метод отбора - это, по-видимому, лучший рецепт построения компьютерной модели сложной в нашем смысле системы.



Рис. 7.3: Пример КНС. Первоначальное состояние вида $|\Psi(0)\rangle = \lambda_1 |j_1\rangle + \lambda_2 |j_2\rangle + \lambda_3 |j_3\rangle + \lambda_4 |j_4\rangle$ переходит в конечное состояние, в котором амплитуда сосредоточена на базисных векторах $|j_6\rangle, |j_7\rangle, |j_9\rangle$. Эти последние состояния проходят последовательно стадии детства, и затем - родительства. Состояния $|j_1\rangle, |j_2\rangle, |j_3\rangle, |j_4\rangle$ проходят последовательно стадии родительства, старости, а затем и - потенциального детства - в терминах популяционного отбора, а состояние $|j_5\rangle$ - стадии детства, родительства и старости, с последующим выбыванием из популяции.

Глава 8

Квантовые мета-модели

Если факты противоречат теории - тем хуже для фактов! Ибо их очень много, а теория - одна.

8.1 О мета-моделях реального мира

Математика не может применяться непосредственно к реальному миру; для ее применения необходима абстрактная схема реальности, которая называется моделью. Примерами могут служить конечномерные модели квантовой электродинамики, которые мы уже изучили. Модель содержит указания на то, как абстрактные математические объекты, такие как базисные состояния, связаны с реальным миром.

Применение любых численных или абстрактно-математических приемов законно только в определенной модели. Рассмотрим известный пример с движением болванки по гладкой поверхности с релятивистской скоростью. В поверхности имеется отверстие, по длине в точности равное длине болванки, так что если ее разместить над ним, болванка провалится вниз (см. рисунок 8.1). Но если она движется с релятивистской скоростью, возникнет противоречие. С одной стороны, ее длина обязана сократиться, так что она наверняка должна провалиться вниз, пролетая над отверстием. С другой стороны, сократиться должно само отверстие, согласно релятивистскому сокращению длин движущихся объектов, так что она провалиться не может!



Рис. 8.1: Воображаемый эксперимент с релятивистской болванкой.

Противоречие возникает из-за некорректного использования факта релятивистского сокращения длин. Этот факт справедлив лишь в фиксированной модели, где точно определены координаты в пространстве-времени. Но болванка - протяженной длины. И если мы говорим о ее проваливании, в дело вступает второе - вертикальное измерение. Когда верхний конец болванки достигнет края отверстия, необходимо будет рассмотреть его (возможное!) движение вниз. Но что происходит с задним концом болванки? От локальной системы, связанной с передним концом, мы должны перейти в другую локальную систему, связанную с задним концом. Эти две системы отсчета принципиально различны, ибо если в первой возможно движение вниз, то во второй такое движение - падение исключено: задний конец еще лежит на плоскости. Поэтому и пространство - время в этих двух системах различно, и мы не можем делать автоматического вывода о том, как поведет себя болванка на основании преобразования Лоренца - это преобразование справедливо только в одной системе, но не в обеих сразу!

Рассмотрим еще один пример из квантовой области. Широко используемая модель одномерной квантовой частицы, которая может перемещаться только вдоль некоторой прямой линии в пространстве; эту модель мы уже не раз фактически использовали. На первый взгляд, здесь есть некорректность, связанная с видимым игнорированием соотношения неопределенностей "координата - импульс". Действительно, наша прямая расположена в трехмерном пространстве, так что если мы локализовали частицу на ней, возникает полная неопределенность в ее импульсе, направленном в плоскости, ортогональной данной прямой. И это означает, что в сколь угодно малый момент времени наша частица может оказаться где угодно вне этой прямой в пространстве!

Дело в том, что, согласно конструктивизму Маркова - младшего, все функции обязаны быть непрерывными, и локализация частицы на прямой означает всего лишь то, что мы создали очень крутые потенциальные стенки вне этой кривой. Крутые, то не бесконечно крутые. Соотношение неопределенностей "координата - импульс" справедливо лишь там, где действует уравнение Шредингера, то есть там, где мы можем задать единое зерно разрешения пространства dx, а затем, устремляя это зерно к нулю, получить само уравнение. Но для области с очень крутыми стенками зерно dx не может быть такой же величины, как на наше прямой, где мы локализовали частицу в начальный момент времени, оно должно быть гораздо меньше, иначе мы не сможем написать никакого уравнения! В момент перехода от прямой к движению в пространстве мы должны перейти от одной модели к совершенно другой, хотя и сходной. Если же выбрать dx одинаковым (что мы и далаем фактически, работая с одномерной моделью), получится, что для "прыжка" в перпендикулярной плоскости наша частица должны обладать неограниченно большой начальной скоростью, что невозможно из-за ограничения релятивизма. А фактически, невозможность слишком больших величин вытекает опять таки из конструктивизма.

Мы видим, что одной моделью невозможно охватить даже такие, на первый взгляд, простые примеры. Тем более это справедливо для сложных систем, изучение которых и составляет цель проекта квантового компьютера. Нам необходимы разные модели, однозначно склееные между собой в единую мета-модель. В рамках такой мета-модели можно создавать алгоритмы моделирования сложных процессов, визуализация работы которых и будет результатом. Правдивый видеофильм - вот окончательный результат, к которому надлежит стремиться.

Итак, применение абстрактных математических методов, равно как и численных методов для решения уравнений, возможно лишь в рамках отдельной модели. Метамодель же охватывается только алгоритмом, включающим в себя все результаты для отдельных моделей.

Соотношение неопределенностей "сложность - точность" говорит о том, что внутри одной мета-модели точность представления квантовых состояний может различаться на более чем десять кубитов; предположительно, на 7-9 десятичных знаков, что соответствует около 30 кубитам. При этом в отдельной модели точность должна быть фиксирована, иначе мы не сможем корректно применять математические методы, например, КОУ, или даже линейную алгебру.

Конечные приложения могут иметь только мета-модели, так как они дают визуализируемый результат, непосредственно сравнимый с опытом. Фактически, это имело место всегда, просто в тех случаях, когда физический эксперимент был возможен для отдельных атомов или молекул, или для среды, сложность которой могла быть радикально редуцирована каноническим преобразованием, сама мета-модель фактически состояла лишь из одного звена - исходной модели. В сложных системах это не так. Например, по отношению к живой клетке физический эксперимент, как правило, невозможен: живое невозможно зафиксировать в строго определенном положении. Поэтому для сложных систем отдельные конкретные модели надо сшивать воедино, получая мета-модель.

Конкретная модель имеет ценность только постольку, поскольку она может быть встроена в мета-модель. Бесполезно наращивать точность определения спектральных линий атома, если эта точность не играет роли в процессе их ассоциации. Точность определения силы связи звеньев полимера важна лишь постольку, поскольку она влияет на распад полимера в ходе рассматриваемого процесса, например, при нагревании.

Не существует универсальной мета-модели. Мы должны понять ограниченность наших знаний о мире и не стремиться объять необъятное. Поэтому любая наша модель с необходимостью будет обладать ограниченной точностью - в физическом смысле этого термина, когда имеется в виду точность определения координат всех атомов, состояния всех электронов и т.п. Причем чем сложнее рассматриваемая система, тем менее физически-точным может быть ее описание. Однако для сложных систем точность будет иметь уже иной смысл, отличный от физического. Здесь важен факт, например, произошедшей ассоциации атомов в молекулу, или диссоциации молекулы на атомы. В огромном разнообразии каналов (исходов) химической реакции практическую ценность представляют только 2 канала: благоприятный для некоторой основной гипотезы, и неблагоприятный для нее.

Поэтому, говоря о химии, мы будем всегда иметь в виду искусственные атомы, не упоминая об этом всякий раз. Искусственный атом - математическая абстракция, в которой игнорируются конкретные виды электронных оболочек, влияние заполненности этих оболочек на их вид, влияние ядерных спинов на электронные и т.п. эффекты - до тех пор, пока это игнорирование не приведет к сильному расхождению наших моделей с экспериментом. Такая абстракция необходима для продвижения от химии в область биологии. Если бы мы занялись точным анализом вида электронных состояний, движения атомных ядер при реакциях, силой связей - ковалентных и водородных, влиянием ядерных спинов и тому подобными реальными эффектами, мы бы перегрузили память компьютера массой вещей, львиная доля которых не играет никакой роли в выборе господствующего канала реакции и лишились возможности построить быстро работающую часть мета-модели. Более того, в живых системах сложность реального химического хаоса, всязанного с упомянутыми эффектами, уже сильно редуцирована тем, что все реагенты довольно точно зафиксированы самим видом главной молекулы - ДНК, а также ее производных - РНК и белков, так что каналы возможных реакций определены очень точно. Выбор между этими каналами есть, говоря кратко, как раз тот процесс, который называется принятием решения живым существом и конечной целью биологической мета-модели является воспроизводство этого решения на компьютере.

8.2 Ограниченность математического моделирования

Принципиальное ограничение на возможности математического моделирования реальности накладывает проблема окружения. КОУ предполагает окружение марковским, то есть не имеющим долговременной памяти. Это справедливо лишь для простых процессов и ни коим образом не применимо к живому.

Поведение живого существа критически зависит от процессов в его окружении, которые по своей сложности превосходят функциональность этого существа. Например, человеческая личность формируется при взаимодействии ее с более взрослыми, в процессе воспитания; это характерно и для других млекопитающих.

Для отдельной бактерии ее собственное существование неразрывно связано с популяцией подобных ей бактерий. Сам процесс бактериального размножения требует постоянного обмена генетическим материалом между членами сообщества таких же бактерий, которое происходит в виде продуцирования плазмид - участков ДНК, которые затем встраиваются в ДНК других бактерий. При половом размножении этот процесс взаимного обмена генетическим материалом приобретает более регулярную форму: он осуществляется в виде кроссинговера одиночных цепочек материнской и отцовской ДНК при мейозе половых клеток организма.

Попытка предсказательного моделирования поведения живого сразу приводит нас к необходимости моделировать всю популяцию, что, в свою очередь, требует уже моделирование окружения этой популяции, включающее как природные уловия, так и популяции других существ. Задача становится необозримой. В этом состоит принципиальное отличие от случая простых систем, где мы можем применить КОУ. Неслучайно естествознание не рассматривает отдельные объекты, а только лишь типичные образцы этих объектов, в которых сконцентрированы наиболее фундаментальные свойства таких объектов.

Биология не занимается судьбой конкретной особи, ее предмет - целый вид. Физика не занимается конкретной частицей и ее траекторией, ее предмет - типичное поведение частицы. Сам вектор квантового состояния характеризует не отдельный электрон в отдельном атоме водорода, а огромное число таких электронов в разных атомах водорода, поставенных в одинаковые условия. Мы не можем знать точный момент времени распада свободного нейтрона на протон и электрон, мы знаем только среднее время, через которое этот распад наступает - примерно 15 минут.

Но на помощь приходит во-первых, квантовое представление микрообъекта как типичного - в виде вектора его состояния. А во-вторых, интересные эксперименты, говорящие о том, что даже в огромной системе а-приори однотипных объектов имеется, тем не менее, отдельные исключительные представители, которые, в сильном смысле слова задают поведение всей группы.

Эксперимент заключается в том, что стая рыбок в аквариуме ведут себя синхронным образом - движутся то в одну, то в другую сторону все вместе, повинуясь невидимому дирижеру. Аквариум разделяется перегородной на две половины, так что стая оказывается разделенной примерно пополам. И в одной из этих половинок движение происходит точно так же, как и в первоначальной стае - синхронно, тогда как в другой половине картина совершенно иная: рыбки движется хаотично, в разные стороны. Деля "синхронную" половинку опять на две части и снова выбирая ту, где поведение синхронно, и повторяя этот процесс далее, в конце мы находим "дирижера" - рыбку, поведение которой копировали все члены стаи.

И наконец, в сложных системах невозможно и бессмысленно применять то определение точности, что принято в физике простых систем: точные значения координат или чего-то похожего. Неточность определения состояний рассматриваемой системы ни в коем случае не является признаком плохого качества модели. Здесь важно качественное предсказание ее поведения. Стремление достичь точного совпадения с частичными экспериментами является ложным путем, только мешающим созданию настоящей модели.

На пути от физики атомных ансамблей, элементами которой мы до сих пор занимались, к живой природе лежит огромная область, называемая *химией*. Она состоит из огромного числа фактов о соединениях атомов в молекулы и о свойствах этих молекул; фактов, накопленных, преимущественно, эмпирическим путем. Динамика химических реакций зависит от того, под каким углом сближаются реагенты, каковы их внутренние состояния перед ассоциацией, каковы свойства их окружения и т.п. Если бы мы начали анализировать все это безбрежное море разных случаев, мы просто потеряли бы время и ничего не получили бы в результате. Такой "лобовой" подход к химии ложен.

Химию вообще невозможно сделать строгой наукой, бесполезно и пытаться. Но это обстоятельство никак не мешает нам пройти через эту безграничную область для проникновения в биологию: нам нужен только тот химизм, который работает в живом. А здесь все гораздо удобнее устроено. Все углы сближения реагентов очень жестко определены структурой белков, равно как и начальные состояния атомов и молекул; мы всегда можем, для уточнения нашей модели, взять нужные параметры из справочника, не пытаясь проследить всю историю таких состояний, которая может насчитывать миллиарды лет и охватывать космические масштабы.

Поэтому, изучая химические процессы с точки зрения квантовой теории, мы будем использовать понятие *искусственного атома* и *искусственной молекулы*, не оговаривая это всякий раз специально. Такие абстрактные объекты мы будем снабжать только теми атрибутами, которые совершенно необходимы для наших целей, игнорируя все колоссальное природное разнообразие и богатство их реальных прототипов - настоящих атомов и молекул. Наша цель - изучение квантового механизма *коллективного поведения* атомов в живом веществе с учетом *биополя* - электромагнитного поля, играющего принципиальную роль в живом. Все наши упрощающие предположения будут спосоствовать только достиженю этой главной цели.

Мета-модели должны охватывать весь процесс в целом, не ограничиваясь рамками одной научной дисциплины. Биология, также как и химия, интересна нам тем, что мы сами принадлежим к миру живого. Политика (и социология), лишь формально охватывая социум, в действительности есть производная биологии. Цели биологической эволюции неотделимы от эволюции социума. Эволюционная теория тесно связана с политическими задачами и не может быть нейтральной по отношению к политическим целям. Хороший пример дает дарвинизм, сам дух которого соответствовал задаче сохранения господства англо-саксонской цивилизации в 19-20 веках.

Мы не ставим цельлю углубление в гуманитарную область, будем, однако, иметь в виду и эту сторону мета-моделей, в дальнейшем проводя параллели с этой областью.

Итак, данная глава посвящена моделям химических реакций ассоциации и диссоциации искусственных атомов.

8.3 Химический квантовый компьютер

Здесь мы рассмотрим химическую модификацию конечномерных моделей КЭД, включающую пространственное перемещение зарядов. Эту группу моделей можно условно назвать конечномерной химией, однако она не охватывает всех химических реакций. Ограниченность размерности пространства квантовых состояний означает направленность химических моделей на особых класс реакций, в которых как начальные состояния, так и условия внешней среды определены очень четко, и такие модели нельзя назвать компьютерным симулятором химии в целом.

Конечномерные квантовые модели химии предназначены для изучения только тех реакций, которые протекают или могут протекать в живой, где однозначность условий реакций гарантирована строгой иерархией в живой материи, связанной с действием ДНК. Например, угол, под которым сближаются реагенты, что определяет ход их ассоциации, в неживой природе может быть каким угодно, но в живой клетке он жестко определен структурой биополимеров, и потому его можно считать фиксированным. Сами биополимеры - белки и нуклеиновые кислоты - также имет вполне определенные пространственные конфигурации и энергетические спектры. Внутриклеточная среда - цитоплазма - также не является хаотическим ансамблем молекул воды, а структурирована вполне определенным образом, в частности, через присутствующие в ней белки и т.п.

Все это делает химию живого пригодной для конечномерного представления, когда мы говорим о ее квантовых моделях. Полет свободной частицы с его особенностями, рассмотренными в первой главе, не будет играть в конечномерной химии особой роли, так как его особенности вряд ли будут важны в живой клетке, где нет условия для такого полета. Напротив, туннелирование заряда (электрона или протона) между двумя потенциальными ямами будет играть большую роль, так как это определяет ковалентные и водородные связи между атомами в молекулах.

Далее под химическими реакциями мы будем понимать только такие превращения атомных ансамблей и поля, представление которых можно разместить в пространстве ограниченной размерности, не оговаривая этого специально.

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 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 $nm \approx 10^{-6}$ см. С какой скоростью он может работать? Число операций не превосходит числа n проходов света, скорость которого $c \approx 3 \cdot 10^{10}$ 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 $dE \cdot dt = \hbar \approx 10^{-27}$ 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, что мы уже видели. Путь в ядерную физику лежит через создание конкретной модели нейтрона как композитной системы, содержащей протон и электрон, что требует введения принципиально новых виртуальных процессов. Мы не будем здесь обсуждать эту тему, и вернемся к электродинамике, а именно - к ее важнейшей сфере применения - химии.

Физическая часть моделирующего компьютера зависит от величины константы Q, определящей границы применения квантового формализма, являющегося основным источником сложности моделирования. Если эта константа не превосходит 20, с зада-

чей моделирования конечномерной химии справится классический суперкомпьютер. В этом случае основная задача будет состоять в непосредстенном выборе параметров модели, в чем может помочь многопараметрическая оптимизация, например, с помощью компьютерных нейронных сетей или эволюционного программирования. Единственный эффект, который невозможно отобразить на классической прибористике - квантовая нелокальность. Однако этот удивительный эффект вряд ли будет играть роль для моделирования локальных процессов, например, в отдельной живой клетке.

Если константа Q будет существенно превосходить 20, можно ожидать выгоды от использования отдельных элементов с квантовой логикой, например, квантовых точек или оптических полостей, которые можно совместить с классическим суперкомпьютером как периферийные устройства.

В любом случае, построение локальных сценариев возможно на классических вычислительных устройствах. Вопрос: будут ли такие сценарии интересными? Не окажется ли адекватная модель реальности в принципе нелокальной? У меня нет ответа на этот вопрос. Пока у нас нет свидетельств того, что простые нелокальные устройства - источники бифотонов - не исчерпывают всю существенную для моделирования квантового дальнодействия. И существующего приборного парка вполне хватит для наших целей, даже если речь идет о таком экстремально сложном объекте, как человеческое общество.

Мы будем теперь говорить о физических приборах, нужных для моделирования, только в смысле использования компьютерных моделей этих устройств, которыми мы до сих пор занимались. Их работа будет отождествляться с компьютерными программами, рассчитывающими динамику конечномерных моделей химии, и не предполагающих никаких дополнительных устройств, присоединяемых к классическому компьютеру. Таким образом, пока константа Q не точно определена, квантовая прослойка, изображенная на рисунке 1.1, будет фактически виртуальной частью, означающей просто особые модели, работающие в классическом суперкомпьютере. В случае распределенной системы возможно включение в нее источников бифотонов. Выделение этой прослойки в особую часть будет пока иметь только тот смысл, что здесь будет применяться алгоритмическое программирование, ограничивающее действие стандартных аналитических методов. Выделение для такой прослойки специального места указывает на важность именно этой прослойки, вне зависимости от сложности ее физической организации; эта сложность может быть нулевой.

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, [49]), 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 8.2.

Состояния реального набора атомов и электромагнитного поля представляется в этой схеме так: атомы представляются квантовыми точками - искусственными "атомами", связанными друг с другом оптоволокном и проводниками зарядов. От точки



Конечномерная химия

Рис. 8.2: Химический квантовый компьютер

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 $a_i^+a_i + a_ia_i^+$.

Гамильтониан, управляющий динамикой состояния атомов и поля в таком компьютере, выписывается так же, как и для конечномерной модели КЭД Тависа-Каммингса (см. [80],[81]). 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 имеющихся в данных точках электронов - согласно принципу запрета Паули. В такой модели отражается специфика квантовой динамики зарядов и поля, что невозможно сделать в реальном времени на классическом суперкомпьютере: запутанность и нелокальность; мы не будем ставить целью именно реальное время моделирования. Нам здесь важно получить реалистичную картину динамики в обозримое время.

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 огромных 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, сответствующие 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.

8.4 Модификация с движением атомов. Черные состояния

Химические 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 различимыми 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

$$|n_1, n_2, ..., n_k\rangle_{ph} |at_1 state, at_1 position\rangle |at_2 state, at_2 position\rangle ... |at_n state, at_n position\rangle,$$
(8.1)

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

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

$$H_{at \ jump} = \sum_{i,1 \le j < q \le k} r^i_{jq} S(i)^+_j S(i)_q + \bar{r}^i_{jq} S(i)^+_q S(i)_j,$$
(8.2)

где $S(i)_j, S(i)_j^+$ - операторы уничтожения и рождения атома *i* в полости *j*, которые действует 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 оптоволокном 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

$$|C_2\rangle = |s_1\rangle - |s_2\rangle,\tag{8.3}$$

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 (8.1)). 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 двухатомной 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

$$|C(\mathcal{K})\rangle = |C_2^1\rangle \otimes |C_2^2\rangle \otimes \dots \otimes |C_2^k\rangle, \tag{8.4}$$

где верхние индексы соответствуют парам из разбиения К, 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 (8.4) 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 3.18, которая также будет открытым вопросом.

8.4.1 Черные состояния пары атомов в пространстве

Рассмотрим другой вариант черных состояний, когда пара атомов находится в трехмерном пространстве. Мы предполагаем, что каждый из атомов может занимать один из узлов целочисленной прямоугольной решетки, так что координаты любого из этой пары томов имеют вид $x = n_x \epsilon$, $y = n_y \epsilon$, $z = n_z \epsilon$, где n_x, n_y, n_z - целые числа, $\epsilon > 0$ - шаг решетки.

Гаильтониан данной модели выражает перемещение каждого из атомов вдоль одного из ребер пространственной решетки на расстояние ϵ в любую сторону: положительную или отрицательную. (Напишите этот гамильтониан в явном виде).

Мы будем обозначать положение атома 1 в узле решетки *i* через 1_{*i*}; аналогично и для второго атома. Будем искать черное состояние пары наших атомов в виде

$$|B\rangle = c \sum_{(i,j)\in J} \pm |1_i 2_j\rangle,\tag{8.5}$$

где в множество пар J входят только такие пары (i, j) узлов решетки, расстояние между которыми превышает ϵ .

Физический смысл такого состояния связан с возможностью образования молекулы из этой пары атомов. Предположим, что молекула образуется как только атомы сблизятся на минималное расстояние ϵ . Если два атома находятся в черном состоянии $|B\rangle$, то они не смогут образовать молекулы, так как они не смогут приблизиться на минимальное расстояние. Даже если состояние $|B\rangle$ будет приближенно черным, то образование молекулы из пары, находящейся в этом состоянии, будет сильно затруднено и потребует значительно большего времени, чем если бы пара атомов находилась в каком-либо другом состоянии. Черное (или приближенно черное) состояние можно рассматривать, таким образом, как тормозящее для химической реакции ассоциации.

8.5 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. Здесь проявляется различие между электроном и атомом. Атомы мы, в принципе, можем как-то пометить, чтобы отличить один от другого, например, внеся в ядро дополнительный нейтрон - во многих случаях это снова даст стабильный атом, но с другой массой ядра, так называемый изотоп. Для электрона такой возможности нет - он элементарен. Различать электроны мы можем только по тому, в каком они находятся состоянии: пространственном или спиновом. Электроны мы будем считать неразличимыми в том смысле, что различаться у них могут только их внешние характеристики: координата или спин. В принципе, атомы также могут быть неразличимыми - все зависит



Рис. 8.3: Приближенно черное состояние пары атомов 1 и 2 - слева для двумерной плоскости, справа для трехмерного пространства. Пунктирные линии показывают пространственные положения пары атомов 1 и 2; знак в выражении (8.5) выбирается: для синего цвета положительный, для красного - отрицательный. Перемещение одного из атомов вдоль любого ребра блокируется аналогичным перемещением, но с обратным знаком того же атома, входящего в другое слагаемое выражения (8.5), для такого же положения второго атома. Квадратами из левого рисунка можно замостить всю плоскость; двумя соседними кубическими блоками из правого рисунка можно замостить все пространство, так что блокировка движений атомов будет полной, однако при этом мы не сможем выбрать нормировочную константу *с* в выражении (8.5). Если ограничиться конечной областью пространства, состояние $|B\rangle$ будет почти черным.

от инструмента, которым мы их можем различить. Если этот инструмент - эмитированный атомами фотон, для того чтобы их надежно различить, его длина волны должна быть сравнимой с расстоянием между атомами. Если длина волны гораздо больше этого расстояния, мы не сможем сказать, какой из атомов испустил данный фотон, если оба пришли в основное состояние. Для простоты мы будем считать, что элементарные частицы одного типа неразличимы, а неэлементарные, даже одного типа - различимы.

Общий принцип, сформулированный Паули для электронов, утверждает, что в одном состоянии (с учетом спина) не может находиться более одного эллектрона. Позднее этот принцип был обобщен на класс частиц, называемых фермионами.

Общий рецепт построения вектора состояния системы n фермионов, которые занимают n различных взаимно ортогональных состояний $|\phi_j\rangle$, j = 0, 1, 2, ..., n - 1 состоит в том, что их состояние определяется как

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} det(\phi_i(r_j)), \ i, j = 0, 1, 2, ..., n-1$$
(8.6)

- детерминант матрицы значений волновых функций в точках r_j нахождения каждого электрона. Множитель перед детерминантом взят для нормировки: все члены разложения определителя взаимно ортогональны (проверьте!). Если всевозможных состояний $|\phi_i\rangle$ больше числа фермионов, надо выбрать какие-то n из них, составить этот определитель для каждого из такой выборки, а затем сложить с разными амплитудами все такие определители - это и будет общий вид состояния n фермионов. Принцип Паули будет выполнен для такого определителя, так как в любом члене суперпозиции разные фермионы будут находиться в разных состояниях.

Как будет выглядеть такой детерминант в кубитовом представлении с учетом принципа Паули- покажем это на примерах. Пусть сначала у нас есть только два уровня энергии у атома и два электрона с одинаковыми спинами в нем. Тогда определитель будет иметь вид

$$det \begin{pmatrix} \phi_0(r_0) & \phi_0(r_1) \\ \phi_1(r_0) & \phi_1(r_1) \end{pmatrix}.$$
(8.7)

Предположим, что координаты r_0 и r_1 есть положения $|0\rangle$ и $|1\rangle$ электрона в двухямном потенциале, показанном на рисунке 2.6. Тогда мы имеем $|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, $\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Состояние (8.7) с учетом последовательности кубитов примет вид: $\frac{1}{2\sqrt{2}}[(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) - (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle)] = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle = |01\rangle)$, то есть вид синглета. Мы видим, что принцип Паули оказывается справедливым не только для состояний энергии $|\phi_0\rangle$, $|\phi_1\rangle$ электрона, но и для его обычных координат $|0\rangle$, $|1\rangle$.

Эта модель эквивалентна спиновой: когда у электронов есть только один орбитальный уровень, но есть спиновое состояние: $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, которые мы можем отождествить с $|0\rangle$ и $|1\rangle$; спиновое состояние, полученное из 8.7, будет выглядеть точно так же. Мы можем считать, что спины эволюционируют под действием спинового гамильтониана σ_z ; тогда выписанные состояния будут собственными для спиновой энергии.

Рассмотрим более сложный пример: четыре электрона со спинами в двухуровневом атоме, каждый уровень которого разделен на подуровни, соответствующие



Рис. 8.4: Переходы между уровнями двухуровневого атома со спиновым расщеплением

значению электронного спина. Здесь запись детерминантного состояния (8.6) можно представить так:

	1	2	3	4	
$\begin{array}{c} 0 \uparrow \\ 1 \uparrow \\ 0 \downarrow \\ 1 \downarrow \end{array}$	$\begin{array}{c} 0\uparrow\rangle\\ 1\uparrow\rangle\\ 0\downarrow\rangle\\ 1\downarrow\rangle\end{array}$	$\begin{array}{c} 0\uparrow\rangle\\ 1\uparrow\rangle\\ 0\downarrow\rangle\\ 1\downarrow\rangle \end{array}$	$\begin{array}{c} 0\uparrow\rangle\\ 1\uparrow\rangle\\ 0\downarrow\rangle\\ 1\downarrow\rangle\end{array}$	$\begin{array}{c} 0\uparrow\rangle\\ 1\uparrow\rangle\\ 0\downarrow\rangle\\ 1\downarrow\rangle \end{array}$	(8.8)

где заголовки строк - это состояния, а заголовки столбцов - индивидуальные метки электронов, которые есть просто их места в тензорном произведении.

Детерминант матрицы (8.8) есть не что иное как мультисинглетное состояние 4 частиц, распределенных по 4 базисным состояниям (ср. (3.29)). Этот мультисинглет будет темным для графа переходов между состояниями, соответствующего двухуровневому атому со спиновым расщеплением каждого уровня - см. рисунок 8.4.

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 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 элетрона. 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

$$|atom\rangle = |level_1, level_2\rangle \tag{8.9}$$

где $|level_{1(2)}\rangle$ есть список $|e_1...e_k\rangle$, 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 $e_1, ..., e_k$ 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 (8.9), 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.

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, ..., N - всевозможные состояния отдельного электрона из некоторого, заранее выбранного, множества \mathcal{E} , $j \in \{1, 2, ..., N\}$, а общее состояние такого ансамбля задать в виде линейной комбинации состояний вида $|\Psi\rangle_{\mathcal{E}}$ по разным \mathcal{E} .

Если мы всегда по умолчанию будем предполагать, что начальное состояние электронов антисимметризовано, мы сможем приписать каждому электрону индивидуальность, причем эта индивидуальность будет сохраняться на протяжении всей эволюции благодаря принципу запрета Паули. Индивидуальность электрона - это его состояние: на какой орбите (или с какой координатой) и с каким спином он находится. Мы всегда сможем точно знать, какой именно электрон поменял свое состояние в результате перехода между базисными состояниями, индуцированным гамильтонианом.

8.6 Выводы

Резюмируя вышесказанное, мы сформулируем основное предположение о электронах: вектор состояния электронов должен быть антисимметризован с самого начала. Это значит, что он в начальный момент времени должен обладать свойством:

$$|\Psi_{el}(x_1, x_2, ..., x_n)\rangle = (-1)^{\sigma(\pi)} |\Psi_{el}(x_{\pi(1)}, x_{\pi(2)}, ..., x_{\pi(n)})\rangle$$

для любой перестановки π электронов. Под перестановкой мы понимаем полную перестановку электронов в тензорном произведении, вместе с их состоянием и спинами.

В этом случае у нас на протяжении всей динамики, как для унитарного случая, так и для декогерентности, вызванной операторами Линдблада, равно как и для отбоора базисных состояний, антисимметризация будет сохраняться. Мы, таким образом, можем теперь рассматривать электроны как индивидуальные частицы и снабжать их номерами: 1,2,...,n; а их неразличимость будет обеспечиваться сохраняющейся во времени антисимметризации вектора состояния. Под номером электрона мы понимаем пару: его уровень в атоме, и его спин. Если же мы захотим оперировать не уровнями энергии атома, а координатами в пространстве, мы должны сделать этот переход для всех электронов одновременно, и тогда электроны обретут новые индивидуальности, которые уже не будут иметь никакой связи с предыдущими, однако точно так же будут сохраняться на протяжении всей эволюции.

Итак, теперь мы можем забыть про так называемую проблему "неразличимости электронов". Все они будут различимы по их полному состоянию (координата + спин, или энергетический уровень в атоме + спин).

8.7 Состояния как картинки

Если заранее зафиксировать уровни энергии, например три уровня $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ у каждого из 2 атомов, то антисимметризованное состояние нескольких электронов в них можно записывать, просто располагая последовательно занятые электронами уровни. Например, если у первого атома есть два электрона со спином вверх на уровнях $|0\rangle$ и $|2\rangle$, а у второго - два электрона со спином вниз на уровнях $|0\rangle$ и $|1\rangle$ и один электрон по спином вверх на уровне $|0\rangle$, то это можно записать как

$$|0\uparrow\rangle_1|2\uparrow\rangle_1|0\downarrow\rangle_2|0\uparrow\rangle_2|1\downarrow\rangle_2.$$

Условимся об обозначениях. Будем писать нижний индекс у атомного состояния - после знака \rangle , который обозначает номер атома. Например, $|0\rangle_1$ - это орбита $|0\rangle$ у первого атома. Спин будем записывать рядом с орбитой. Например, $|1\uparrow\rangle_2$ - электрон на орбитали $|1\rangle$ со спином вверх у второго атома.

На картинке мы будем рисовать потенциальные ямы вместо атомов, так что нижний индекс после знака > указывает, в каком атоме находится электрон. Кружками обозначаем заполненные уровни.

Правило гибридизации атомных орбиталей при переходе к молекулярным:

$$|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1 + |0\rangle_2), \ |\Phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1 - |0\rangle_2),$$
 (8.10)

где $|\Phi_0\rangle$ - основное, а $|\Phi_1\rangle$ - возбужденное молекулярное состояние электрона. Например, состояния $|0\uparrow\rangle_1|0\downarrow\rangle_2$ и $|0\downarrow\rangle_1|0\uparrow\rangle_2$ будут различными. Мы будем называть стационарные состояния гамильтониана без спинов орбиталями. Предполагаем, что электроны можно отличить только по орбитали, или спину, или атому, к которому они принадлежат; а атомы а-приори различны - различие атомов отмечается нами в нижнем индексе после знака \rangle .

Мы будем изображать электронные состояния в виде рисунков, где горизонтальные черточки обозначают уровни энергии, а кружочки - находящиеся на них электроны. Подразумевается, что такое состояние включает в себя автоматическую антисимметризацию волновой функции электронной пары. Мы, таким образом, не будем различать индивидуальность электронов, а только заполнение уровней в атоме или молекуле.

У гибридизированных орбиталей молекулы не будет нижних индексов после знака). На картинке мы будем изображать электрон на молекулярной орбитали - в центре молекулы, между двух потенциальных ям атомов. Пример приведен на рисунке 8.5.

Эвристическое обоснование гибридизации атомных уровней в молекулярные, представленный формулами (8.10) следующее. Каждый атом мы представляем в виде потенциальной ямы, которую создает положительный заряд ядра для отрицательно заряженного электрона. В этой яме мы различаем два уровня: основной, обозначаемый через $|-1\rangle$, и возбужденный, обозначаемый через $|0\rangle$.

Если атомы далеко друг от друга, потенциальный барьер между ямами велик, так что возможно туннелирование электрона из одной ямы в другую. При этом разница в энергиях между состояниями $|\Phi_0\rangle$ и $|\Phi_1\rangle$ очень мала, так что эти уровни практически не взаимодействуют с полем; напомним, что амплитуды взаимодействия пропорциональна корню из этой разности энергий.

Если же атомы близко друг к другу, потенциальный барьер между ямами становится малым, так что ямы почти сливаются. Это ведет к тому, что туннелирование между ними становится нечетким, размывается, и уровни энергии для электрона в этой паре ям становятся ближе к уровням в одной потенциальной яме. Тогда и взаимодействие уровней $|\Phi_0\rangle$ и $|\Phi_1\rangle$ с полем становится заметным, так что в этом случае целесообразно рассматривать это взаимодействие не в базисе $|0_1\rangle$, $|0_2\rangle$, а в базисе молекулярных орбиталей (8.10), и взаимодействие с модой молекулярного возбуждения в этом новом базисе будет иметь в точности вид гамильтониана Джейнса-Каммингса в RWA приближении.

Такая гибридизация электронных уровней атомов, ведущая к образованию уровней молекулярных делает электроны общими для двух атомов, что обеспечивает прочную ковалентную связь между атомами в том случае, когда электронов два: один со спином вверх, другой со спином вниз.

Для атомов с многими валентностями каждой валентности будет соответствовать своя потенциальная яма, так что образование ковалентных связей с несколькими атомами будет идти по той же схеме.

8.8 Черные состояния

Темное подпространство в модели с неподвижными атомами в модели TC+RWA есть ядро оператора релаксации атомной системы: $Ker(\bar{\sigma})$. Если в начальном состоянии фотонов в полости не было и атомы находились в темном состоянии, то и ни в какой последующий момент времени фотонов в полости также не появится. Однако для модели с движущимися атомами это уже не так: атом может сначала переместиться, а уже потом испустить фотон. Поэтому в модели с движущимися атомами подпространство состояний, в которых атомная система не может испустить фотона даже после ненулевого времени эволюции, будет иметь вид $Ker(\sigma U_{at \ jump})$, где оператор туннелирования атомов $U_{at \ jump} = exp(-\frac{i}{\hbar}H_{at \ jump}t)$ для какого-либо малого t, а его гамильтониан $H_{at \ jump}$ имеет вид (8.2). Такое подпространство мы будем называть черным, и состояния в нем - черными состояниями.

Для явно выделяемых электронов в атомах можно ввести понятие черного состояния аналогичным образом. Здесь надо различать два случая: а) атомы не могут перемещаться между полостями, а только электроны могут перемещаться между атомами внутри одной полости, и б) атомы могут перемещаться между полостями, а электроны могут перемещаться только между атомами в одной полости. Мы будем называть состояние $|\Psi\rangle$ атомов и электронов черным при выполнении следующего условия. Если фотонов в начальном состоянии в полости нет, а атомы и электроны находятся в этом состоянии, то и в последующие моменты времени фотонов в полостях не появится. Соответственно, у нас будет две разновидности понятия черного состояния: черное-а и черное-б, в зависимости от вида гамильтониана: в первом случае он не содержит оператора перемещения атомов вида (8.2), а во втором такое слагаемое в гамильтониане есть.

Читателю предлагается подумать над следущими вопросами:

Вопрос 1) Является-а ли черным состояние 1)* на рисунке 8.5? А состояние 1.1) ?

Вопрос 2: Верно ли, что на рисунке 8.5 пункты 1.1), 2.1) и 2.2) изображены все возможные черные-а состояния с неминимальной энергией для изображенного положения атомов в одной полости? Каково черное состояние с минимальной энергией в данном случае?

8.9 Ассоциация - диссоциация двух искусственных водородоподобных двухуровневых атомов

Описание химической реакции сложно. Оно связано с молекулярной динамикой: ассоциация атомов или даже простых молекул может зависеть от того, под каким углом и с какими скоростями они сближаются, от их колебательных и вращательных степеней свободы, от спиновых состояний их валентных электронов, и даже от состояний их ядер. Если мы будем рассматривать это великолепие в полной общности, нам не удастся получить модель даже самой простой химической реакции: ассоциации двух атомов водорода в молекулу H_2 .



Туннелирование электронов между атомами возможно, барьер высокий

2) Барьер низкий, гибридизированные орбитали |0>



Рис. 8.5: Темные состояния системы 2 электронов в паре атомов

Полное описание химических реакций вряд ли когда-либо будет вообще возможно в той же степени, в какой мы можем вычислить стационарные уровни для атома водорода. Но практический интерес представляет не абстрактная химия в вакууме, а та химия которая связана с биологическими процессами, и в этой особой химии все углы сближения определены однозначно структурой белков и нуклеиновых кислот, а случайные параметры вообще не играют никакой роли.

Для нашей цели - открытия механизов сложных процессов мы должны максимально облегчить представление химических реакций, освободив их от второстепенных деталей. Только в этом случае мы сможем справиться с экспоненциальным ростом сложности, этим барьером, отделяющим нас от понимания истинных, квантовых механизмов сложного поведения.

Наши искусственные ассоциирующие атомы называются атомами водорода только потому, что у них имеется ровно один валентный электрон. Ассоциация реальных атомов водорода рассматривалась часто в применении к межзвездным туманностям, в которых кинетическая энергия атомов водорода гасится при неупругих столновениях с пылинками, состоящими из твердого вещества (например, из окиси кремния), так что сама ассоциация происходит на поверхности этих пылинок. При этом выделяют два механизма ассоциации: Эли Ридеала и Ленгмюра-Хиншельвуда. В первом механизме один атом расположен на поверхности пылинки, а второй налетает на него из пространства, так что после ассоциации молекула водорода опять улетает с поверхности пылинки в пространство. Во втором механизме оба атома первоначально находятся на поверхности пылинки, перемещаясь друг к другу не покидая этой поверхности. Эти механизмы характерны для космических сценариев.

Мы же исследуем ассоциацию и диссоциацию в среде, где кинетическая энергия рассматриваемых атомов в ходе многочисленных столкновений, и связанных с ними потерям энергии передается другим атомам, не входящим в область моделирования. Так что сближение наших реагентов происходит столь медленно, что характерное действие становится сравнимым с постоянной Планка, так что становится оправданным применение квантововго представления механической динамики самих атомов - в виде их туннелирования между двумя ближайшими точками.

Итак, выбранный нами набор основных операций химии дает следующее ее описание. Движение тяжелых атомных ядер при их сближении вызывает возмущение их электронных оболочек. На близком расстоянии атомные состояния электронов при условии разных спинов валентных электронов гибридизируются, превращаясь в суперпозицию молекулярных орбиталей. Эти орбитали взаимодействуют с электромагнитным полем молекулярных возбуждений электронов, опускаясь в основное состояние, которое является связывающим ядра. В этом состоянии с некоторой амплитудой возможно образование ковалентной связи, формирующей из двух прежде независимых атомов новый единый объект - молекулу.

Образование ковалентной связи происходит при испускании парой атомов *фонона* - квазичастицы, кванта колебаний среды, которые определяют ее температуру.

Это квазичастицы - кванты колебаний системы связанных гармонических осцилляторов, описанных в Приложении. Они подчиняются тем же коммутационным соотношениям, что и квазичастицы электромагнитного поля - фотоны, так что мы можем обозначать их операторы рождения и уничтожения так же, как и для фотонов.
Более того, к взаимодействию фононов колебаний среды и ковалентной связи между атомами применима та же модель Джейнса-Каммингса, что и к взаимодействию атомных возбуждений с электромагнитным полем. В этом процессе будут принимать участие фононы низкой частоты ω_{cov} , которые испускаются при образовании ковалентной связи между атомами.

Распад молекулы происходит в обратном порядке. Сначала она должна поглотить фонон возбуждения движений ядер моды ω_{cov} , после чего станет возможным независимое туннелирование ядер атомов, которые вскоре с некоторой амплитудой смогут разойтись в разные стороны.

Мода ω_{cov} отвечает за тепловое движение атомов; фотоны этой моды имеют очень малую энергию и вызывают переходы в ковалентное состояние или из него только если их взять в большом количестве. Поэтому мы не будем включать их число в базисные состояния, а их присутствие будет проявляться только в том, что будет изменяться коэффициент взаимодействия пространственного туннелирования пары атомов с полем. Большой коффициент будет свидетельствовать о высокой температуре резервуара с атомами; это, как правило, будет вызывать повышение вероятности диссоциации молекулы на пару атомов (из этого правила могут быть и исключения).

8.9.1 Простейшая модель ассоциации - диссоциации без явных электронов

Сначала рассмотрим простейшую модель ассоциации - диссоциации, в которой нет явных электронов. Мы предполагаем, что электронные оболочки атомов устроены так, что при их сближении и "успокоении" кинетики ядер ассоциация происходит точно также, как релаксация атома в модели Джейнса-Каммингса, то есть при испускании бозона, отвечающего за ассоциацию. Этот бозон может быть как фотоном, так и фононом; в последнем случае кинетическая энергия ядер сблизившихся атомов отдается среде, переходя в квант колебаний окружающего атомы раствора.

Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H_{sim} = H_0 + H_{tun} + H_{cov}.$$
 (8.11)

Здесь *H*₀ - энергия свободных атомов,

$$H_{tun} = \sum_{i \neq j, \ i, j \in J} g_{tun} [(S_{1\ i}S_{1\ j}^{+} + S_{1\ i}^{+}S_{1\ j})Cond_{1,i,j} + (S_{2\ i}S_{2\ j}^{+} + S_{2\ i}^{+}S_{2\ j})Cond_{2,i,j}]$$

операторы S уничтожают атом с индексом 1 или 2 в узле i или j, а оператор Cond проверяет, нет ли в узле i или j какого-либо иного атома, а также нет ли ковалентной связи между атомами (мы считаем, что молекула уже не туннелирует в пространстве; в противном случае нам пришлось бы еще добавлять в H_{tun} слагаемое, соответствующее туннелированию молекулы как единого целого, с возможностью ее параллельных перемещений и вращений в пространстве). Таким образом, оператор туннелирования просто означает перемещение обоих атомов между ближайшими узлами целочисленной решетки, на которую мы поделили пространство, так что множество пар J есть множество пар соседних узлов решетки.

Оператор H_{cov} имеет вид

$$H_{cov} = g_c(\sigma_c b^+ + \sigma_c^+ b)Cond_{close}$$

где σ_c есть оператор, рождающий ковалентную связь двух атомов, b - оператор уничтожения фонона, отвечащего за эту связь, $Cond_{close}$ проверяет, сближены ли атомы на расстояние, при котором возможна ассоциация. Иными словами, рождение ковалентной связи сопровождается также рождением фонона, который уносит лишнюю кинетическую энергию, "успокаивая" атомы, а разрыв такой связи сопровождается поглощением такого фонона.

Легко видеть, что такая модель очень схожа с моделью Джейнса-Каммингса, только роль возбуждения атома здесь играет отсутствие ковалентной связи. Это соответствует физике процесса, ибо атомы, связанные в молекулу, обладают меньшей кинетической энергией, чем свободные атомы.

Базисными состояниями здесь будут строки вида

$$|ph, at_1, at_2, cov\rangle$$
 (8.12)

где *ph* - число фононов ассоциации, находящихся в рассматриваемом резервуаре, *at* - номер узла, где находится соответствующий атом, $cov \in \{0, 1\}$, причем cov = 1 тогда и только тогда, когда атомы свободны (не связаны в молекулу). Тогда соответствие с моделью Джейнса-Каммингса будет почти полным, единственным отличием будет только возможность свободного блуждания атомов по узлам решетки.

Эта модель способна дать качественное представление о ассоциации двух атомов, свободно движущихся в пространстве. Имеет смысл влючить в такую модель еще и улет фононов из резервуара, перейдя к основному квантовому уравнению. Верно ли, что в любом случае у нас получится молекула, если подождать достаточно долго? Если резервуар очень большой, то ассоциация может занять сколь угодно большое время. Причина этого - существование почти черных состояний, например, вида, показаного на рисунке 8.3. Если замостить такими состояниями весь резервуар, в таком состоянии атомы не смогут передвигаться, чтобы занять близкое положение, при котором возможна ассоциация в молекулу. Если в первоначальном состоянии окажется ненулевая компонента такого вида, то вероятность получения молекулы будет чрезвычайно медленно возрастать, и ее стремление к единице будет обязано только лишь ограниченности самого резервуара.

Температура на фононной моде определяется точно также, как и для фотонов: через интенсивности стока и притока фононов в полость. Напомним, что термически стационарное состояние поля в полости имеет вид (3.13), где $e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} = \gamma_{in}/\gamma_{out}$, из чего находится температура T внутри полости; это полностью сохраняется и для тепловых фононов. Таким образом, знание основных параметров модели: γ_{in} и γ_{out} дает возможность находить зависимость также и вероятностей каналов химической реакции от температуры среды внутри полости.

Целесообразно еще упростить модель, рассмотрев только два возможных пространственных положения l пары атомов: вблизи l = 0 и вдали l = 1.

Тогда базисные состояния будут иметь вид

 $|n,l,cov\rangle$

где n = 0, 1 - число фононов ассоциации, l = 0, 1 - расстояние между атомами, cov = 0, 1 - признак наличия ковалентной связи, определяемые как и выше. Гамильтониан примет вид

$$H_{simple} = H_0 + H_{tun} + H_{cov}, H_0 = \hbar\omega(b^+b + \sigma^+\sigma), H_{cov} = g_c(\sigma_c b^+ + \sigma_c^+ b)Cond_{close}, H_{tun} = -c\sigma_x^{dist}Cond_{cov},$$
(8.13)

где σ , σ^+ - операторы формирования - уничтожения ковалентной связи, действущие как $\sigma|0\rangle_{cov} = 0$, $\sigma|1\rangle_{cov} = |0\rangle$, $\sigma^+|0\rangle_{cov} = |1\rangle_{cov}$, $\sigma^+|1\rangle_{cov} = 0$, а σ_x - оператор Паули, определяющий туннелирование из ближнего состояния в дальнее и наоборот; c > 0.

Заметим, что основным состоянием ковалентной связи является состояние cov = 0 - когда она имеется, а возбужденным cov = 1 - когда связи нет.

Граф переходов в приближении вращающейся волны для началного состояния $|0,1,1\rangle$ (свободные атомы далеко друг от друга, фотонов нет) выглядит так:

$$|0,1,1\rangle \leftrightarrow |0,0,1\rangle \leftrightarrow |1,0,0\rangle \rightarrow |0,0,0\rangle \tag{8.14}$$

где первые два перехода обратимы, а второй необратим - это сток фонона из полости вовне. Эта модель уже допускает прямое решение даже в аналитической форме, так что вероятность состояния ассоциированных в молекулу атомов $|0,0,1\rangle$ будет стремиться к 1 при $t \to \infty$.

Этот вывод не намного отличает нашу упрощенную модель от первого варианта с базисными состояниями (8.12): в первом варианте имеется большее разнообразие пространственных состояний атомов - там, при определенных пространственных конфигурациях возможны, например, черные состояния, при которых атомы не могут сблизиться на расстояние ассоциации. Если такой компоненты в начальном состоянии нет, то в пределе $t \to \infty$ мы снова получим молекулярное состояние.

8.9.2 Простейшая модель динамики электронов при ассоциации - диссоциации

Теперь мы рассмотрим динамику электронов при ассоциации и диссоциации молекулы. Связывание атомов в молекулу происходит посредством электронов. Именно электронные состояния определяют - появится ли молекула, или атомы разлетятся в разные стороны. Особенно важную роль в динамике электронов играют их спины, потому что принцип запрета Паули исключает нахождение двух электронов с одинаковыми спинами на одной орбите. Мы будем рассматривать два водородно-подобных искусственных атома, предполагая, что у них есть только два пространственных положения - близкое $|0\rangle$ и далекое $|1\rangle$ - как во втором варианте из предыдущего параграфа.

В квантовой химии принято считать, что ковалентная связь, формирующая молекулу водорода из 2 атомов, получается "перекрытием электронных состояний 1s" отдельных атомов. Это представление работает для вычисления характеристик стационарных молекул, таких как энергия связи, но не подходит для описания динамики химических реакций.



Рис. 8.6: Вверху - переход от далекого положения атомов (слева) к близкому; барьер между кулоновскими ямами атомов понижается и нижний уровень исчезает. Гибридизируются в молекулярные орбиты состояния $|0_1\rangle$ и $|0_2\rangle$. Внизу - соответствующая деформация состояний электрона внутри атома. Уровни $|-1\rangle$ и $|0\rangle$ отличаются от уровней электрона в атоме водорода.

Например, в такой упрощенной модели нет четкой границы, которая отделяет молекулу от пары атомов, получающихся при ее диссоциации. Связывающее атомы электронное состояние $|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s_1\rangle + |1s_2\rangle)$ (нижние индексы обозначают номер атома) сохраняется при любом расстоянии между ядрами атомов, и нет никакого критерия, отделяющего такое состояние от пары независимых состояний $|1s\rangle$ для отдельных атомов.

Для более точной модели ассоциации - диссоциации надо учитывать промежуточное состояние двухатомной системы, когда атомы еще не образовали молекулу, но их электронные состояния уже существенно деформировались под действием кулоновского поля друг друга так, что атомными состояниями будут уже не $|1s\rangle, |2s\rangle, |2p_{x,y,z}\rangle, ...,$ как в свободном атоме водорода, а деформированные состояния, наинизшее из которых мы обозначим через $|-1\rangle$, а первое возбужденное - через $|0\rangle$.

Такое представление означает, что кинетическая энергия сближающихся атомов вызывает возбуждение их электронных оболочек, так что электрон, первоначально находившийся в состоянии $|1s\rangle$, сначала адиабатически переходит в состояние $|-1\rangle$, а потом "довозбуждается", переходя в состояние $|0\rangle$, и вот эти состояния и гибридизирутся при образовании молекулы. Эта гибридизация происходит потому, что состояние $|-1\rangle$ у сближенных атомов исчезает: для него не остается места в сильно уменьшившихся потенциальных ямах сближенных атомов (см. рисунок 8.6).

При диссоциации все происходит в обратном порядке: внешняя энергия (например, тепловой фонон), вызывающая разлет ядер, повышает потенциальный барьер так, что в углубившихся потенциальных ямах возникает нижнее состояние $|-1\rangle$, на которое падает электрон, и которое, уже адиабатически, переходит в стандартное состояние $|1s\rangle$, полностью завершая процесс диссоциации молекулы.

Таким образом, ассоциация и диссоциация ни в коем случае не может быть полностью адиабатическим процессом, несмотря на очень медленное движение атомных ядер; эти процессы только содержат в себе адиабатическую часть - деформацию атомных состояний, но их сердцевина, связанная с взаимодействием с полем, существенно неадиабатична. Именно ее мы и будем рассматривать.

Итак, у каждого атома будет два энергетических уровня для электронов: основной $|-1\rangle$ и возбужденный $|0\rangle$, причем нижний индекс у уровня всегда будет означать номер атома. Каждый уровень еще будет разделен на 2 подуровня, соответствующих направлению спина: вверх \uparrow или вниз \downarrow , так что на каждом подуровне может находиться не более одного электрона.

Базисные состояния системы будут иметь вид

 $|\bar{ph}, \bar{at}\rangle$

где ph - состояние фотонов трех мод: атомной, молекулярной, и электронной спиновой. at - строка вида $(0(1), at_1, at_2)$, где первый член обозначает пространственное положение атомной системы - положения атомных ядер, кортеж $at_1 = (snuc_1, el_1)$ - здесь первый член - спин ядра (\uparrow или \downarrow для водородоподобных атомов, где ядро - протон; для более тяжелых элементов будет больше значений), el_1 - состояние электронной оболочки первого атома, включая орбиты и спины входящих в нее электронов. Например, el_1 может иметь вид $0_1 \uparrow, -1 \downarrow$ что означает наличие на основном

уровне $|-1\rangle$ электрона со спином вниз, а на возбужденном $|0\rangle$ - электрона со спином вверх; или $-1\uparrow$ - что означает наличие только одного электрона на основном уровне со спином вверх. Для второго атома поменяется только нижний индекс на 2.

Мы введем правило: если положение атомов - близкое (0), то оба электрона в системе должны иметь различные спины: ↓ и ↑. Это требование всегда будет соблюдаться в эволюции, которую мы определим ниже через гамильтониан нашей системы.

Если атомы близки, может произойти так называемая гибридизация их атомных состояний в молекулярное состояние, в котором оба электрона будут связывать ядра своим кулоновским полем. Для точного определения рассмотрим сначала случай одного единственного электрона. Если он находится в поле двух ядер, его можно рассматривать как частицу в двух-ямном потенциале, которая описывается гамильтонианом вида

$$H_{2holes} = \begin{pmatrix} a & -c \\ -c & b \end{pmatrix}$$
(8.15)

где a, b, c - вещественные неотрицательные числа. Пусть $|0_1\rangle$ - положение частицы в левой яме, $|0_2\rangle$ - в правой. Для случая одинаковых атомов, который мы здесь рассматриваем, a = b, собственные числа H_{2holes} имеют вид $a \pm c$ и собственные векторы будут такими:

$$\begin{aligned} |\Phi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle + |0_2\rangle),\\ |\Phi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle - |0_2\rangle). \end{aligned}$$
(8.16)

где $|\Phi_0\rangle$ - основное, а $|\Phi_1\rangle$ - возбужденное состояние электрона в молекуле. Для неодинаковых атомов эти выражения будут другими¹. Электроны, находящиеся в состоянии $|\Phi\rangle$, которое принадлежит подпространству, порожденному векторами $|\Phi_0\rangle$, $|\Phi_1\rangle$, мы будем называть связанными.

Гибридизация - это переход от базиса электронных состояний $|0_1\rangle$, $|0_2\rangle$ к базису $|\Phi_0\rangle$, $|\Phi_1\rangle$. Такой переход соответствует реальному процессу. При сближении атомных ядер нижний атомный уровень $|-1\rangle$ исчезает и остается только уровень $|0\rangle$, который и будет гибридизироваться в (8.16); электроны должны возбудиться. Более того, сближение возможно только если спины электронов различны.

Мы будем считать ассоциированным состоянием атомов в молекулу такое состояние, в котором оба электрона имеют разные спины и находятся в основном молекулярном состоянии $|\Phi_0\rangle$. Таким образом, мы определяем молекулярное состояние электронной оболочки как

$$|mol\rangle_{el} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\downarrow\rangle + |0_2\downarrow\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\uparrow\rangle + |0_2\uparrow\rangle).$$
(8.17)

Соответствующее возбужденное молекулярное состояние электронов будет иметь вид $|\Phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1 \updownarrow\rangle - |0_2 \updownarrow\rangle)$ (всегда берется какое-то одно направление спина).

Введем операторы электронной релаксации в молекуле σ_{mol} , которые действуют на одноэлектронное состояние соответствующего спина как

$$\sigma_{mol}|\Psi_0\rangle = 0, \ \sigma_{mol}|\Psi_1\rangle = |\Psi_0\rangle.$$

¹Например, для электрона, осуществляющего ковалентную связь в положителном ионе гидроксила OH^+ эти состояния будут иметь вид $|\Phi_0\rangle = \alpha |0_O\rangle + \beta |0_H\rangle$), $|\Phi_1\rangle = -\beta |0_O\rangle + \alpha |0_H\rangle$, где $\alpha, \beta > 0, \alpha > \beta$. В основном молекулярном состоянии электрон находится в более глубокой потенциальной яме - у кислорода, а в возбужденном - наоборот.

Теперь взаимодействие связанных электронов с *молекулярной модой поля* будет иметь вид Джейнса-Камингса в приближении вращающейся волны. Все перечисленное относилось к единственному электрону с фиксированным спином. Для пары электронов гамильтониан их взаимодействия с молекулярной модой поля будет иметь вид

$$H_{mol_{el}} = H_{mol\downarrow} + H_{mol\uparrow},$$

$$H_{mol\downarrow} = \hbar\omega_m a^+_{mol\downarrow} a_{mol\downarrow} + \hbar\omega_m \sigma^+_{mol\downarrow} \sigma_{mol\downarrow} + g(a^+_{mol\downarrow} \sigma_{mol\downarrow} + a_{mol\downarrow} \sigma^+_{mol\downarrow}),$$

$$H_{mol\uparrow} = \hbar\omega_m a^+_{mol\uparrow} a_{mol\uparrow} + \hbar\omega_m \sigma^+_{mol\uparrow} \sigma_{mol\uparrow} + g(a^+_{mol\uparrow} \sigma_{mol\uparrow} + a_{mol\uparrow} \sigma^+_{mol\uparrow}),$$
(8.18)

где, как обычно, $H_{mol\downarrow}$ трактуется как $H_{mol\downarrow} \otimes I_{mol\uparrow}$ и наоборот - на часть базисного состояния, явно не выписанную, оператор всегда действует как идентичный.

Применение оператора σ_{mol} и σ^+_{mol} на базисных состояниях, ввиду определения $|\Phi_{0,1}\rangle$ имеет вид

$$\frac{|\mathbf{0}_1\rangle - |\mathbf{0}_2\rangle}{2} \xleftarrow{\sigma_{mol}^+} |\mathbf{0}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi_1\rangle) \xrightarrow{\sigma_{mol}} \frac{|\mathbf{0}_1\rangle + |\mathbf{0}_2\rangle}{2},$$
$$\frac{|\mathbf{0}_1\rangle - |\mathbf{0}_2\rangle}{2} \xleftarrow{\sigma_{mol}^+} |\mathbf{0}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi_0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi_1\rangle) \xrightarrow{\sigma_{mol}} - \frac{|\mathbf{0}_1\rangle + |\mathbf{0}_2\rangle}{2}$$

Сделаем важное замечание. Динамика электронов тесно связана с полем. Если бы поля не было, мы наблюдали бы туннелирование электрона из одной ямы в другую и обратно, и собственные состояния $|\Phi_0\rangle$, $|\Phi_1\rangle$ оставались бы неизменными во времени, изменялись бы только их фазовые коэффициенты $exp(-\frac{i}{\hbar}E_{0,1}t)$, которые, взятые по отдельности, не имеют никакого физического смысла. Именно это и происходит, когда атомы не очень близко.

В реальности расстояние между ядрами переменное, и есть положения, которые мы приближенно обозначаем как $|0_{1,2}\rangle$ но в действительности там есть много разных положений. Если атомы близко, для того, чтобы электрон мог туннелировать между потенциальными ямами, но не достаточно близко для гибридизации, разность энергий ΔE между состояниями $|\Phi_1\rangle$ и $|\Phi_0\rangle$ мала, и состояние $|\Phi_1\rangle$ редко испускает молекулярный фотон, чтобы перейти в состояние $|\Phi_0\rangle$. Если перейти к атомному базису $|0_{1,2}\rangle$, мы получим синусоидальную динамику туннелирования из одной ямы в другую.

Но как только атомы сблизились до того расстояния, где происходит гибридизация, потенциальный барьер между ними упал, а разность энергий ΔE возросла настолько, что стала существенной вероятность испускания и поглощения фотона молекулярной моды, состояние $|\Phi_1\rangle$ начнет портиться, испуская фотон. В этом случае уже не будет картины осцилляций между $|0_1\rangle$ и $|0_2\rangle$. Через испускание фотона молекулярной моды - как члена в суперпозиции состояний - электрон попадет в состояние вида $(\alpha|0\rangle_{ph} + \beta|1\rangle_{ph})|\Phi_0\rangle$ и окажется сразу у двух атомов сразу. В суперпозиции будет находиться молекулярная мода поля.

Процесс ассоциации двух атомов в целом будет выглядеть так. Нейтральные атомы движутся в потенциале Леннарда-Джонса V_i - см. (8.7), где *i* - номер атома. где их движение на далеком расстоянии (*r* больше точки минимума в (8.7)) может быть описано в теминах классической физики, с некоторым шагом Dt по времени, так что позиции атомов x_i в зависимости от их скорости v_i выражаются как $x'_i = x_i + v_i \cdot Dt$, где штрихом обозначены значения в следующий момент времени, а без штриха - в

4.Потенциал Леннард-Джонса.

Описывает взаимодействие молекул, учитывая как их притяжение, так и отталкивание. Общий вид:

$$u(r) = \frac{a}{r^n} - \frac{b}{r^m}$$

а и b – параметры потенциала, определенные для пары молекул данного типа (a, b > 0)

n, m – целые положительные числа, n>m

Учитывая, что $u_{npитаж} \sim r^{-6}$ и $u_{orr} \sim r^{-12}$, потенциал Л-Д приобретает вид:

$$u(r) = \frac{a}{r^{12}} - \frac{b}{r^6}$$

Потенциал такого вида иногда называют потенциалом 6-12



Потенциал Л–Д может быть использован для описания взаимодействий как одинаковых молекул, так и молекул разного рода (*смешанные взаимодействия*).

Рис. 8.7: Потенциал Леннарда-Джонса

текущий. Скорости изменяются по правилу $v'_i = v_i + a_i Dt$, $a_i = m_i^{-1} F_i$, $F_i = -\nabla V_i$ это закон Ньютона.

В области соударения, когда расстояние сравнивается с точкой минимума r_0 , происходит так называемое соударение; здесь скорости надо пересчитывать, исходя из законов сохранения импульса и энергии:

где ΔE - энергия, потерянная при соударении. Для нахождения ΔE надо рассмотреть соударение более детально, разбив область с окрестности r_0 на много частей, с выделением малой окрестности r_0 , где происходит гибридизация электронных состояний; именно она и дает поправку к энергиям ΔE . В этой области соударения при подходе к малой окрестности точки r_0 моделирование происходит по классической схеме с большей детализацией - меньшим шагом по времени. При попадании атомов в область гибридизации орбиталей начинает действовать квантовая модель, в результате чего мы сможем рассчитать первое приближение к Δt как энергию испущенных при квантовом моделировании фотонов.

Эта энергия равна энергии всех испущенных фотонов за время, которое требуется ядрам для выхода из области гибридизации при постоянных скоростях, сохраняющихся с момента входа в эту область. Поправка к энергиям, полученная из формул (8.19), замедлит классическую скорость атомов, так что при следующем входе в область гибридизации (если он состоится), время пребывания в ней возрастет, так что в конце концов образуется стабильная молекула. Если же первоначальная скорость была слишком большой, атомы разлетятся на бесконечность.

Описанный механизм потери кинетической энергии действует в среде, когда соударений очень много. Это приводит к сильному замедлению скоростей атомных ядер и делает возможным массовые химические реакции а также и образование нелокальных структур (см. следующий параграф)².

Вернемся теперь к описанию квантовой динамики ассоциации-диссоциации в области гибридизации и ее ближней окрестности.

Итак, сближение атомных ядер, вызванное их первоначальной скоростью при входе в область гибридизации, вызывает возмущение их электронов до орбит $|0_{1,2}\rangle$. Математически это можно выразить, вводя в гамильтониан слагаемое вида

$$check_{close\ nuc\ begin}g_{close\ nuc\ begin}(a_{\Omega\downarrow}^{+}+a_{\Omega\downarrow}+a_{\Omega\uparrow}^{+}+a_{\Omega\uparrow})$$

где оператор *check_{close nuc begin* проверяет дистанцию, на которой находятся ядра, и действиет как идентичный при нужной дистанции и как ноль, если расстояние не подходящее. Операторы рождений и уничтожений фотонов действуют как обычно. Действие такого оператора приведет к появлению в полости нужных фотонов для возбуждения электронных состояний.}

В области близости к гибридизационной зоне мы можем рассматривать и ядра как квантовые объекты, введя два их положения: $|0\rangle_n$ - ближнее, и $|1\rangle_n$ - дальнее. Общий гамильтониан системы 2 атомов приобретет вид

$$H_{2at} = \dot{H}_{molel} + \dot{H}_{at} + H_n.$$
(8.20)

Здесь $H_{molel} = check_{dist}H_{molel}$, H_{molel} имеет вид (8.18), $check_{dist}$ проверяет, находятся ли ядра в нужном состоянии $|0\rangle$, а $\tilde{H}_{at} = check_{dist}-H_{at}$, где

$$H_{at} = \hbar\Omega \downarrow a_{\Omega\downarrow}^+ a_{\Omega\downarrow} + \hbar\Omega \uparrow a_{\Omega\uparrow}^+ a_{\Omega\uparrow} + g_{at}(a_{\Omega\downarrow}^+ (\sigma_{at1\downarrow} + \sigma_{at2\downarrow}) + h.c.)$$

стандартное взаимодействие обоих атомов с полем, приводящее к переходам между $|-1\rangle$ и $|0\rangle$, $check_{dist-}$ проверяет, находятся ли ядра далеко, в состоянии $|1\rangle_n$. Здесь и далее под h.c. мы понимаем не только сопряженный выписанному оператор, но результат изменения направления спинов в выписанном операторе и только затем - добавление сопряженного оператора. Мы не выписываем аналогичный оператор с обратным направлением спинов из-за громоздкости выражений.

При возбужденных состояниях электронов атомы получают возможность туннелировать между близким и далеким расстоянием, и сближаются до пространственного положения 0. После этого они получают возможность, взаимодействуя с полем молекулярной моды с частотой ω (снова разделенной, в зависимости от спина), и испуская фотон молекулярной моды, попадают в состояние ассоциации $|\Phi_0\rangle$.

Наконец, оператор туннелирования ядер имеет вид

$$H_n = check_{ass}\sigma_x \tag{8.21}$$

²Формирование молекулярного водорода подробно исследовалось для межзвездных туманностей, где молекулы образовываются на поверхности пылинок - так называемые механизмы Эли Ридеала и Ленгмюра-Хиншелвуда - см. [100]. В обоих случаях замедление атомов осуществляется путем абсорбции на поверхности твердого тела.

где $check_{ass}$ действует как идентичный, если выполнены условия для ассоциации: электроны имеют противоположные спины и находятся на возбужденной орбите $|0_{1,2}\rangle$, причем один из них находится в состоянии $|\Phi_1\rangle$; σ_x - матрица Паули, означающая туннелирование ядер из ближнего положения $|0\rangle_n$ в дальнее положение $|1\rangle_n$ и наоборот.

Описанная динамика электронных состояний и туннелирования атомов - чисто унитарная, и в рамках только этой модели невозможно описать ассоциацию и диссоциацию молекулы. Мы можем ввести утечку фотонов атомной, спиновой и молекулярной мод, и тогда, имея начальное состояние матрицы плотности системы "атомы + поле", мы могли бы определить вероятность ассоциации атомов в молекулу, если предположить, что молекула - это состояние атомов вблизи, такое что электроны находятся в основном молекулярном состоянии. ³

Эта модель хороша, поскольку учитывает влияние электромагнитного поля на электронные состояния, в отличии от модели без явных электронов из предыдущего параграфа. Однако эта модель не дает нам определить влияние среды на реакцию; например, влияние температуры окружения. Мы исправим этот недостаток в следующем параграфе.

8.9.3 Химические реакции в среде

Теперь мы соединим воедино два сценария: взаимодействие ковалентной связи с фононами окружения и динамику электронных состояний, получив целостную конечномерную модель ассоциации - диссоциации двух атомов в среде, обладающей температурой.

Эта модель может быть уточнена, если выбрать ограниченное по размерности рабочее подпространство в универсуме всех возможных состояний. Этот выбор осуществляется на основе рейтинга базисных состояний - по величине модуля амплитуды и по скорости ее роста. Более точный алгоритм отбора базиса рабочего подпространства может сильно зависеть от рассматриваемого процесса и является своего роад искусством.

Мы вторгаемся в область другой науки - химии, что вызывает необходимость использовать элементы эвристики этой области. Алгоритм построения уже, конечно, не будет унитарным, но он может быть в точности формализован, если добавить к нему элементы, основанные на допонительны знаниях, полученных эмпирическим путем.

³Заметим однако, что в силу определения туннелирования ядер формулой (8.21) мы должны стартовать только либо из молекулярного состояния, либо из состояния, где атомы находятся вдали друг от друга. Если бы мы стартовали с состояния, в котором валентные электроны имеют одинаковые спины и атомы находятся вблизи друг от друга, мы не получили бы никакой разумной динамики, так как в этом случае будет нарушен принцип Паули: оба электрона с какой-то ненулевой амплитудой будут находиться в одном состоянии $|\Phi_0\rangle$ или $|\Psi_1\rangle$. Гибридизации подлежат только состояния электронов с разными спинами, и сама гибридизация применяется только к электронам с разными спинами, принадлежащим к близким атомам. Причина в том, что гибридизация подразумевает возможность для электронов прыжков от атома к атому, но если атомов два и у них одинаковые спины, такие прыжки невозможны из-за принципа запрета. Таким образом, состояние с одинаковыми спинами и близкими атомами невозможно и никогда не возникнет в описанной нами эволюции.

Например, говоря о валентностях, мы оставляем на усмотрение конструктора компьютерной программы вопрос о числе валентностей для определенного вида атомов. Мы также должны учитывать, что атомы, ассоциированные в молекулу, приобретают новые физические свойства, становясь частями нового объекта - молекулы.

Сценарий ассоциации двух искусственных атомов водорода в молекулу будет выглядеть, как изображено на рисунке 8.9. Сначала два нейтральных атома, электроны которых находятся в основном состоянии, сближаются под действием некоторого внешнего поля, источником которого служит среда, в которой находятся наши атомы. Мы игнорируем возможность одновременного сближения более чем двух атомов, поскольку этот случай гораздо менее вероятен, чем сближение двух атомов.

Итак, сближение наших атомов вызывает возмущение их электронов, которые переходят на возбужденную орбиту. В этом состоянии атомы могут сойтись совсем близко так, что потенциальный барьер между ними, который первоначально был непреодолим для электронов, становится низким настолько, что электроны уже не могут опуститься до основных атомных состояний, так что эти состояния $|-1\rangle_1$ и $|-1\rangle_2$ просто исчезают. При этом разница энергий между гибридизированными молекулярными состояниями $|\phi_0\rangle$ и $|\phi_1\rangle$ становится настолько большой, что нельзя игнорировать вероятность испускания фотона, переводящего возбужденный уровень $|\phi_1\rangle$ в основной $|\phi_0\rangle$, что ведет к падению электронов на основной молекулярный уровень, который может крепко связать два атома в молекулу, если образуется ковалентная связь, как это описано в параграфе 8.9.1. Такая молекулы может туннелировать в пространстве уже только как единое целое.

Обратный процесс является результатом обращения времени. Сначала фотон молекулярного возбуждения должен поднять электроны до уровня $|\phi_1\rangle$, при котором они уже не будут сильно связывать ядра, и атомы смогут разойтись в пространстве так, что появится возможность падения электронов уже на открывшийся основной уровень атомов $|-1\rangle_{1,2}$. После этого будут испущены высокоэнергетичные фотоны атомных возбуждений, электроны опустятся на основные атомные уровни и атомы будут полностью независимы.

Далее, мы будем, согласно физической традиции, описывать этот алгоритм в виде гамильтониана, состоящего из слагаемых определенного вида. Однако в случае уже конденсата, состоящего из атомов водорода, выписывать материцы в явном виде не представится возможным из-за взрывного роста размерности.

Поэтому составление программы моделирования должно выглядет так. Исходя из имеющейся части всех базисных состояний надо для каждого из них строить набор его потомков - состояний, в которые система может перейти согласно тем правилам, которые мы изложим на матричном языке гамильтонианов. После сложения амплитуд перехода, как это было объяснено в первых главах, надо применять изложенное выше правило отбора базисных состояний, основанное на их рейтинге. Это требует от программиста определенного искусства, большего, чем это требуется при расчете по заданным математическим формулам; в этом состоит специфика задачи моделирования сложных систем.

Изложенная в предыдущем параграфе схема ассоциации - диссоциации двухатомной молекулы может быть дополнена различными способами. Например, можно ввести операторы утечки и прилета фотонов с разными интенсивностями в качестве операторов декогерентности в квантовом основном уравнении. А можно обогатить саму модель, вводя в нее новые элементы. Например, можно ввести ковалентные связи между атомами в явной форме. Тогда базисные состояния атомов будут выглядеть следующим образом:

$$|\bar{el}, nuc, \bar{bond}\rangle.$$
 (8.22)

Здесь el - состояние электронной оболочки, включающее спины электронов, и имеющей вид $el_1, el_2, ..., el_v$, где el_i , i = 1, 2, ..., v - так называемая валентность, *пис* - спиновое состояние ядра, *bond* - список вида $(at_1, b_1), (at_2, b_2), ..., (at_v, b_v)$, где at_i , i = 1, 2, ..., v - номера атомов, с которыми данный атом связан валентными связями, b_i - степень связи: $b_i = 1$ если связь осуществляется одним электроном, $b_i = 2$, если двумя электронами. Если список *bond* пуст, такой атом называется свободным. Если у какого-то атома имеется валентная связь, указывающая на первый атом, причем с той же степенью связи. Числа v у разных атомов могут быть разными.

Теперь общий гамильтониан для ассоциации - диссоциации будет иметь вид

$$H_{gen_ham_ass_diss} = \dot{H}_{mol_{el}} + \dot{H}_{2at} \tag{8.23}$$

где слагаемые $\tilde{H}_{mol_{el}}$ и \tilde{H}_{2at} отличаются от определенных операторов в формулах (8.20) и (8.18) только введением дополнительного условия в операторах типа *check*. А именно: туннелировать между близким и дальним расположением ядра могут только при условии, что между атомами отсутствует ковалентная связь. Это дополнтельное условие объединяет слагаемые в формуле (8.23) в одно целое.

Необратимой уже произошедшая ассоциация становится только при утечке фононов, то есть при нулевой температуре на фононной моде.

Множество атомов, связанных в связный граф валентными связями, называется молекулой.

Как и раньше мы условимся, что у каждой валентности каждого атома есть два собственных состояний энергии для электронов: основной $|-1\rangle$ и возбужденный $|0\rangle$, причем основные уровни некоторых валентностей могут быть тождественными, напимер, для атома водорода есть три потенциальных валентностей: $|2p_x, 2p_y, 2p_z$, но основной уровень у них одинаков: 1s. При этом электрон в валентности может быть только один или не одного. Каждый уровень разделен на подуровни в соответствии со значением спина: $|\downarrow\rangle$ и $|\uparrow\rangle$, так что валентность может иметь вид 0 $\uparrow_{1,1}$ - электрон со спином вниз первой возбужденной валентности первого атома, или $-1 \downarrow_{2,3}$ - электрон со спином вниз третьей валентности в основном состоянии второго атома.

Число валентностей, в которых есть электрон, является химической валентностью атома. Все валентности мы будем разделять на группы, так что фотоны, возбуждающие электроны в этих валентностях, будут отдельные для каждой группы валентностей. Например, фотон, возбуждающий валентность $2p_x$ отличается от фотона, возбуждающего валентность $2p_z$ в атоме водорода.

Пространство может состоять из полостей, связанных друг с другом мостиками, по которым могут перемещаться атомы так, что в каждой полости может находиться не более одного атома. Фотоны при этом будут общими для всех полостей. Электроны можно для простоты считать связанными с атомами или с молекулами.



Рис. 8.8: Вероятность образования искусственной двухатомной молекулы в зависимости от времени для разных температур электромагнитной моды атомного возбуждения. Параметры $\mu = \gamma_{in}/\gamma_{out}$ для данной моды расположены в порядке возрастания: $\mu^1 < \mu^2 < \mu^3 < \mu^4$. Аналогичный вид имеют кривые для различных температур спиновых мод. Рисунок взят из статьи [41].

К описанной нами модели простой химии можно добавлять новые детали. Например, можно рассмотреть спин-спиновое взаимодействие ядер с электронами.

Это взаимодействие происходит только если электрон находится на основной орбите $|-1\rangle$, так как только с этом случае он близок к ядру и взаимодействие его спина со спином ядра существенно. Слагаемое гамильтониана имеет вид суммы по всем электронам операторов вида

$$\sigma_{el\ e,at}\sigma_{el\ e,at}^+(\sigma_{el\ spin\ e,val}\sigma_{spin\ nuc}^+ + \sigma_{el\ spin\ e,val}^+\sigma_{spin\ nuc}).$$

Любое обогащение нашей модели ведет к увеличению числа реальных частиц или к добавлению новых атрибутов к описанию уже имеющихся, что ведет к быстрому росту размерности пространства состояний. Поэтому уже начиная с введения спинов ядер или для случая многих фотонных мод потребуется отход от стандартной схемы, связанной с диагонализацией гамильтониана, и переход от матрицы плотности к чистому состоянию.

Дальнейшее усложнение модели требует применения алгоритма отбора рабочей области. При этом последовательное построение матрицы переходов, начиная с заданного начального состояния может происходить одновременно с определением рейтинга базисных состояний, которыми занумерованы вершины графа. Ограничение на размерность рабочего подпространства потребует применения рейтинга базисных



Рис. 8.9: Ассоциация и диссоциация двухатомной молекулы. Ассоциация состоит из стадий 1,2,3,4; диссоциация происходит в обратном порядке. Эти процессы возможны только при разнонаправленных спинов участвующих электронов

состояний уже для сравнительно простых систем. Такая структура моделирующей программы есть плата за то, что в наших моделях полностью включены те моды электромагнитного поля и тепловых фононов, которые непосредственно влияют на исход химических реакций.

В результате, при отказе от использования матрицы плотности, мы получаем модель искусственной химии, основанную только на уравнении Шредингера, в которой единственный фактор, отклоняющий эволюцию от реальной - это отбор рабочего подпространства.

Атомы с несколькими валентностями могут приближенно представляться как конструкция из двух или более потенциальных ям, жестко связанных между собой, так что в каждой из них имеется ровно один электрон, который может образовать ковалентную связь с посторонним атомом. Используя описанный выше прием, мы сможем, таким образом, моделировать формирование и распад сложных молекул из более чем 2 атомов, например, молекулы воды, и создавать динамические сценарии с полимерами. Метод отбора позволяет распространить квантовуя механику на сложные системы без использования реальных квантовых гейтов; только на классических компьютерах. Квантовые модели с предсказательной силой, открывают новые перспективы для управления химически сложными процессами - это и есть реальный квантовый компьютер.

8.10 Немарковские процессы

Задача построения компьютерного симулятора химии до сих пор не решена. Она представляет настоящий вызов вычислительной математике из-за экспоненциально растущей сложности вычислений. Ее отличие от так называемой молекулярной динамики в ключевой роли электромагнитного поля, резко усложняющего картину реакции. В литературе рассматриваются специальные объекты, удобные для численного анализа - поляритоны, представляющие собой запутанные состояния молекулярных структур и электромагнитного поля (см., например, [101]). Это представление позволяет эффективно исследовать в рамках конечномерной модели Джейнса-Каммингса довольно тонкие эффекты типа вращения поляритонов, фотонную блокаду и роль объемлющей оптической полости (см. [102], а также [103]).

Нас будут больше интересовать коллективные эффекты и сложные химические сценарии, чем детальный анализ тонкой микроскопики, как в цитированных статьях. Многоатомные системы с квантовой точки зрения рассматривались, например, в [104], в рамках модели Хольстейна-Тависа-Каммингса НТС (см. [105], [106], [107]).

Нашей целью является исследование еще более сложных сценариев, чем чисто химические; скорее относящиеся к биологии. Такие сценарии не являются марковсими случайными процессами: в них рассматриваемую систему, как правило, невозможно отделить от ее окружения. Здесь нам необходимо еще более упростить нашу модель по сравнению с НТС. Мы рассматриваем абстрактные атомы, называя их *искусствеенными* в знак того, что в них сохранены только основные атрибуты реальных атомов - электроны, отвечающие за ковалентные связи и динамика ядер в пределах целочисленной пространственной решетки, и молекулярные структуры, составленные их них. Рассмотрение больших ансамблей таких атомов и поля (искусственных поляритонов) требует очень экономного расходования вычислительных ресурсов, и соответствующих математических подходов.

Напомним, что традиционный подход к открытым квантовым системам ([21]) основан на описании декогерентности в виде квантового основного уравнения

$$i\hbar\dot{\rho} = [H,\rho] + i\mathcal{L}(\rho), \quad \mathcal{L}(\rho) = \sum_{i=1}^{N-1} \gamma_i (A_i\rho A_i^+ - \frac{1}{2} \{A_i^+ A_i\rho, \rho A^+ A\}), \quad (8.24)$$

на матрицу плотности $\rho(t)$ рассматриваемой системы. Здесь нарушение когерентности представляется в виде влияния окружения, и это влияние входит в него в виде факторов декогерентности A_i , образующих ортонормированный базис пространства операторов Лиувилля, причем их конкретный вид которых никак не зависит от гамильтониана H ([21]). Это предполагает отсутствие у окружения долговременной памяти, то есть так можно описывать только марковский случайных процесс.

Уравнение 8.24 великолепно работает для простых процессов, которые можно приближенно считать марковскими, но для химических взаимодействий, в особенности для сложных динамических сценариев, оно совершенно не подходит. Первая причина состоит в большой затратности любого метода решения уравнения 8.24: для получения вероятностного распределения нам нужно оперировать с квадратичным по величине массивом. Вторая причина состоит в том, что представление состояния виде матрицы плотности предполагает разделение вероятности на классическую и квантовую, что привносит искусственный беспорядок в описание системы. Но еще важнее третья причина - не соблюдение соотношения неопределенностей "время энергия".

Поясним последний аргумент на простом примере, когда все факторы декогерентности A_i сводятся только к утечке фотонов из полости: $A_i = a$. Возьмем два момента времени t_1 и $t_2 > t_1$ и предположим, что фотон вылетел из полости в момент t_1 . Получившая часть состояния сразу становится объектом декогернтности и прекращает интерференционное взаимодейтвие с оставшейся частью состояния. Так что если фотон также вылетел из полости в момент t_2 , получившееся состояние никак не будет интерферировать с результатом вылета фотона в момент t_1 , хотя в обоих случаях энергия результирующих состояний будет одинакова. Однако, если речь идет о единичных фотонах, как в рассматриваемых нами моделях, соотношение неопределенностей $\delta t \cdot \delta E$ означает, что мы должны допустить такую интерференцию, ибо частота фотона в конечномерных моделях КЭД фиксирована, и дисперия времени вылета его из полости велика. Результаты событий: вылет фотона в момент t_1 и в момент t_2 могут интерферировать и мы должны учесть такую возможность.

Поэтому для химических взаимодействий вместо уравнения 8.24 целесообразно использовать эволюцию вектора состояния, что показано ниже.

8.10.1 Эволюция вектора состояния вместо квантового основного уравнения

Итерационный алгоритм для фотонной машинерии

Под фотонной машинерией мы понимаем процесс, связанный с обменом фотонами между различными атомами в ансамбле, распределенном в пространстве. Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда не дает полного описания такого процесса, так как в этой модели траектории фотонов четко фиксированы системой волноводов между оптическими полостями; между тем в свободном пространстве такой фиксации нет.

Итак, мы рассматриваем случай, когда единственным фактором декогерентности является утечка фотона из полости: A = a.

Введем в базисное состояние один новый регистр - число *m* вылетевших из полости фотонов. Таким образом, базисное состояние будет иметь вид

$$|m, n, atoms\rangle$$
 (8.25)

где n - число фотонов, находящихся вблизи атомной системы (внутри условной полости), способных взаимодействовать с рассматриваемыми атомами, m - число удаленных фотонов, которые не могут взаимодействовать с системой атомов, а последний регистр - состояния всех атомов в системе. Рассмотрим сначала простейший случай двухатомной системы, полная энергия которой ограничена числом $\hbar\omega$, так что базисное состояние будет иметь вид $|m, n, at_1, at_2\rangle$, где $n + m + at_1 + at_2 = 1$.

Гамильтониан такой системы "атомы + фотоны" будет иметь следующий вид

$$H = \hbar\omega(a^+a + a^+_{out}a_{out} + \bar{\sigma}^+ \cdot \bar{\sigma}) + g(a\bar{\sigma}^+ + a^+\bar{\sigma}), \ \bar{\sigma} = \sigma_1 + \sigma_2, \tag{8.26}$$

где $a^{(+)}$ - операторы поля внутри полости, $a_{out}^{(+)}$ - операторы поля вне полости, σ - операторы атомной релаксации (возбуждения), · обозначает скалярное произведение. Поле, таким образом, фактически разделяется на 2 компоненты - ближнюю и дальнюю, так что с атомным ансамблем взаимодействует только первая, но энергия второй, тем не менее, входит в гамильтониан.

Теперь шаг итерационного процесса, определяющего эволюцию во времени нашей системы, будет состоять из двух действий, примененных к состоянию $|\Psi(t)\rangle$, первое из которых состоит в применении оператора унитарной эволюции, а второе выражает процесс "взаимодействия с окружением". Эти действия имеют такой вид.

1. Пусть $|\tilde{\Psi}(t+dt)\rangle = (1 - \frac{i}{\hbar}H \ dt)|\Psi(t)\rangle = |0,0,\Phi_{00}\rangle + |1,0,\Phi_{01}\rangle + |0,1,\Phi_{10}\rangle$, где $|\Phi\rangle$ обозначают различные атом ные состояния. В нашем случае полной энергии $\hbar\omega$ $|\Phi_{00}\rangle = \lambda_{01}|01\rangle + \lambda_{10}|10\rangle$, $|\Phi_{01}\rangle = \mu_{01}|00\rangle$, $|\Phi_{01}\rangle = \nu_{01}|00\rangle$, где λ, μ и ν - комплексные числа.

2. Положим

$$|\Psi(t+dt)\rangle = |0,0,\Phi_{00}\rangle + \alpha|1,0,\Phi_{01}+\Phi_{10}\rangle, \ \alpha = \frac{\sqrt{\|\Phi_{01}\|^2 + \|\Phi_{10}\|^2}}{\|\Phi_{01}+\Phi_{10}\|}.$$
 (8.27)

Таким образом, можно записать оператор данной трансформации в виде

$$|\Psi(t+dt)\rangle = Y|\tilde{\Psi}(t+dt)\rangle, \quad Y = \sum_{j} |0,0,j\rangle\langle 0,0,j| + \alpha |1,0,j\rangle(\langle 0,1,j| + \langle 1,0,j|), |0,0,j|\rangle = 0$$

Поскольку все три слагаемых в разложении $|\tilde{\Psi}(t+dt)\rangle$ из пункта 1 являются ортогональными, выбор α в пункте 2 обеспечивает сохранение единичной нормы вектора $|\Psi(t)\rangle$ во все моменты времени. Пара состояний: $|0, 1, ...\rangle$ и $|1, 0, ...\rangle$ в $|\tilde{\Psi}(t+dt)\rangle$ и $|\Psi(t+dt)\rangle$ соответственно можно назвать донором и акцептором в шаге эволюции состояния, так как амплитуда первого суммируется с амплитудой второго. Причем если норма донора имеет порядок dt, то амплитуда акцептора растет, так что знаменатель в (8.27) не равен нулю.

Данный итерационный процесс естественно обобщается на случай наличия притока фотонов и на случай произвольной полной энергии системы, а также и на случай многоуровневых атомов, причем для ансамблей, состоящих из атомов разных типов спектра.

Пусть у нас имеется n атомов $at_1, at_2, ..., at_n$ так что у каждого at_i есть некий граф спектральных переходов G_i . Пусть также $b_1, b_2, ..., b_k$ - всевозможные фотонные моды,

соответствующие всем переходам графов $G_i, i = 1, 2, ..., n$. Тогда базисное состояние поля будет иметь вид

$$|m_1, m_2, ..., m_k; n_1, n_2, ..., n_k\rangle$$
 (8.28)

где n_j, m_j - числа фотонов моды b_j , которые находятся вблизи рассматриваемой локации и вдали от нее соответственно. Оператор $a_j^{(+)}$ будет обозначать полевой оператор, примененный к компоненте $j \in \{1, 2, ..., 2k\}$ состояния (8.28). Мы наложим на эти состояния условие $n_j + m_j = const_j$ для каждого j = 1, 2, ..., k. Пару состояний $|ph_{don}\rangle$, $|ph_{ac}\rangle$ вида (8.28) мы назовем донорно-акцепторной, если одно из этих состояний получается из другого под действием оператора $A = a_{j_1}a_{j_2}^+$, где $j_1, j_2 \in \{1, 2, ..., 2k\}$, так что $|j_1 - j_2| = k$.

Выберем для каждой донорно-акцепторной пары $P = (|ph_{don}\rangle, |ph_{ac}\rangle)$ некоторую вероятность p(P).

Теперь итерационный процесс, описанный выше, будет изменен так. Пункт 1 останется как раньше, а пункт 2 преобразуется следующим образом. С вероятностью p = p(P) мы выберем из донорно-акцепторных пар некоторую пару P, и пусть оператор этой пары переводит $|ph_{don}\rangle$ в $|ph_{ac}\rangle$. Представим результат пункта 1 в виде

$$|\Psi(t+dt)\rangle = \dots + |ph_{don}\rangle, \Phi_{don}\rangle + |ph_{ac}, \Phi_{ac}\rangle + \dots$$
(8.29)

где полевая часть всех состояний, обозначенных многоточием, ортогональна полевой части обоих состояний из *P*. Тогда мы положим

$$|\Psi(t+dt)\rangle = \dots + \alpha |ph_{ac}, \Phi_{ac} + \Phi_{don}\rangle + \dots$$
(8.30)

,

где

$$\alpha = \frac{\sqrt{\|\Phi_{don}\|^2 + \|\Phi_{ac}\|^2}}{\|\Phi_{don} + \Phi_{ac}\|}$$

а слагаемые, обозначенные многоточием, в выражениях (8.30) будут теми же, что и в (8.29). Заметим, что числа заполнения фотонов будут, как правило, только из множества $\{0, 1\}$, так как приближение первого порядка унитарной эволюции из пункта 1 не может дать более одного "внутреннего" фотона. В то же время превращение "внешнего" фотона во "внутренний" должно происходить с малой вероятностью: в противном случае приток фотонов извне превзошел бы их отток, что означало бы неограниченный рост температуры окрестности атомной системы ([17]).

Для сравнения модели с КОУ (8.24) с описанным нами итерационным алгоритмом фотонной машинерии мы применим следующий критерий: точность выделения темной компоненты из начального состояния. Если начальное состояние - чистое и имеет вид $|\Psi(0)\rangle = |Dark\rangle + |Bright\rangle$, где $|Dark\rangle$ - темное, а $|Dark\rangle$ - состояние, ортогональное темному подпространству в модели TCH, то при $t \to \infty$ вероятность утечки всех фотонов из полости должна равняться $|\langle Bright|Bright\rangle|^2$ - именно это имеет место как для KOУ, так и для нашего итерационного алгоритма (см. рисунок 8.10.1.



Рис. 8.10: Вероятности базисных состояний в решении КОУ (слева) и полученные по итерационному алгоритму фотонной машинерии (справа). Последний алгоритм не дает осцилляций внутри полости, как КОУ (а эти осцилляции и не влияют на конечный исход реакции), и работает с некоторым замедлением по времени (измеренном в числе итераций), но верно предсказывает долю темной компоненты, обходясь существенно меньшей, чем КОУ, памятью. Рисунок взят из статьи [94].

8.10.2 Случай распределенной атомной системы

Приведенный алгоритм описывает эволюцию открытой квантовой системы, локализованной в пространстве; например, в некачественной оптической полости, или просто в малой области пустого пространства. Здесь мы разделяем фотоны на "внутренние" и "внешние", так что у нас есть возможность еще и вернуть обратно "внешние" фотоны, превратив их во "внутренние".

Данный алгоритм можно обобщить на случай нескольких локаций, когда вся система атомов будет разбита на группы $At_1, At_2, ..., At_d$, так что внутри одной группы атомы будут поглощать или испускать идентичные "внутренние" для этой группы фотоны, но для разных групп "внутренние" фотоны будут различными. В то же время, "внешние" фотоны будут для разных групп At_j идентичными. Это означает, что базисное состояние всей распределенной системы будет иметь вид

$$|\bar{m};\bar{n}_1,\bar{n}_2,...,\bar{n}_d,\bar{A}t
angle$$

где $\bar{n}_j = (n_1^j, n_2^j, ..., n_k^j)$ - числа заполнения "внутренних" фотонов, соответствующие локации $j, \bar{m} = (m_1, m_2, ..., m_k)$ - числа заполнения "внешних" фотонов, $\bar{A}t_i$ - атомная система в локации i.

Теперь эволюция всей распределенной системы может быть представлена через очевидную модификацию изложенного выше алгоритма. Пусть $P_1, P_2, ..., P_d$ - вероятностные распределения на фотонных модах, соответствующие атомным группам $At_1, At_2, ..., At_d$, причем получаемые из единого вероятностного распределения \mathcal{P} . Тогда пункт 2 должен быть видоизменен следующим образом: его преобразование должно с вероятностным распределением P_i относиться к атомной локации j.

Физическое расстояние, равно как и оптические свойства среды между атомными локациями, должно сказываться в виде изменения вероятностных распределений P_j . Таким образом, наш алгоритм будет применим к атомным системам, распределенным в пространстве.

Наша алгоритмическая схема хорошо приспособлена для распаралеливания на узлах вычислительной системы, которые могут сохранять общее запутанное состояние $|\Psi(t)\rangle$. В этом случае каждый узел сохраняет часть состояния, относящуюся к одной атомной локации At_j , а общая память хранит часть состояния, относящуюся к "внешним" фотонам: $m_1, m_2, ..., m_k$. Такая вычислительная система фактически имитирует реальный мир с тем лишь ограничением, что она создается вручную из наноструктур, способных сохранять запутанные состояния. Максимальная приближенность такой системы к реальномум прототипу делает квантовую модель очень ценной практически.

С другой стороны, работа с чистым состоянием вместо смешанного позволяет численно исследовать поведение реальной системы в данной модели на полностью классическом вычислителе.

Цена перечисленных достоинств описанного типа эволюции - отказ от ее линейности плюс некоторое замедление вычисления. Нормировка состояния в пункте 2 итерационного процесса нарушает линейность эволюции. И, хотя наш алгоритм формально действует на любых входных состояниях $|\Psi(t)\rangle$, причем с сохранением длин векторов, мы уже не можем утверждать, что у нас имеется унитарное преобразование всего пространства состояний, как для стандартной квантовой механики.

К тому же, вычисления показвают, что моделирование по предложенному алгоритму происходит с некоторым замедлением по сравнению с решением квантового основного уравнения. Мы покупаем пространство, платя временем. Такая ситуация уже встречалась раньше, в алгоритме Залки-Визнера. Так же, как и в том случае, эта цена оправдана, так как экспоненциальный рост размерности пространства является здесь наиболее критичным препятствием.

Включение в нашу модель окружения - огромное достоинство по сравнению со стандартным подходом. Плата за него разумна: это некоторое замедление процесса моделирования и известная *индивидуализация* эволюции, когда различные начальные векторы будут изменяться вместе с расстоянием между ними.

8.10.3 Выводы

Мы построили эффективную замену квантового основного уравнения в виде схемы итерационного алгоритма, задающего изменение во времени вектора чистого состояния $|\Psi(t)\rangle$. Эта схема охватывает как случай КЭД в полостях, возможно, неидеальных, так и случай распределенной атомной системы в открытом пространстве.

У нашей алгоритмической схемы имеется два основных достоинства по сравнению с КОУ. Первое состоит в том, что данная схема полностью учитывает возможную память окружения в виде возврата вылетевшего фотона или обмена фотонами между разными локациями. Второе достоинство в том, что наша схема оперирует с чистым состоянием, а не с матрицей плотности, как КОУ. Для сложных систем, состоящих из сотен атомов, это преимущество очень важно, так как компьтерная память, необходимая для хранения матрицы, растет как квадрат длины вектора.

Предложенная схема хорошо приспособлена для распаралеливания и реализации на распределенных вычислительных системах. Наконец, она методологически более



Рис. 8.11: Графы переходов для модели Тависа-Каммингса с вылетом фотона из полости. Слева - для начальной энергии $\hbar\omega$, справа - для начальной энергии $2\hbar\omega$. Направление толстых стрелок может быть противоположным, или реверсным, в зависимости от выбора вероятностного распределения \mathcal{P} .

проста: вероятность здесь не делится на класическую и квантовую, как при работе с матрицами плотности. Данная алгоритмическая схема не столь универсальна, как КОУ, так как она применима только к случаю обмена фотонами или фононами с окружением, и не охватывает иные типы декогерентности, например, атомные операторы типа $\sigma^+\sigma$, встречающиеся в некоторых моделях релаксации. Однако фактор обмена бозонами с окружением - достаточно важен для сложных немарковских процессов с содержательным сценарием, и здесь наша схема имеет неплохую перспективу.

Отметим также важную особенность предложенного итерационного алгоритма, отличающую его как от уравнения Шредингера, так и от КОУ. Если последние два уравнения были достаточны для описания динамики (при заданном начальном состоянии), то для нашего алгоритма это не так. Он содержит вероятностное распределение \mathcal{P} , которое определяет фактически интенсивность перемещения фотонов между различными локациями, например, между оптическими полостями. Эта операция для фиксированного \mathcal{P} необратима и она должна быть задана прежде, чем начнется компьютерное моделирование.

Рассмотрим графы переходов между состояниями, которые индуцируются гамильтонианом Тависа-Каммингса для одной полости, для которой возможен улет фотонов в открытое пространство с возможностью их перемещения в другую локацию. Эти графы показаны на рисунке 8.11.

Заметим в заключение, что итерационный алгоритм для фотонной машинерии

обратим в том смысле, что улет фотонов и их прилет имеют одну и ту же форму. Только донор и акцептор меняются местами: если для улета фотонов донором будет состояние с близкими фотонами, а акцептором - состояния с далекими фотонами, то для прилета все будет наоборот. Это, в известной мере, сближает наш итерационный алгоритм с унитарной динамикой, так как для нее обращение времени эквивалентно замене константы i на -i. Это может оказаться полезным для обучения квантовой нейронной сети, алгоритм которого излагался в 7.8.

Глава 9

Квантовая метафизика

9.1 Введение

В предыдущей главе, в разделе 8.3 мы занимались простейшей химией на основе построенных нами по аналогии с КЭД конечномерных моделей. Мы выполнили задачу включения в компьютерные модели электромагнитного поля. Масштабирование таких моделей на многочастичные ансамбли требует применения методов отбора рабочей области, что было с общих чертах описано в главе 7. Предназначение конечномерных моделей химии заключается в моделировании образования конденсата атомов водорода или молекул воды и исследования свойств такого конденсата, или аналогичных задач с однородными ансамблями частиц, взаимодействующих с полем. Это - интересный и весьма широкий круг задач (см., например, [95]), в которых нас будет интересовать лишь очень малая часть, примыкающих к биологии. Цитоплазма живой клетки подобна такому конденсату.

Однако дальнейшее масштабирование компьютерных моделей реальности требует исследования более сложных систем, чем простые конденсаты. Это - по-настоящему сложные системы, эволюция которых определяется заложенной в них информацией: живые существа. Именно поведение живого является конечной целью квантового компьютинга.

Широко распространенное представление о невозможности анализа живого методами физики является глубоким заблуждением. Более того, это представление, ставящее барьер между точным и гуманитарным знанием, имеет политические корни. Квантовые представления работают и в биологии, и в гуманитарных науках, изучающих сообщества. Эти представления не формулируются явно, они имеют форму "скрытых знаний" о реальности. И квантовый компьютинг систематизирует такие знания, делая их, тем самым, открытыми для всех желающих их иметь.

Химия как таковая никогда не может иметь универсального компьютерного симулятора, так как никакой алгоритм не может описать хаос. Компьютерный симулятор химии может относиться только к простым реакциям, потолок здесь - описание более или менее простого конденсата. Сложная химия, обладающая интересными сценариями, относится к биологии - формально более высокому уровню организации материи. Точно также и сама биология может описать лишь малую часть жизни простейших, обладающих автономными механизмами жизни, "существ", типичным представителем которых является цепочка РНК, способная к репликации в растворе, содержащем нуклеиновые звенья, а также сообществом таких "существ", которое можно назвать "живым конденсатом". Примером такого "конденсата" является серая слизь - монстр Шпигельмана - Орджела (см. [96]). Это не то, что можно считать полноценной жизнью, это ее эрзац.

Жизнь - это потенциально не ограниченная лестница, вершина которой скрыта от нас небесами и доступная нам часть ее ограничена по времени нашей жизнью. Но квантовый компьютинг дает нам метод подъема по этой лестнице. Наши химические модели имеют в виду ту химию, которая работает в живом, где нет проблемы выбора из неимоверного числа каналов реакции, нет проблемы анализа, под каким углом подходят друг к другу нуклеиновые звенья при формировании цепи ДНК или РНК. В наши моделях хаос вынесен за скобки или включен в сам формализм в виде квантового вектора состояния, и потенциальной возможности (только лишь возможности!) применения правила Борна.

Метод отбора рабочей области объединяет модели систем и процессов разной сложности: наиболее простой - конденсата, более сложной - реплицирующейся "серой слизи", и еще более сложной - бактериома с содержательной информацией в ДНК. Стартуя с вычислительной эвристики, описанной в разделе 7 и применимой к конденсату, мы приходим к биологической эвристике естественного отбора, характерной для существ, обладающих ДНК. Таким образом, механизм отбора по ДНК получает точную математическую форму, сводящуюся к оптимальной экономии вычислительных ресурсов.

Если константа Q из соотношения "сложность - точность" квантовых состояний (см. 7) не превосходит нескольких десятков, так что число 2^Q всех состояий в рабочей области попадает в сферу применимости компьютера, можно считать наш метод применимым для предсказания поведения "серой слизи".

Продвинуться же дальше - в область настоящей биологии, начинающейся с бактериомов, можно только четко связав эвристику отбора рабочей области с биологическим естественным отбором по ДНК.

Мы вынуждены немного углубиться в онтологическую сторону квантовой теории, проявляющуюся в ее статистическом характере. Статистическая форма представления динамики вектором состояния $|\Psi(t)\rangle$ имеет две особенности. На первую обращали внимание практически все исследователи: вектор состояния *не описывает* индивидуальные события, он имеет отношение только с огромными ансамблями одинаково приготовленных объектов, вроде атомов водорода. Возможность приготовления таких обсолютно не отличимых друг от друга объектов: атомов, молекул, или состояний поля, дается самой Природой, снабжающей нас неисчислимым количеством идентичных микрообъектов. При этом исход *отдельного измерения* мы никак не можем предсказать с помощью квантовой теории, только вероятности, которые получаются лишь многократным повторением (или выполнением в параллельном режиме) одного и того же измерения над всякий раз разными объектами, взятыми из приготовленной серии идентичных объектов.

Из этой, статистической, стороны квантового метода, вытекает принципиальное незнание того, что же призойдет в отдельном, индивидуальном случае, при наблю-

дении конкретной молекулы или конкретного атома. Такой индивидуальный атом представляется, следовательно, в виде "вещи в себе", поведение которой недоступно нашему предсказанию, а отдано целиком на "волю" этого индивида. Это наиболее рельефно проявляется, если распределение исходов наблюдения, получаемое по правилу Борна $p_j = |\langle \Phi_j | \Psi \rangle|^2$, имеет равномерный характер, при котором все p_i почти одинаковы. Мы можем предсказывать индивидуальное поведение лишь если только одно из чисел p_j велико (близко к 1), а все остальные малы - этот довольно редкий случай имеет место, например, при работе алгоритма Гровера.

С другой стороны, если число наблюдаемых состояний $|\Phi_j\rangle$ (число значений j) велико, львиная доля p_j будет мала настолько, что она превратится в ноль, и тогда измерение даст определенный, предсказуемый результат. В этом случае стандартный вектор состояния $|\Psi\rangle$ превратится в выбор между тем или иным квантом амплитуды, то есть будет описывать уже не статистическую выборку с безликими идентичными объектами, а индивидуум, то есть ту самую вещь в себе, которая скрыта от нас в стандартном векторе состояния. Переход к индивидуальному исходу измерения, произведенный через дискретизацию амплитуды, есть переход от коллективного, внешнего описания к индивидуальному, при котором то, что было вещью в себе, становится самим индивидом, его личной судьбой.

В метафизическом плане это - граница между жизнью и смертью: статистику можно набрать лишь на мертвом материале, живое же всегда индивидуально, так как обладает *самосознанием*, и, следовательно, по-крайней мере, потенциально, свободой определения собственной траектории, которая совсем не обязана подчиняться диктату некой "волновой функции".

Кроме того, известные попытки какого-либо "объяснения" самого феномена Жизни через стандартные физические приемы почти всегда завершались ничем. В качестве примера приведем известный эффект Фрелиха, который состоит в повышении населенности низкочастотной части колебательного спектра в конденсате при его накачке фононами высшей частоты. Этот эффект соответствует кругообороту энергии нашей планеты, которая получает фотоны высокой частоты от Солнца, испуская в космос энергию в инфракрасном диапазоне. Такое превращение энергии характерно и для живых существ; с одним из его проявлений мы уже встречались на примере эффекта DAT в зеленых серных бактериях.

Из этого физического эффекта делался далеко идущий вывод о том, что общество подобно конденсату Фрелиха ([98]), и цитоплазма живой клетки представляет собой именно такой конденсат ([99]; о биологическом значении данного эффекта сам его автор писал в книге [97]). Весьма вероятно, что этот прием объясняет, хотя бы частично, роль квантового дальнодействия в биологии. Однако конденсат Фрелиха не может служить моделью цитоплазмы живой клетки по очень простой причине. Строительство цепочки ДНК или РНК - главный процесс, который должна обеспечивать цитоплазма, нуждается в быстрой доставке нужно нуклеинового звена к месту сборки. Это предполагает хаотическое поведение вещества цитоплазмы, что несовместимо с конденсатом, в котором молекулы упорядочены. Такое упорядочение, даже если и имеет место, то в очень ограниченном промежутке времени.

Увы, процесс жизни опирается на хаос, и полностью описать его через конденсированное состояние вещества невозможно. Сложность живого создается отбором, и хаос нужен только для эффективности такого отбора. Например, построение комплементарной цепочки ДНК к уже имеющейся одинарной цепочке происходит шаг за шагом, так что в любой момент необходимо выбрать из окружающей цитоплазмы нужный нуклеотид: для аденина комплементарным будет гуанин, для тимина цитозин. К точке сборки в результате хаотического движения нуклеатидов подходят различные звенья, но только комплементарный нуклеотид может надежно встроиться в точку сборки. Любой другой не сможет прикрепиться к растущей цепи прочно и будет оттеснен другими претендентами; хаотическое движение нуклеатидов в цитоплазме как раз и обеспечивает выбор нужного звена, которое, папав в точку сборки в результате хаотического движения, встроится в растущую цепь.

Вторая особенность квантового подхода, о которой не упоминают в литературе, заключается в выборе момента измерения. Говоря о динамике вектора состояния $|\Phi_j(t)\rangle$, мы должны всегда подразумевать фиксацию вполне определенного момента времени t, в который измерение объекта с данным вектором состояния производится. Потому что измерение необратимо меняет сам вектор состояния, так что после этого момента у нас будет уже совсем другая функция $|\Psi(t + dt)\rangle$, которая может сколь угодно сильно отличаться от $|\Phi_j(t)\rangle$, той, которая была перед моментом измерения. Электрон, координату которого мы измерили очень точно, в следующий момент, сколь угодно близкий к моменту измерения, улетит за пределы нашего поля зрения - таково соотношение неопределенностей "координата - импульс" $xp = \hbar$. Так что едва ли полностью корректно говорить именно о *динамике* вектора состояния; правильно говорить о *переходе* от одного состояния $|\Psi(0)\rangle$ к другому состоянию $|\Psi(t)\rangle$ в определенный момент времени t.

Это также подразумевает дискретность самого времени и формальный разрыв с абсолютным приоритетом идеологией математического анализа, то есть признание дискретности и важности фиксации конечного размера зерна разрешения всех без исключения физических величин. При этом мы, разумеется, не отказываемся от аналитических методов вообще; надо всего лишь помнить о их ограниченности в случае сложных систем, которыми мы занимаемся.

Сложные системы - это живые организмы и их сообщества. Именно биология только и может дать нам эвристику сложности, которую невозможно вывести из физической прибористики, и которая абсолютно необходима для наших целей. Но мы не можем здесь углубляться в гигантский фактический материал биологии; рассмотрим только квантовый подход к человеческому обществу как наиболее сложной системе, имеющей биологическую основу.

Наш интерес к этому предмету продиктован тем, что политика лежит в основе любого научного познания, хотя это обстоятельство редко осознается учеными, занятыми своими узкими задачами. Мы смотрим на мир с человеческой точки зрения, и не имеем никакого источника объективности вне социума в его широком понимании.

Наш подход несколько нарушает естественно научную традицию, согласно которой политика базируется на биологии, а не наоборот. И так называемый редукционизм заставляет искать биологические корни политических явлений. Между тем физика говорит о том, что взаимодействие всегда взаимно. И не следует рассматривать политику как простое следствие биологии; напротив, именно политика в ее широком понимании лежит в основе биологических изменений в человеческом обще-

9.1. ВВЕДЕНИЕ

стве. Так и в живой природе велика роль глобального управления, которое можно назвать политикой в широком смысле слова. Хотя такая "политика" в применении, например, к эпохе трилобитов, звучит очень странно.

Тем не менее, признавая политику источником эвристики для теории сложных систем, мы достигаем еще одного преимущества: мы избегаем глубокого погружения в квантовые основы биологии, ограничившись довольно бедными схемами. Биология настолько обширный предмет, что детальный разбор даже ее небольшой части, прямо относящейся к уже упомянутым квантовым эффектам, потребовал бы еще одной книги.

9.2 Квантовая био-политика

Итак, мы будем лишь косвенно касаться биологии, говоря о био-политике.

Социум, состоящий из людей, есть наиболее сложная система, из непосредственно доступных нашему наблюдению. Поэтому экстраполяция квантовых методов на социум для управления им имеет огромное значение. Политика обычно трактуется как занятие профессионалов - глав государств и их аппарата, парламентариев, высших лиц судебной системы, а также элиты науки и бизнеса, но это лишь одна сторона политики. Другая сторона состоит в том, что в политическом процессе участвует каждый член общества, пусть и не всегда осознанно. Поэтому выработка политической линии есть дело всех, а не только элиты. Управление людьми только тогда бывает эффективным, когда они разделяют как цели, так и методы этого управления.

Такая дуальность подразумевает объективный подход к социуму, не зависимый от личных или клановых пристрастий, что возможно лишь при применении физических методов. Возможность описания явлений в человеческом обществе через законы, подобные физическим, составляет суть так называемой социофизики. Ее история есть история самой социологии, и связано с именами Томаса Хоббса, Сен-Симона, Августа Комта, Адольфа Кветелье и ряда других. Известная периодичность политических и социальных процессов естественно приводит к мысли о возможности описания таких процессов с помощью формального аппарата квантовой физики, где корпускулярноволновой дуализм присутствует изначально. Успех такого направления привел бы к синтезу естественного и гуманитарного знания, столь желательному для построения точных моделей общественных процессов.

В социофизике мы должны всегда иметь в виду как прочный базис точного естествознания - биологию и физику, на которой зиждется вся социология, равно как и политика, так и ограниченность традиционных физических методов в применении к такому объекту, как социум, иначе мы впадем в антинаучную ересь.

Применение квантовой теории к сложным системам началось только в конце 20 века, с проекта квантового компьютера, до этого физика занималась системами простыми. Многочисленные эксперименты по квантовому компьютеру показали наличие ограничения на применение квантовой физики; ограничения, связывающего сложность квантового состояния с возможной точностью его описания (см. (6.17)). Это соотношение мы уже обсуждали выше. Его смысл: для сложных систем и процессов нельзя делать точные прогнозы в том же смысле, что и для простых систем и процессов. Выводы социофизики не могут иметь столь же точную форму, как теория атома; соотношение точности и сложности работает неукоснительно.

Из этого соотношения, в частности, следует невозможность слишком малых по абсолютной величине амплитуд λ_j , так как иначе константа Q должна была бы быть бесконечной. Игнорирование малых амплитуд - общепринятый прием в физике; для сообщества это есть форма социально - биологического отбора, избавляющая популяцию от маргинальных частей.

Для сложных процессов само понятие точности надо понимать по-другому, нежели в физике; только тогда откроется возможность сделать очень полезные практические выводы. Сложнейший процесс жизни очень точно детерминирован одной единственной молекулой - ДНК. Такой детерминизм, установленный многочисленными опытами, говорит о возможности построения компьютерных моделей общества, моделей, обладающих предсказательными свойствами. Более того, опытные политики знают - из опыта - ряд принципов, на которых должны основываться такие модели, и пользуются этим знанием. Квантовый же подход к социологии позволил бы придать этим знаниям объективную форму, сделав их, таким образом, доступными широкому кругу лиц. Это было бы, безусловно, огромным шагом вперед.

Эксперименты говорят в пользу того, что константа Q в соотношении (6.17) не слишком велика; вероятнее всего, она не превосходит нескольких десятков, так что современные суперкомпьютеры способны работать со строками длины 2^Q . Таким образом, в принципе возможно моделирование на квантовом (предсказательном) уровне даже таких сложных процессов, как социальные. А значит, можно и эффективно управлять такими процессами, достигая поставленных целей, при условии их разумности.

Мы начнем с очень простых и очень грубых моделей социума, основанных на бинарной логике. Уже для таких моделей квантовый подход способен объяснить важные явления.

Первый шаг в этом направлении сделал Андрей Хренников, предложивший понятие социального лазера ([78]), как механизма взаимодействия социума и поля возбуждения. Элементарная единица социума - социальный атом (см. [79], [78]) - это объект, который может находиться только в двух возможных состониях: основном (спокойном) и возбужденном. Переход атома из возбужденного состояния в основное сопровождается испусканием кванта (порции) психического возбуждения. Поглощение такого кванта возбуждения другим атомом, который находится в основном состоянии, сопровождается переходом атома в возбужденное состояние. Мы, таким образом, имеем простейший динамический сценарий, состоящий из обмена возбуждениями между двумя атомами, которые поочередно находятся то в основном, то в возбужденном состоянии, обмениваясь квантами возбуждения.

Хренников отождествил кванты психического возбуждения с фотонами - квантами электромагнитного поля. Электромагнитное поле подразделяется на так называемые моды - части, каждая из которых характеризуется определенной частотой и направлением распространения (импульсом), а также другим направлением (поляризацией), вдоль которого действует само возбуждение. При этом импульс и поляризация взаимно ортогональны. Можно сказать, что мода - это полная характеристика возбуждения данного типа атомов, и фотоны данной фиксированной моды неразличимы, так что имеет смысл говорить только об их общем числе, а не о индивидуальности каждого кванта. Именно так устроено и психическое возбуждение: атом, поглотивший какой-либо фотон, не знает, и не может знать, кто именно его испустил; у фотона нет истории, есть только принадлежность к данной моде.

Если атомов много, фотоны, которые они испускают, не знают, какой именно атом их испустил, и это приводит к удивительным свойствам электромагнитного поля, в точности совпадающим с реальным психическим возбуждением. В случае многоатомной системы, таким образом, имеет смысл говорить не о психическом, как для одного атома, а о социальном возбуждении. Такой ансамбль одинаковых социальных атомов, настроенных на фиксированную моду, и предложен в [78] в качестве самой примитивной квантовой модели социума. Классическое состояние такого социума есть строка вида

$$|j\rangle = (n^j, a_1^j, a_2^j, ..., a_n^j)$$
(9.1)

где n = 0, 1, 2, ... - число квантов в поле социального возбуждения, а $a_1, a_2, ..., a_n$ - числа из множества $\{0, 1\}$, характеризующие состояния атомов нашего ансамбля. Атомы могут обмениваться с полем своими возбуждениями, и через поле взаимодействовать друг с другом. Например, ансамбль двух атомов может находиться в состоянии (0, 1, 0), и перейти в состояние (1, 0, 0), из которого в следующий момент перейти в состояние (0, 0, 1). На социальном языке это означает, что сначала первый атом передает возбуждение полю, и сам успокаивается, а на втором шаге поле передает возбуждение второму атому, который переходит в возбужденное состояние. Такой простейший динамический сценарий очень грубо описывает диалог двух супругов, в ходе которого они обмениваются своими возбуждениями.

Этот подход дает первую возможность применения точных методов квантовой теории к социологии. Для этого надо сделать еще один, очень важный шаг - переход к множественности описания процесса. От классического описания состояния социума вида (9.1) нам надо перейти к квантовой форме состояния. В реальной ситуации мы никогда не знаем точно, в каком именно состоянии находится тот или иной атом, и в каком состоянии находится поле возбуждения. Эта информация всегда скрыта от нас, так как никакой социальный опрос не может дать верной картины: сам факт опроса уже ее меняет! Поэтому нам надо представлять *квантовое состояние* нашего ансамбля "поле возбуждения + социальные атомы" в виде линейной комбинации (так называемой суперпозиции) состояний вида (9.1), а именно, в виде суммы

$$|\Psi\rangle = \sum \lambda_j |j\rangle \tag{9.2}$$

где $|j\rangle$ имеем вид (9.1). Здесь λ_j - комплексные числа, называемые амплитудами состояний $|j\rangle$, так что $|\lambda_j|^2$ будет вероятностью нахождения данной системы в состоянии $|j\rangle$ при стороннем наблюдении данной системы. Мы, таким образом, приходим к стандартному квантовому формализму для социума. Изменение во времени данного состояния в простейшем случае должно определяться формулой

$$|\Psi(t)\rangle = U_t |\Psi(0)\rangle \tag{9.3}$$

где $|\Psi(t)\rangle$ - состояние в момент t, $|\Psi(0)\rangle$ - состояние в начальный момент t = 0, U_t - унитарный оператор эволюции, имеющий вид

$$U_t = e^{iHt}$$

для некоторого гамильтониана *H*, который может зависеть от времени *t*. Например, мы можем изменить силу взаимодействия атома с полем возбуждения, сделав эту силу малой (социально неактивный атом) или, наоборот, большой (сильно возбудимый атом). Или мы можем добавить в поле дополнительные фотоны, усилив его возбуждающее воздействие на атомы.

Эта квантовая конструкция имеет в применении к социуму глубокое политическое следствие. Зная начальное состояние социума можно, варьируя оператор *H*, добиться перехода социума почти в любое желаемое состояние. Это и есть квантовое управление, которое можно назвать квантовой политикой. Более детальное описание социального возбуждения можно получить, если эволюцию рассматривать не как применение только одного оператора U_t , а в виде шага итерационного алгоритма, описанного в парагафе 8.10.1. В этом случае можно представить распределение социального возбуждения на удаленные части социума, например, из одного города в другой.

9.3 О социальных эффектах, объяснимых в рамках двухуровневой модели

Первый эффект, объяснимый в рамках модели двухуровневых социальных атомов - это эффект неожиданного резкого возбуждения социальной энергии при большом их числе, его можно назвать эффектом толпы. Этот эффект следует из бозонной природы электромагнитного поля, в котором его кванты возбуждения - фотоны стремятся оказаться в одном состоянии друг с другом. Если в поле есть n фотонов, то присоединение к ним еще одного происходит с интенсивностью $\sqrt{n+1}$ - математически это выражается видом оператора рождения фотона a^+ , который действует на состояние поля с n фотонами как

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{9.4}$$

то есть не просто добавляет фотон, а еще и делает это с интенсивностью, растущей с числом уже имеющихся фотонов! Это свойство электромагнитного поля непосредственно вытекает из уравнений Максвелла в квантовом представлении. Реальное социальное возбуждение очень сложно, но в конечном счете оно сводится именно к электромагнитному полю как фундаментальномй объекту физики.

Если изобразить на трехмерном графике вероятность нахождения всех атомов в возбужденном состоянии, то для большого числа атомов получится рисунок 9.1. Это результат численного моделирования унитарной динамики в модели Тависа-Каммингса ([80], [81]), которая в точности соответствует нашему представлению социальной динамики системы социальных атомов и поля возбуждения. Мы видим, что резкие пики возбуждения всех атомов сменяются продолжительными периодами неполных возбуждений, когда только некоторая часть атомов возбуждена, а другие находятся в спокойном состоянии.

Этот эффект Хренников назвал социальным лазером¹. Хотя в реальном лазере задействованы несколько уровней энергии, наша двухуровневая модель верно отражает главный смысл лазера: так называемая инверсная населенность, когда все атомы оказались в возбужденном состоянии, ведет к лавинообразному, быстрому выбросу энергии возбуждения, и ведет к релаксации всех атомов, при которой все они отдают энергию полю. В книге [78] приведены многочисленные примеры действия социального лазера; учет этого эффекта необходим для выработки верной политической линии, и все опытные политики имеют четкое представление об этом

¹Более точно, "социальный лазер" Хренникова заключается в следующем. Если множество атомов, имеющих спектральный граф переходов, изображенный на рисунке 9.2, "накачать" возбуждением, переведя в состояние $|1\rangle$, а затем дать импульс фотонов перехода $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$, то будет наблюдаться именно этот массовый переход, лавинообразно нарастающий со временем, из-за бозонной природы поля возбуждения. Это будет происходит несмотря на то, что переходы вида $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ или вида $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ были бы более вероятны, не будь этого "затравочного" импульса.



Рис. 9.1: Эффект толпы в примитивной модели с-атомов выводится как результат численного моделирования динамики атомов и поля в оптической полости, модель Тависа-Каммингса. Атомы разделены на 2 одинаковые группы, так что возбуждение одной группы при спокойном состоянии другой чередуются со спокойным состоянием первой и возбужденным состоянием второй группы. Тот же эффект наблюдается и для одной группы, которая обменивается возбуждением с полем. Координаты: время, базисные состояния, вероятности состояний. Острые пики соответствуют состояниям, в которых все атомы данной группы возбуждены. Видно, что такие тотальные состояния резко наращивают вероятность, и так же резко ее теряют. Эффект толпы контрастирует с рабиевскими осцилляциями для одного атома - там вместо пиков имеется синусоидальная динамика

эффекте толпы и об опасности, который он представляет для управленца. Роль же квантовой модели - в точной формулировке этого эффекта, позволяющей связать его с другими, менее очевидными, а часто и просто контр-интуитивными эффектами социальной динамики.

Второй эффект, вытекающий из нашей модели - консервация возбужденного состояния атомов в случае интенсивного удаления фотонов; он называется квантовым бутылочным горлышком (см. [85]). Мы можем удалять из системы кванты поля социального возбуждения, и чем интенсивнее это делать, тем дольше социум будет находиться в возбужденном состоянии, при котором атомы медлят отдать свои возбуждения полю. Интенсивные меры по успокоению социума ведут к консервации его возбуждения, когда атомы держат в себе энергию, которая при отсутствии внешних успокаивающих мер была бы быстро отдана полю возбуждения. Можно найти подобные примеры в динамических сценариях реальных социумов, когда для успокоения толпы лучше ничего не предпринимать, чем пытаться взывать к здравому смыслу социальных атомов, у которых он отсутствует.

Такая ситуация сложилась в поздний период существования СССР, когда неразумные меры, призванные из года в год воспитывать взрослых и самостоятельных людей приводили к консервации их возбуждения, что и проявилось в известных событиях 1991 года.

Квантовое бутылочное горлышко объясняет также психологический "эффект испуга", когда чрезмерная востребованность некоторого динамического перехода дает неожиданный противоположный результат (см. рисунок 9.2).

Третий эффект - транспорт энергии, поддержанный дефазировкой- DAT. Этот механизм был впервые открыт в светособирательном комплексе зеленых серных бактерий (см. [84]); математическое описание можно найти в [83]). Транспорт энергии между разными социумами - необходимый процесс как в живой клетке, так и в государстве, без которого невозможно его нормальное существование. Рассмотрим трансфер социальной энергии между несколькими социумами, на который оказывает влияние некий хаотический фактор, нарушающий унитарную динамику - так называемая дефазировка. В физических системах это может быть, например, тепловой шум. Оказывается, такой фактор может оказывать неожиданное положительное воздействие на трансфер возбуждения. Это противоречит интуиции: известно, что тепловое воздействие ухудшает проводимость. Классическая аналогия есть в дорожном трафике: равномерность неважных дорожных условий часто ведет к контр-интуитивному повышению проводимости по сравнению с фрагментарным улучшением дороги. Все автомобили в таких условиях движутся с одинаковой и постоянной скоростью и не тратится время на разгоны и торможения, характерные для ситуации с некоторыми фрагментами хорошей дороги, когда разница мощности двигателей порождает сумятицу, тормозящую общее движение.

Этот эффект объясняет и преимущества социальной уравниловки перед свободным предпринимательством в некоторых случаях, когда важен именно общий прогресс. Например, этот фактор действует во время войны или стихийных бедствий, когда разные группы людей оказываются в принципиально разных условиях. Уравнивание возможностей людей, бьющее по незаурядным личностям, одновременно устраняет социальные конфликты; это - при умелом руководстве - приводит к так-



Рис. 9.2: Квантовый механизм "эффекта испуга". Чрезмерная интенсивность удаления фотонов а-приори наиболее вероятного перехода $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ ведет к преобладанию совершенно другого и менее вероятного перехода $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$

тическому успеху для всего общества.

9.4 Индивиды

Модель Хренникова и ее естественные обобщения, способна объяснить ряд социальных явлений и, после ее конкретизации подходит, как шаблон, для управления простейшим социальным ансамблем, потому что она предсказывает поведение массы социальных атомов, не обладающих свободой воли. Поведение таких атомов подчиняются заранее известным законам, что дает возможность весьма точного предсказания будущего их ансамбля в любой момент времени t.

Однако реальный социум устроен значительно сложнее. Индивиды не являются социальными атомами, во всяком случае, не все индивиды². Я считаю, что не существует универсального рецепта управления реальным социумом именно из-за свободы воли индивидов, которые ее проявляют. Любой такой рецепт будет с необходимостью ограниченным. Свобода воли и есть мотор прогресса, и его суть - в принципиальной непредсказуемости поведения реальных индивидов. Ценность имеет, таким образом, не только рецепт управления социумом, но и рецепт выживания индивида в этом социуме, или группы одинаково ориентированных индивидов.

Для цели выживания индивид должен иметь представление о всем социуме, как целом. Он должен обладать представлением о желательным состоянии всех социальных атомов в социуме, то есть содержать бинарные числа $a_1^j, a_2^j, ...a_n^j$, и число n для каждой моды. Иными словами, индивид должен быть самим базисным состоянием социума.

Если бы мы считали индивид социальным атомом, размерность пространства квантовых состояний социума уже для сотни таких атомов составила бы невооб-

²Это отмечается и в книге [78] - личность не должна быть социальным атомом.

разимое число 2¹⁰⁰, с которым не смог бы работать никакой компьютер. Но если личность трактовать как базисное состояние социума, то размер популяции совпадет с размерностью пространства его состояний, и даже для миллиарда личностей математические операции с таким пространством будут вполне доступны для существующих суперкомпьютеров.

Понятие индивида, или социальной личности, таким образом, радикально отличается от понятия социального атома тем, что личность фактически содержит в себе модель всего социума, или даже всей биоты, необходимой для его существования.

Из этого следует важный вывод: влияние индивидов друг на друга всегда взаимно. Гамильтониан есть эрмитова матрица, ее сопряженная совпадает с ней самой, так что амплитуда перехода индивидов $|j\rangle \rightarrow |j'\rangle$ комплексно сопряжена с амплитудой обратного перехода. Видимое нарушение этого правила в реальном социальном процессе связано только с нечистотой постановки эксперимента, когда во взаимодействии участвуют третьи акторы.

Трактовка индивидов как базисных состояний всего социума требует уточнения понятия социального атома, который является составной частью индивида. Социальный атом не есть личность, это простая функция личности, имеющая только 2 значения: 0 и 1. Два таких атома могут обозначать, например, нуклеотид, входящий в состав ДНК, и принимающий 4 значения: аденин, тимин, гуанин и цитозин. В бинарном коде можно закодировать и другую информацию, идентифицирующую личность, например, ее местоположение на земной поверхности или так называемые мемы; будем называть такую строку *оДНК - обобщенной ДНК*. Таким образом, один социальный атом будет принадлежать очень многим индивидам. Это позволит нам связать социологию с биологией: и включить в нашу модель концепцию эгоистического гена Докинза, которая назначает оДНК на роль главного актора биологической эволюции, отводя индивидам роль машин, служащих генам для собственного воспроизводства (см. [82]).

9.4.1 Уточнение основных понятий

Мы назвали социальным атомом некую функцию, нужную для жизни индивида. Если рассматривать эту функцию в отрыве от самого индивида, то число независимых функций будет ограниченным точно так же, как и число всех аминокислот, нужных для жизни. Это число не должно сильно превосходить 30. Но в состав оДНК должно еще входить пространственное положение индивида, так как от этого параметра непосредственно зависит взаимодействие с полем, а, следовательно, и связь с физикой. Кванты социального возбуждения так или иначе сводятся к настоящим фотонам, это самое главное в социофизике, без чего это направление потеряло бы смысл.

Если рассмотреть один индивид, то реально взаимодействовать через поле, сохраняя квантовую когерентность, могут только те атомы внутри этого индивида, расстояние между которыми невелико. Поскольку имеется некая предельная плотность индивидов, то есть их максимальное число в одной пространственной ячейке, число атомов, находящихся в когерентном состоянии, также ограничено. Пикообразное поведение социума, показанное на рисунке 9.1, проявляется только в той степени,
в которой сохраняется когерентность, так как это число квантовое явление. Если когерентность теряется, происходит простое суммирование вероятностей, а не сложение амплитуд, и начинает преобладать плавная, синусоидальная рабиевская осцилляция. Заметим также, что сам размер ячейки пространства зависит от частоты фотона возбуждения, что осложняет точный прогноз поведения социума.

Итак, индивид, взятый в своем мгновенном состоянии, есть его оДНК, которое включает в себя фактически, желаемое для него состояние всего универсума, нужного для его существования. В такой трактовке мы можем более точно интерпретировать эффект толпы, который ранее был сформулирован только лишь для социальных атомов, но не для индивидов. Атомы упорядочены в этом оДНК, так что каждый занимает вполне определенное место, от которого зависит интерпретация его состояния для данного индивида. Предположим, что за некий тип возбуждения отвечает только один, например, первый атом в любом индивиде. Тогда взаимодействие индивидов с полем возбуждения сведется к взаимодействию с полем только лишь одного атома, и мы получим картину плавных синусоидальных колебаний возбуждения так называемых рабиевских осцилляций. Этим типом динамики просто управлять из-за его предсказуемости.

Если общество реагирует на какой-то один раздражитель, например, на повышение пенсионного возраста, динамика возбуждения будет плавной: нарастание будет сменяться спадом по синусоиде. Справиться с этой проблемой относительно просто из-за предсказуемости реакции общества; например, можно просто изменить формы и условия перехода на пенсию.

Совершенно другая картина появится, если поле возбуждения связано с разными социальными атомами в одном и том же геноме. Разным индивидам может не нравиться разные вещи: одним - пенсионная реформа, другим - сложные условия для бизнеса, четвертым - плохое лечение и т.п. Причин может быть очень много, и за каждую отвечает определенный социальный атом, а возбуждаются они одной и той же модой поля. В этом случае у нас будет уже многоатомный ансамбль, для которого и появятся те резкие пики, изображенные на рисунке 9.1. Такой тип возбуждения делает управление им очень трудным из-за резкости и трудности предсказания момента его нарастания.

Реальные социальные предсказания требуют введения разных мод возбуждения, и, соответственно, многоуровневых социальных атомов вместо простейших двухуровневых.

9.5 Квантование социума

Квантовая социофизика исследует взаимодействие социума с полем возбуждения, которое приводит к динамике возбуждений социума. Однако реальные действия, приводящие к изменению самого социума не сводятся к одним лишь возбуждениям, такие действия есть вопрос политики. Здесь уже недостаточно использовать модель Тависа-Каммингса-Хаббарда, или ее многоуровневые обобщения, нужно вводить динамику атомов, и строить модели, подобные квантовым моделям химии. Математическая сторона состоит в детализации гамильтониана *H*, и мы не будем здесь углубляться в эту тему. Приведем только некоторые косвенные доводы в пользу именно квантового подхода к политике.

Неверно считать, что политические вопросы затрагивают только руководство государств или так называемую "элиту"; это дело любого индивида, поскольку от политики зависит его собственное будущее. Вопрос управления социумом в широком смысле слова - государственным управлением, сосуществует с другим вопросом - о том, как конкретной личности (или конкретному геному) выжить при этом управлении. Взгляд на политику внешний, управленческий, макроскопический, неизбежно должен быть дополнен внутренним - микроскопическим, личностным. Управление никогда не будет эффективным, если оно не принимает во внимание оба этих точек зрения, и полезная модель должна включать в себя обе эти стороны политики. Такая дуальность характерна только для квантово-механической модели реальности.

На сравнительно коротком отрезке времени, не превышающем одно столетие, где только и имеет смысл говорить о практической политике, интересы личности в основном представлены интересами той социальной, этнической или расовой группы, к которой она принадлежит. В квантовом представлении такие группы суть отдельные группы слагаемых в общей сумме базисных состояний вида (9.2). Правильное выделение таких групп в данный исторический момент определяет успех или неудачу политической линии.

В царской России политика Столыпина ставила во главу угла крестьянский вопрос, и Столыпин определил собственника как ведущую силу общества, на которую решил опираться, мотивируя такую расстановку приоритетов сельскохозяйственным характером российского государства. Ленин же выделил пролетариат как ведущую силу, и созданная им партия была, прежде всего, партией рабочего класса. Этот шаг уже предполагал конфронтацию с западной цивилизацией, так как ленинская, и, в особенности, сталинская Россия вставала на путь индустриализации, что создавало конкуренцию с Европой и Америкой, и определяло весь дальнейший путь конфронтации с ними, которую мы видим и в 21 веке.

Вторая ошибка Столыпина заключалась в недооценке психологического настроя различных групп россиян - того самого состояния, которое при квантовом подходе трактуется как вектор $|\Psi(t)\rangle$ вида (9.1) - с комплексными амплитудами. Комплексный характер коэффициентов λ_j хранит информацию о намерениях индивидов, намерениях, скрытых от прямого наблюдения, которые недоступны социальным опросам и имеют глубокие психологическое корни, ведущие в предысторию той или иной группы населения. Опора только на социологическую картину, на публично высказываемые мнения социума есть только работа с вероятностями $|\lambda_j|^2$, но не с фазами ϕ_j комплексных чисел $\lambda_j = |\lambda_j| e^{i\phi_j}$. В то время как динамику социума определяют именно эти фазы.

Для верной модели общества надо выявлять фазы вектора состояния $|\Psi\rangle$, и это возможно только при разных типах наблюдения, когда мы изменяем сами опросы, выходя за рамки шаблонных вопросов, типа "чего вы больше всего хотите". В психологии есть целые системы таких опросов, позволяющих выявить истинные намерения той или иной группы. В квантовой механике это означает измерения системы в различных базисах. Сам вектор состояния $|\Psi\rangle$ не может быть слишком большим, иначе работать с ним будет невоможно. Поэтому важно сконцентрировать все внимание на тех его участках, на тех индивидах, от которых динамика зависит в большей мере, что неизбежно обделит вниманием иные группы индивидов.

Правильным выбором в начале 20 века был рабочий класс, и именно этот выбор был сделан Лениным, что было одним из главных факторов победы его политической линии. Эта линия с необходимостью отнимала ресурс у крестьян. Политика коммунистов по отношению к ним была жесткой, однако эта жесткость не может быть объяснена исключительно необходимостью сосредоточить ресуры на индустриализации страны; изменение политики в сторону смягчения вызвали только крестьянские восстания 20-х годов. Традиционная лояльность крестьян к правительству позволяла провести индустриализацию и без подобных эксцессов, и крестьянские восстания невозможно объяснить, исходя из доводов экономики. Настоящее объяснение возможно только при учете всех факторов, включая личностные - именно такой синтез и обеспечивает вектор состояния социума.

Вопрос о группировке индивидов тоже имеет глубокие социально - биологические корни. По какому признаку группировать членов социума? Такая группировка уже затрагивает микроскопический уровень модели, зависящий от личного выбора индивидов, и мы не можем здесь дать никаких рецептов, кроме самых общих, видимых извне. Квантовая теория - линейна, и это означает, что изменение во времени различных групп совершенно не зависит от того, в какой момент происходит их взаимодействие - вчера или сто лет назад. Линейность есть автономность групп, когда путь каждой из них определяется только самой этой группой, но не другими. Математически это выражается формулой

$$|\Psi(t)\rangle + |\Phi(t)\rangle = U_t |\Psi(0)\rangle + U_t |\Phi(0)\rangle$$
(9.5)

где $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$ есть квантовые состояния разных групп индивидов, эволюция которых происходит не зависимо от эволюции другой группы. Между тем, состояние всего социума, состоящего из этих двух групп, есть сумма этих двух состояний. Между разными группами может происходить все что угодно, включая войну и геноцид, но автономность их эволюции не изменится. Взаимодействие скажется только на период, когда суммирование состояний резко изменит видимую картину вероятностей, и будет невозможно отделить одну группу от другой; как только такое различение станет возможным, эти группы "забудут" о том, что происходило в момент их коллизии! Генетическая память группы однозначно определяет ее динамику и может измениться только с изменением состава самой этой группы, но никак не под влиянием других групп.

Эту поразительную особенность квантовой эволюции иллюстрирует рисунок 9.3.

Генетический код любой группы социума очень консервативен, так как основан на биологическом атрибуте индивидов - их ДНК. Именно это и проявляется в линейном характере социального процесса, когда носителем генетической памяти является квантовое состояние данной группы.

При каких условиях группа индивидов (например, определенный этнос) может вообще исчезнуть? Число примеров такого рода в истории велико; взять, хотя бы, исчезновение коренного населения изолированных островов при их открытии европейцами. Рис. 9.3: Столкновение двух частей волновой функции (вектора состояния) в виде гауссианов: слева первый гауссиан стоит на месте, а второй движется влево. Хаос при столкновении сменяется полным восстановлением вида гауссианов в дальнейшем: движущийся гауссиан продолжает свое движение так, как будто никакого столкновения не было. Программный код из Математики



u, {t, 0, 60}, {x, -250, 250}]

 $\{\{u \rightarrow InterpolatingFunction[\{\{0., 60.\}, \{-250., 250.\}\}, <>\}\}\}$

 $\begin{aligned} &\texttt{Animate[Plot[Evaluate[Abs[u[t, x]] /. %], \{x, -250, 250\}, PlotRange \rightarrow \texttt{All}], \{t, 0, 60\}, \\ &\texttt{AnimationRunning} \rightarrow \texttt{False}] \end{aligned}$

Здесь действуют 2 фактора. Во-первых, невозможность четкого разграничения таких групп, занимающих один и тот же пространственный ареал и близких по генотипу, что ведет к ассимиляции или прямому геноциду; последний процесс не отражается на квантовом состоянии социума именно в силу близости таких групп - социология просто не замечает его. Во-вторых, рассеянные в пространственно генетическом универсуме части группы с малой амплитудой устраняются из всего социума при жестком отборе; это иная форма геноцида, когда уничтожаются индивиды рассеянные, и не могущие оказать сопротивления доминирующим группам при отборе.

Эволюционные преимущества в среднесрочной перспективе получают те группы, которые четко выделяются генетически от других групп, образуя своеобразное четко выделенное сообщество. В долгосрочной же перспективе такие участки, будучи оставленные в изоляции, неизбежно деградируют. Глобальные же преимущества получают группы, которые во-первых, можно четко выделить среди окружения, вовторых, которые занимают возможно большую часть пространственно - генетического универсума, и в-третьих, проявляют способность к эволюции. Примером такой группы является социум Китая.

Линейный характер политического процесса иллюстрируют отношения России и Германии: здесь генетическое разграничение довольно условно, но есть четкое пространственное разграничение. Столкновения этих стран в 20 веке никак не изменило векторов развития этих стран. Как только активная фаза прекратилась, после короткого периода восстановления, фактически совпавшего с возвращением выживших военнопленных, характер их развития, включая психологический настрой населения, полностью восстановил прежние черты, как будто ничего не произошло.

Возражения против квантовой трактовки политического процесса связаны только лишь с тем, что не учитывается очень существенный фактор - влияние других стран на политические события в Евразии. Это влияние - наличие других слагаемых в сумме (9.5) не позволяет провести "чистый эксперимент", который подтвердил бы верность квантового подхода к политике напрямую; этот же фактор внешнего влияния мешает и постановке подобного эксперимента и на биологическом материале, например, на бактериальных культурах, где постановка такого эксперимента представляется более реальной.

9.6 Естественный отбор и социальный рейтинг

Говоря о социофизике, мы не можем игнорировать гигантскую пропасть, разделяющую эти дисциплины. Если физика способна описать социальные процессы, она должна точно так же описывать и биологию, лежащую в основе социальных процессов. В особенности важно точное описание естественного отбора, лежащего в основе биологии, и до сих пор возбуждающего дискуссии о его природе. Например, Р. Докинз считает, что механизм отбора лежит в конкуренции геномов. Живые существа, по Докинзу, есть лишь машины, которые геном использует для своего размножения. В книге [82] он приводит ряд доводов, подтверждающих этот тезис, например, степень заботы о родственниках в зависимости от степени родства и от перспективности данного индивида для выживания генома.

Тезис Докинза подвергся критике со стороны биологов. В частности, из-за отсутствия целостного представления о эволюции, которое должно включать выбор полового партнера, который сильно отличается по ДНК. Неверно отождествлять личность с ДНК; она характеризуется еще и чем-то выходящим за пределы этой "главной молекулы". Докинз называет это "мемом", не расшифровывая значение этого термина.

Квантовый подход устраняет эти пробелы в описании эволюции, сохраняя, тем не менее, фундаментальную роль ДНК. Эта молекула будет представлять собой базисное состояние всей популяции, и даже всего мира в представлении данного существа. Мгновенное состояние индивида - это и есть его ДНК. Но сам индивид не сводится к своему мгновенному состоянию; ДНК само по себе - всего лишь мертвая молекула. Личность есть эволюция этого состояния во времени. Именно в такой эволюции проявляется то, что Докинз назвал мемами; это нечто определяет эволюцию, то есть саму жизнь.

Итак, математическая форма социума имеет вид (9.2), где мгновенные состояния индивидов имеют вид (9.1). Здесь a_j уже не будут бинарными значениями; в общем случае это будут ДНК всех существ мира, с той точностью, которая позволяется соотношением неопределенностей "сложность - точность" для квантового описания эволюции. Тогда вещественные неотрицательные числа $|\lambda_j|^2$ естественно отождествить с населенностями соответствующих геномов $|j\rangle$, или с жизнеспособностями данных геномов.

Здесь важно понимать, что представление (9.2) обобщенной популяции, включа-

ющей в себя всю биоту (и, возможно, то, что формально не принадлежит биоте, но необходимо для ее существования), не является единственно возможным. Например, обобщенная популяция, находящаяся в состоянии (9.2), может одновременно находиться и в любом другом состоянии вида

$$|\Phi\rangle = \sum_{j} \mu_{j} |j\rangle \tag{9.6}$$

с вероятностью $|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2$ - квадрат модуля скалярного произведения векторов $|\Phi\rangle$ и $|\Psi\rangle$ - таково свойство квантового описания состояний вида (9.2), вытекающее из вероятностной природы квантового состояния.

Практически, для целей управления, невозможно охватить все конфигурации молекул ДНК - есть предел для их общего числа в реальности, и этот предел составляет несколько миллиардов, в то время как всех возможных конфигураций - 4^{10⁹}, и это число не является реальным. В любой точной модели реальности необходимо жестко отбирать для работы состояния социума, которые имеет смысл рассматривать. Линейное пространство, порожденное этими, избранными состояниями, мы назовем рабочим пространством; его размерность намного меньше размерности полного пространства всех возможных состояний. Физический смысл имеет только это рабочее пространство, полное пространство есть математическая химера.

Механизм эволюции определяется квантовым гамильтонианом H, который выбирается заранее из физических соображений, так что имеет смысл говорить о действии этого гамильтониана на любой индивид, даже и не входящий в рабочую область; однако мы не можем говорить о "унитарной эволюции" всего полного пространства, которое есть химера, а только о унитарной эволюции рабочей области, к которой применимы все построения квантовой теории. Практически это означает, что мы не храним в памяти моделирующего компьютера всю матрицу гамильтониана H, а только правило, которое позволяет по заданным индивидам $|j\rangle$ и $|j'\rangle$ находить амплитуду $\langle j'|H|j\rangle$ перехода от $|j\rangle \ge |j'\rangle$.

В дикой природе существует естественный отбор, определяющий предельную численность особей любого вида. В человеческом обществе инструменты такого отбора легко привести; они дополняют естественные механизмы сокращения численности чрезмерно разросшейся неэффективной популяции и поощрение роста численности перспективной, но малочисленной. В цивилизациях отбор основан на деньгах и на социальных инструментах, включающих распределение финансов. Такой отбор создает выделенную группу индивидов, определяющих это распределение явно или неявно, которые становятся, таким образом, над всем обществом, определяя направление его развития; эта группа называется "элитой". Эта группа, на которой сконцентрирована такая часть амплитуды квантового состояния социума, которая определяет эволюцию этого состояния.

Члены элиты - совсем не обязательно формально причастны к явному распределению финансов. Здесь играет роль их личные возможности (модуль вектора состояния) и конструктивность их устремлений (последние иногда называют пасионарностью; в квантовой трактовке пасионарность - это градиент фазы ϕ амплитуды состояния $r \ e^{i\phi}$). Конструктивность устремлений есть конструктивность сложения амплитуд - необходимое условие вхождение в элиту; если индивиды имеют разные устремления, они не могут находится в элите, ибо их усилия взаимно уничтожатся. Существует понятие социального рейтинга, которое не всегда ясно формулируется. Каждому индивиду приписывается число, определяющее возможности его размножения. Такой отбор на основе рейтинга представляет определенную альтернативу денежному регулированию. Формально социальный рейтинг введен в КНР, однако он существовал и существует во всех странах, но не вводится формально. Его слабым местом является трудность масштабирования: формальный социальный рейтинг зависит от региона и от особенностей страны, тогда как финансы по своей природе транснациональны. Однако любой реальный отбор, не зависимо о его формы, является неким алгоритмом, и потому точное описание такого алгоритма имеет большую ценность.

Универсальным рейтингом индивида $|j\rangle$ в состоянии $|\Psi\rangle$ вида (9.2) является его амплитуда λ_j , и любой тип отбора в конечном счете сводится именно к этому рейтингу. Преуспевание конкретной личности связано со степенью конструктивности интерференции амплитуд ее близкого окружения. А это, в свою очередь, на большом отрезке времени, определяется степенью концентрации амлитуды в той компоненте $|\Psi'\rangle$ общего состояния $|\Psi\rangle$ всей популяции, к которой можно отнести данную личность, и степенью сохранности данной компоненты в течении многих поколений.

Докинз прав в том, что он связал социального индивида с геномом, сделав эволюцию генома точной формой социальной эволюции - на коротком отрезке времени, на несколько поколений, не больше трех, что он и проиллюстрировал в своей книге. Однако так нельзя объяснить политику - здесь интервал гораздо больше. Вместо социальных индивидов которые представляются геномами, в политике участвуют *личности*, которые представляютя не только геномом, но и мемом - это можно назвать обобщенным геномом, который только и может быть аргументом вектора состояния социума, когда мы говорим о политике. Личностный фактор в политике нельзя свести к "эволюции генома", как это делает Докинз по отношению к животному миру; этот особый фактор можно адекватно представить только на основе квантовых представлений об эволюции вектора состояния социума.

9.7 От индивида к личности

До сих пор речь шла о социальных индивидах и социальных атомах, из которых они состоят - с точки зрения социологии, когда нас интересовали вероятности, то есть не личные истории, а усредненные по большим выборкам значения того или иного обобщенного ДНК. Однако включение в модель биологического уровня требует более точной формулировки понятия родства и наследственности. Эта задача в полном объеме выходит за рамки данной работы. Мы сформулируем только общий подход к ней с точки зрения квантовой политики.

Мы трактуем социум как линейное пространство, базисом которого являются социальные индивиды. Тогда личность есть результат одного конкретного измерения социума. Мы используем здесь термин "личность" для того, чтобы подчеркнуть зависимость этого объекта от измерения. Личность есть акт самосознания, что в трактовке Пенроуза и Хамероффа есть коллапс вектора состояния всего социума.

Можно представлять личность как малую порцию амплитуды λ_i индивида $|j\rangle$ в

формуле (9.1). Такую порцию можно назвать квантом амплитуды, а само измерение состояния (9.1) трактовать как выбор этого кванта из всех возможных. Если личность есть результат измерения, то постоянные измерения будут давать сходные результаты, при условии, что интервал между ними очень мал. В этом состоит эффект Зенона, когда квантовое состояние "замораживается" в результате постоянных измерений. Так и оДНК личности остается постоянным, если под интервалом между измерениями понимать периоды сна, когда человек не осознает происходящее³.

9.8 Дискуссия

Представление о прогрессе требует выделение одного направления развития и одного биологического вида, который представил бы это направление. Распыление биоты, занимающей все возможные ниши для жизни и принимающей самые разнообразные формы, не противоречит, а подчеркивает роль главного направления. Такое направление - человечество. Но и в социуме господствует та же тенденция: его развитие руководится одним единственным потоком, и этот поток называется "свобода личности, которая может быть примером для ее ближнего круга". Это не социлизм и не капитализм; здесь речь идет именно о благе личности в смысле обобщенного рейтинга, основанного на модуле вектора состояния социума.

Именно постепенным, с массой обратных движений, с массой противоречий и войн, развитием этого потока мы обязаны теми плодами прогресса, которые стали общепринятыми. Обобщенный рейтинг личности может иметь и общественную форму - в виде механизма развития той или иной политической линии. Грубо говоря, успех политики зависит от того, насколько эта политика совпадает с личным интересом индивидов, обладающих - в сумме - наибольшим рейтингом; хотя такая формулировка не отражает в точности динамику вектора состояния социума. Более точное описание квантовой политики дает именно динамика этого вектора; грубое же описание способно как прояснить ситуацию, так и ввести в заблуждение.

Можно очень схематично прояснить общественную роль точного естествознания на примере событий начала 21 века, сделав некоторые выводы.

Во-первых, развитие фундаментального знания неотделимо от политической линии. Естествознание только кажется независимым от политики. В действительности выделение самих научных направлений продиктовано политической линией, которая господствует в обществе. Верно и обратное. Естествознание определяет политику на многие десятилетия вперед. Конкуренция научных концепций есть конкуренция политических линий. Теория естественного отбора Дарвина "победила" концепцию направленной эволюции Ламарка не потому что была верной; верной является именно теория направленной эволюции Ламарка. Дарвинизм был выгоден правящим кругам Англии, захватившей мировое господство, и стремившимся сделать его бессрочным.

³Замечание для физиков: мы предполагаем, что у гамильтониана H нет особенностей, характерных для механического оператора энергии $p^2/2m + V$, ведущего к соотношению неопределенностей "координата-импульс"; там измерение координаты приводит к полной неопределенности импульса, так что последующее измерение той же координты даст непредсказуемый результат. Эта особенность обходится при введении кванта расстояния и времени, то есть запрета на использование бесконечно малых величин.

Связь науки с политикой - интернациональна, как и политические общественные течения. Не играет роль, представители какой страны выдвигают те или иные научные идеи; их общее направление тесно связано с господствующей политической линией. Квантовые представления о материи развивались параллельно с русской революцией, и это - не случайное совпадение событий во времени. Объяснить саму революцию, исходя из классической социологии невозможно, причем именно потому что классические представления не содержат явно динамический компонент - фазу квантового состояния, и потому не способны к предсказательной силы моделированию.

Невозможно управлять обществом, не прибегая к его квантованию - управлению не абстрактными категориями, а конкретными личностями. Любая успешная политика фактически опирается на квантовые представления, хотя и неосознанно. В центре любой модели должна стоять личность; все же иные социальные характеристики, равно как и биоэтнические, социальные и религиозные особенности должны рассматриваться как атрибуты личности, а не как самодостаточные объекты. Презрение к личности, непонимание роли личных качеств, и следущее из этого непонимания зазнайство людей, случайно оказавшихся на вершине власти, привело, например, к распаду СССР. Здесь мы имеем пример того, как истинная элита разительно отличалась от формальной, что и привело к резкой корректировке курса страны, трактуемой часто как катастрофа, но именно так выглядит квантовая динамика с ее конр-интуитивными эффектами.

В условиях жесткого отбора личностей, вытекающего из дарвиновских представлений, а в квантовой модели из правила отбора базисных состояний рабочей области, мы получаем естественное объяснение видимым откатам в развитии любого сообщества, выступающим как смена элит. Элитой фактически является набор таких базисных состояний, вокруг которых группируется основная часть амплитуды - высокий горб на графике. Динамическая картина для распространения фотона в системе оптических полостей четко показывает смену элит, которая носит периодический и разрывный характер, когда одна элита перестает быть таковой, и уступает место другой элите, козникающей в другом месте рабочей области, продолжая, тем не менее, движение в прежнем направлении.

Такое поведение элит объяснимо из квантовых представлений. Продвижение фронта рабочей области в неиспользованную область универсума не может быть неограниченным; сила первой атаки ослабевает, "борьба" с нарастающими трудностями требует новых ресурсов, которые уничтожаются жестким отбором. Фронт рабочей области резко тормозится, порождая обратную волну, как если бы произошло столкновение с невидимым препятствием. Это препятствие - мнимое, оно порождено исключительно жесткостью отбора, но его эффект сходен с эффектом от реального потенциального барьера на пути фронта волны. Обратная волна порождает конструктивную интерференцию в "задней" части рабочей области, что и создает альтернативную элиту. Она продолжает ранее имевшее место движение, вступая на смену ушедшей старой элите, и повторяя ее судьбу. Общий характер движения не изменяется, но рельеф волновой функции претерпевает изменения, связанные со сменой элит.

В реальном политическом сценарии мы наблюдаем то же самое, как на уровне одной политической партии, так и на международном уровне. Откаты назад, трактуемые часто как некие "поражения" той или иной "идеи", в действительности есть просто временные коллизии, сопутствующие смене элит, и не меняющие общего движения.

Время СССР наглядно иллюстрирует такие волны, возникающие при интерференции прямого и обратного направлений движения. Ленинская гвардия, совершившая революцию, быстро уступила элитарное место выдвиженцам Сталина, которые подготовили модернизацию страны, позволившую выиграть войну. В свою очередь, эта элита была сменена контрэлитой так называемого развитого социализма, а затем и последней советской элитой, частично разрушившей страну, но не уничтожившей ее - страна возродилась на новой основе. Более того, ее элита сохранила генетическую связь со старой, советской элитой. Также как и даже такое потрясение, как революция 1917 года в России не нарушила полностью преемственность элит.

9.9 Выводы

Мы на ряде примеров показали важность квантового подхода к социальным процессам, при котором эволюция общества представляется как изменение во времени вектора состояния в линейном пространстве. Мы видим, что личность не может быть сведена к социальному атому - этот атом не есть активный субъект, а лишь объект манипуляций со стороны реальных акторов - индивидов. Индивид обязан включать в себя желаемое им состояние всех социальных атомов, и даже более того - желаемое состояние всей природы, необходимой для его выживания. Такой индивид надо трактовать как базисное состояние полного пространства квантовых состояний социума.

Любое политическое действие подразумевает планирование, то есть моделирование эволюции популяции и влечет жесткое ограничение на численность индивидов. Это ограничение выступает в виде правила отбора, которое присутствует в любой популяции не зависимо от своего официального статуса - как деньги, или как явно формулируемый социальный рейтинг. Такое правило отбора определяет родительство и судьбу детей.

Квантовый характер эволюции исключает ее детерминированный характер. Судьба индивидов, таким образом, не является жестко определенной, а зависит от их личных действий. Результирующая эффективность любой политической системы определяется направлением развития общества и тем, в какой степени ему удается избежать стагнации с одной стороны, и жестко регламентированного направления - с другой. Для этого отбор не может сводиться к сравнению с неким жестким числом, как деньги или в виде официально формулируемого рейтинга, начисляемого в виде баллов. Отбор происходит естественным путем, и искусство политики в том, чтобы законы наилучшим образом соответствовали такому пути.

Для выработки правильных политических решений необходим синтез естественных и гуманитарных знаний; барьеры между научными дисциплинами, равно как и между наукой и политикой - должны быть разрушены.

Глава 10

Диалоги 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.

10.1 Диалог 1

10.1.1 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. Важно только, чтобы это была истинная наука, а не ее имитация.

Дилетант: Вы, очевидно, шутите. Такого никогда не может быть.

Cnequanucm: 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...

Modepamop: Коллеги, я вынужден напомнить, что мы собрались для обсуждения квантового компьютера, а не экономической политики!

Cnequanucm: 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?

Cnequanucm: 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 дальнодействие? 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 дальнодействие 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?

Cnequanucm: 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 компьютинге 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 ощутимое. 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!

Cnequanucm: 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*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.

Cnequanucm: Xa-xa! 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.

10.1.2 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!

Cneциалист: 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 Харитоном молодые и еще парочка, и все. Студенты ломились 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 переменилось: 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.

Modepamop: Коллеги, вы вошли в клинч, и напоминаете персонажи из басни "Лебедь, рак и щука", постарайтесь найти общий язык.

10.1. ДИАЛОГ 1

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!

Cnequanucm: 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 квантом 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.

Cnequanucm: 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! *Cnequanucm*: 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. Прыжок от одного базисного состояния к другому, через краткий миг когерентности. И в этот миг надо уложить все управление.

Cnequanucm: 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.

Cnequanucm: 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...

Modepamop: 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.

10.1.3 Раунд третий, решающий, посвященный физике

Modepamop: 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: Такую 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.

Cneциалист: 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.

Cnequanucm: 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.

Cnequanucm: 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 гейтов в режиме реального времени, можно встраивать в суперкомпьютеры отдельные квантовые устройства, например, генераторы фотонных ЭПР- пар, и демонстрировать квантовое превосходство.

Cnequanucm: Пока это не слишком серьезное превосходство. Нужны оптические полости, а это дорогое оборудование. Причем удержать фотон там удается 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.

Cneциалист: 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?

Cnequanucm: 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...

Modepamop: 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 минимазации микросхем, и уже до десятка нанометров доходят по размеру транзистора. Гейты будут, я уверен. И мы доберемся до настоящего барьера, до констранты 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.

10.2 Диалог 2

10.2.1 Преамбула

Первый зритель: Признаюсь честно: я ставлю эксперимент выше теории, а практическую деятельность выше научного созерцания. Мое участие в этом диспуте имеет только ту пользу, что позволяет прояснить в самых общих чертах структуру человеческой деятельности и ее перспективы.

Второй зритель: Я изучил по диагонали материал книги и вижу, что она посвящена той сфере, которая охватывается электродинамикой и механикой. Это уравнения Максвелла плюс динамика Ньютона плюс квантовое представление этой теории. Обобщенная электродинамика. Потому что источник механики - тоже лежит в сфере электродинамики, так или иначе.

Первый зритель: Согласен. Но вот что интересно. Биология тоже, насколько я понимаю, принадлежит этой сфере - или я ошибаюсь?

Второй зритель: Формально да. А фактически - нет. Между физикой и химией с одной стороны, и биологией с другой, лежит пропасть сложности. А мы видим, что сложность - фундаментальное физическое понятие. Нет, сфера живого не может быть включена в обобщенную электродинамику! Это - отдельная сфера деятельности.

Первый зритель: Хорошо. Тогда политика (с экономикой, госуправлением, и т.п., всем тем, что касается человеческого общества) точно также отделена от биологической сферы.

Второй зритель: Именно так. У нас получилась классификация из трех больших сфер: Электродинамика, биология и политика. Большой треугольник.

Первый зритель: У меня ощущение, что здесь чего-то не хватает. Физика атомного ядра - это не электродинамика, хотя и строится по ее образцу. Это какая-то отдельная сфера деятельности.

Второй зритель: Давайте выделим ядерную физику в отдельную область. У нас получится тетраэдр - я нарисовал его на рисунке 10.1. И вот мета-модели на квантовой основе охватывают, пока что, только электродинамику, возможно, отдельный успех в направлении химии. У нас нет серьезного проникновения в биологию; эвристика отбора - не в счет. Также и в ядерной физике - здесь необходимо более глубоко поработать с моделями...

Первый зритель: Ага. Наверное, это и есть польза от моего участия в этом митинге. Между этими областями очень интересные связи. Электродинамика участвует и в биологии - через химию, и в политике - через материалы и взрывчатые вещества, и в ядерной физике - как образец теории. Мы можем манипулировать с отдельными атомами через сканирующий туннельный микроскоп, но не можем - с отдельными нуклонами.

Биология напрямую связана также с политикой; можно говорить о био-политике. А радиация, являясь важнейшим мутагенным фактором, представляет собой мотор биологической эволюции.



Рис. 10.1: Общая классификация областей деятельности по их физической природе. Электродинамика включает в себя механику, химию, материалы, неядерную энергетику, современный транспорт, включая космические полеты. Биология включает сельское хозяйство, медицину. Политика - экономику, любое управление человеческими коллективами, ведение войн. Ядерная физика - ядерное оружие, атомную энергетику, ускорители. Любая практическая деятельность является комбинацией действий в этих основных сферах; как правило, не более чем в двух

Наконец, политика связана с ядерной физикой хорошо известным образом еще со времен Хиросимы. Эта связь определяет политику нашего времени точно также, как огнестрельное оружие определяло ее до 1945 года. Естественно, влияние здесь везде обоюдное.

Второй зритель: У нас получилась странная классификация, не похожая на обычную, общепринятую. Могут обидеться химики, строители, механики - на каком основании мы включили их всем скопом в электродинамику? А математики куда их включить? Экономисты тоже восстанут - почему мы сочли их политиками? Военные люди вообще будут разделены на все 4 сферы... Что-то слишком необычно.

Первый зритель: Толк от любой класификации может быть только тогда, когда она проста. Если у вас 500 специальностей, значит вы в тупике. Сложность блокирует любые разумные действия. Мне нравится то, что мы с Вами придумали.

О, кажется, пора занимать места в зале - я вижу, что участники дискуссии уже собрались!

10.2.2 Где кончается квантовая теория?

Modepamop: Наша вторая встреча будет посвящена общим вопросам, хотя мне кажется, эти вопросы самые важные: они касаются постановки научных задач. Вот вопросы, ответ на которые я хотел бы получить в результате нашей сегодняшней встречи.

1). Считается, что квантовая теория универсальна, потому что она описывает реальность исчерпывающим образом и не найдено ни одного примера расхождения ее предсказаний с экспериментом. Но так ли это на самом деле? Где границы применимости этой замечательной теории и можно ли продолжить ее за этими границами?

2). Квантовый компьютер в своем масштабируемом варианте до сих пор не построен. Речь не об отдельных гейтах, а о полномасштабном, на несколько тысяч кубитов, квантовом компьютере. В чем дело? Не следует ли из этого ошибочность самой идеи квантового компьютера?

3). Главной задачей проекта квантового компьютера предполагалось моделирование сложных процессов на квантовом уровне. Но в чем смысл самого моделирования? Это утоление честолюбивых устремлений физиков? Что мы получим в результате хорошей модели? Что вообще следует моделировать и что такое это самое моделирование?

Специалист: Я готов ответить на первый вопрос о границах применимости квантовой теории. Эти границы - практические и их устанавливает вычислительная сложность. Если бы мы могли оперировать с матрицами неограниченной размерности, мы бы нашли решения самых сложных задач в биологии. Универсальность квантовой механики показала практика. В тех случаях, когда нам удается, говоря простым языком, "досчитать до конца", предсказания квантовой теории совпадают с экспериментом с точностью самого эксперимента, то есть с максимально возможной точностью.

Доказательством этого факта служит опыт прошлого столетия, когда компьютерные вычисления мало практиковались, и физики-теоретики решали задачи с помощью формул - этого удивительного языка математики. В тех случаях, когда формулы работали, а это были не только одночастичные задачи, но и более сложные случаи, всегда квантовая теория "попадала в яблочко": сходство с экспериментом было абсолютным.

Единственным препятствием на пути полного господства этой удивительной теории является тот факт, что размерность в квантовых задачах растет как экспонента от размера исследуемой системы. Поэтому для процессов, входящих в сферу таких предметов как биология, где нет универсальных формул, квантовая механика и не применяется глобально, сразу ко всему процессу в целом, а только к его частям. Например, к расчету конформации полимеров в вакууме и в водном расстворе - здесь все обстоит великолепно.

А попробуйте рассчитать динамику молекулы ДНК на компьютере, если эта молекула состоит из 20 миллиардов одних только нуклеатидных звеньев, а каждое звено - еще из десятка или более атомов. С экспонентой от такого числа не справится никакой суперкомпьютер... Да даже и полный расчет спектральных линий одного единственного нуклеатида - уже за пределами наших возможностей, только приближенные методы могут что-то дать.

Именно после осознания этого факта и появился проект компьютера квантового; как имитации реальной системы, но имитации, сделанной человеческими руками, и состоящей из гейтов. Дальнейшее - дело техники и экспериментаторов.

Modepamop: Верно ли я Вас понял, что все принципиальные теоретические проблемы квантовой теории уже решены, и остается только надеяться на искусство эксперимента?

Специалист: Именно так.

Дилетант: Я не могу согласиться с мнением уважаемого оппонента в том, что в основах квантовой теории все решено. Формальный аппарат этой замечательной теории, действительно, полностью завершен и в сфере ее применимости дает прогнозы, в точности совпадающие с экспериментом - здесь он прав. Но вот что это за "сфера применимости"? Претензии квантовой теории колоссальны. Эрвин Шредингер в своей книге "Жизнь с точки зрения квантовой теории" фактически включил саму жизнь в область потенциальных приложений этой теории. И был, по моему мнению, прав. Ведь с таким формальным инструментом мы можем судить о микропроцессах, происходящих в атомах, с математической точностью. И значит, потенциально, можем предсказать поведение живого и достичь полного контроля над живой природой. О таком веком раньше никто и помыслить не мог!

Modepamop: Значит, Вы согласны с Вашим оппонентом в универсальности квантовой механики?

Дилетант: Нет, Вы меня неправильно поняли! Я говорил об амбициях, а реальность оказалась совсем иной. Вычислительные трудности есть лишь внешний признак неполноты квантовой механики. А есть и другие изъяны, которые мешают с ее помощи достичь ее амбициозных целей.

Cnequanucm: Мне кажется, Вы выдумываете какие-то амбициозные цели, когда все гораздо проще. Книга Шредингера представляет интерес только как мнение великого ученого о глобальных проблемах; она не является научной монографией. В реальности, о которой Вы упомянули, физики занимаются приборами, а не живыми существами. Наш путь - совершенствование приборов, сделанных человеком, а не копание в невообразимо сложной проблематике других дисциплин. Мы не претендуем на завоевание Космоса, на раскрытие загадки Жизни, и прочие подобные вещи. Мы - реалисты, а не фантазеры!

Сфера применимости квантовых методов определит сама история, надо просто подождать, набраться терпения. И не строить оторванных от жизни проектов.

Дилетант: Пожалуста, не фантазируйте, у Вас все равно плохо получится. Да и я не склонен к особым фантазиям. Забочусь только о логической строгости. Вычислительные трудности - не единственный вопрос. Еще на заре нашей замечательной теории пришло осознание такого факта, что эта теория не занимается конкретным объектом. Она - про статистику, то есть занимается только огромным числом одинаково и независимо приготовленных систем - только если у нас есть такая возможность, можно проверять квантовую теорию на практике, иных путей нет!

Сама ее хваленая "точность" есть всего лишь производная от надежности того источника, который готовит для наших экспериментов в точности одинаковые системы. Например, атомы определенного химического элемента. Если же у нас имеется только 5 экземпляров какого-то объекта, квантовая теория бессильна что-либо утверждать о нем. Вот она, сфера применимости.

Как Вы можете говорить о какой-то "теории квантового компьютера", если сам этот компьютер, представляющий устройство из тысячи квантовых точек, оптических полостей, лазеров, системы охлаждения, точной механики и электроники, представляет собой уникальное произведение искусства, и таких объектов не может быть много по определению!

Это Вы витаете в облаках, я же стою на почве.

Специалист: Вы ломитесь в открытые двери. Никто не собирается предсказывать поведение квантового компьютера. Да это и невозможно: быстрые квантовые алгоритмы говорят нам, что есть задачи, которые невозможно решить в реальное время, не применяя квантовый компьютер, а именно задачи перебора множества вариантов. Экспериментаторы строят такой компьютер, исходя из доступной нам части квантовой теории, части, которая умещается в память классических суперкомпьютеров. Вот как обстоят дела, и никаких проблем здесь я не вижу.

Модератор: Сдается мне, что экспериментаторы уже как-то не очень активно его строят. Такое впечатление, что надежда постепенно тает... Они как-то больше говорят о некоем "квантовом превосходстве" и все стараются его демонстрировать. Вообще-то я их понимаю. Гранты всем нужны. Такое было уже. С термоядерным синтезом.

Дилетант: Вы ерничаете, а между тем, вопрос серьезный. Проект квантового компьютера - фундаментален, он касается нашего понимания собственной природы, и его нельзя просто так отбросить. Это не вопрос активности или надежды, это вопрос выживания. Та деятельность, о которой говорит мой оппонент, есть всего лишь часть, и небольшая часть данного проекта.

Набор статистики помогает тогда, когда у вас нет лимита по времени, и вы имеете неограниченную базу для новых и новых экспериментов. Это очень ограниченная ситуация. Наш мир конкурентен, и лимиты здесь жесткие. Разве вы можете "набирать статистику" если это касается вашей собственной жизни? Неимоверная точность квантовой теории не есть ли прямое указание на ее возможности именно в острых ситуациях, когда вся статистика умещается в короткий столбец амплитуд квантового состояния, избавляя нас от необходимости в классических экспериментах?

Точнейшие квантовые часы, вообще метрология, основанная на квантовой интерференции одной единственной частицы. Микросхемы и наноустройства, скорость работы которых приближается к скорости химических реакций. Квантовая связь, гарантирующая абсолютную безопасность информационных потоков. Наконец, изумительная красота математического аппарата квантовой механики и его удивительная самосогласованность и главенство над классической физикой. Разве это не убеждает нас, что потенциал этой науки выходит далеко за пределы нынешней прибористики?

Специалист: Ну не знаю, не знаю. Ваши слова звучат интересно, но я по своей природе экспериментатор, перешедший в силу разных обстоятельств в теорию. Видите ли, эксперимент связан с огромными даже не научными и не техническими, а организационными трудностями. Вести его - очень непростая задача. Но теория должна опираться на факты. И если они противоречат теории...

Дилетант: ... То тем хуже для фактов! Потому что их много, а теория одна.

Первый слушатель: Кажется, он перегибает палку, в своем полемическом задоре.

Второй слушатель: Нет-нет, он верно говорит, ведь без теории и фактов не увидишь.

Дилетант, продолжает: Что такое эти "факты"? Для отдельного атома - это его спектральные линии. А для молекулы - уже разные наборы спектральных линий, и еще - ее форма, которая может быть различной, а для биополимеров - что является "фактами" - их структура? Но она меняется каждую секунду, в этом суть живого! Никакой физический эксперимент не сможет дать нам верную картину жизни простейшего живого организма - бактериальной клетки.

Cnequanucm: Полностью согласен. Вот это и есть тот барьер, который разделяет физику от биологии. У нас факты - разные по своей природе.

Дилетант: И в этом вся проблема. Никакого прогресса нет и не может быть, когда научные области отделены друг от друга непроницаемым барьером. Новое создается только при синтезе знаний.

Модератор: Это называется междисциплинарностью...

Дилетант: Нет! Не "междисциплинарность", а синтез знаний! "Междисциплинарность" - это ложный термин, уничижающий как раз то, что необходимо - синтез. Это процесс, полностью растворяющий старые научные области в новой науке. Не плодить надо так называемые "новые направления", а объединять старые! Научные направления плодятся как грибы после дождя, в геометрической прогрессии; административное устройство науки едва поспевает за этим бурным процессом. Но при этом выхолащивается суть: новые направления оказываются на поверку бесплодными.

Cneциалист: Отчасти соглашусь. Я тоже не сторонник новых направлений, и сам работаю в квантовой прибористике. Обруганной Вами. И вот мне интересно знать, что Вы конкретно предлагаете?

Дилетант: Квантовый компьютер в своем первоначальном историческом понимании - это вторжение физики на каноническую территорию математики. А именно, этот проект, будь он воплощен в реальность, изменил бы понимание эффективных алгоритмов, потому что ускорение общей задач и перебора меняет наше представление об эффективности вычислений; правда, не радикально, но ощутимо. Извлечение квадратного корня из классического времени вычисления для огромного класса задач - это переворот.

Но вот что произошло дальше. Природа воспротивилась этому проекту. Оказалось, что на его пути стоит декогерентность, и она не является технической проблемой. Это фундаментальная проблема, которая заставляет нас по-новому взглянуть на квантовую теорию как таковую.

Cnequanucm, exudнo: Ну и в чем же состоит этот новый взгляд? Что Вы собираетесь предложить, если, как сами утверждаете, сходство с экспериментом - максимально точно?

Дилетант: В каком классе задач?

Cneциалист: В любом, где можно досчитать до конца. Включая, кстати, не только одночастичные, но и многочастичные задачи. Посмотрите на теорию твердого тела. На теорию сверхпроводимости - это же все сложные системы, там миллиарды частиц.

Дилетант: Вы заблуждаетесь. Перечисленные Вами примеры успешно решенных квантовой теорией задач относятся к простым системам. Простым - с точки зрения алгоритмической сложности.

Modepamop: Поясните пожалуйста. Я всегда считал, что сложность - это, грубо говоря, число частиц, которые явно входят в математическую модель процесса. А Вы что-то другое имеете в виду под сложностью?

Дилетант: Да, я имею в виду не просто число частиц, а число существенных частиц, находящихся в квантовом запутанном состоянии. Теория твердого тела основана на модели взаимодействующих гармонических осцилляторов. Там их может быть миллиард, в реальном кристалле. Но если мы совершим так называемое каноническое преобразование и с его помощью перейдем к квази-частицам, окажется, что все эти квазичастицы - не запутаны. А это значит, что алгоритмическая сложность динамики кристаллической решетки очень мала.

Каноническое преобразование - это простая перестановка базисных векторов пространства квантовых состояний. Она позволяет радикально редуцировать видимую, наивную сложнсть задачи. На первый взгляд кажется, что там множество частиц, причем в запутанном состоянии. Но на поверку оказывается, что эта запутанность вымороченная. Сложность таких систем очень мала. Вот только в этой сфере традиционная квантовая теория и достигает успеха!

Слушатель: А квантовый компьютер?

Дилетант: Вот! Квантовое вычисление, которое он, по фейнмановскому проекту, должен реализовать, явно выходит за пределы простых систем. Выходит сразу же, на первом шаге вычисления. При работе КК мы сразу попадаем в ту область, где квантовая теория ни разу не проверялась, и никаких триумфов у нее там не было!

Специалист: Формально Вы правы. Но ведь есть работающие прототипы, например, уже больше 20 лет назад созданы двухкубитные запутывающие гейты. Я согласен, что масштабирование КК - задача малореальная. Но где лежит граница этого масштабирования? До 10 кубитов? До ста?

Дилетант: Вот это как раз тот вопрос, который должны решить вы - экспериментаторы. Я думаю, КК в его традиционном, фейнмановском понимании, можно масштабировать до десятка, возможно, пары десятков кубитов. И этот барьер - закон природы, а не математическое ограничение на сложность.

Cnequanucm: М-м. Это мне не очень нравится. Такое ограничение разрушает инвариантность квантовой теории относительно перемены базиса пространства состояний. Вы отказываетесь от той математической красоты, которой сами же восхищались.

Дилетант: За пределами константы масштабирования КК - своя красота. Не алгебраической, а вычислительной природы. Что важно для сложных систем, какая физика там должна быть? Из первых принципов получить динамику такой системы - вот реальная задача в области сложных систем и сложных процессов. Это КК нового типа, предназначенный для моделирования реальности, а не решения оторванных от нее математических задач!

Специалист: Хорошо, допустим. Но для того, чтобы получить именно из первых принципов реалистическую динамику, надо уметь очень точно вычислять именно конформации полимеров, изменение их спектральных линий, и т.д. что входит в стандартные физические задачи. Ведь мы же ничего не сможем получить из первых принципов, минуя этот этап, а его, как мы уже установили, нелья пройти, не имея квантового компьютера. Замкнутый круг!

Дилетант: Замкнутый круг существует только если придерживаться традиционной квантовой теории, в которой математический аппарат - это анализ, основанный на понятии предела. Есть множество примеров того, как математический анализ противоречит квантовой теории.

Ненормируемость собственных состояний операторов координаты и импульса эта коллизия заметается под ковер предположением об ограниченности волнового вектора. Расходимость рядов для амплитуд в квантовой электродинамике - это противоречие решается так называемой перенормировкой, то есть фактически, введением зависимости зарядов и масс элементарных частиц от зерна разрешения базисных состояний в импульсно-энергетическом представлении волновой функции.

Получается, что заряды зависят от зерна разрешения и по пространству, то есть от того dx, который надлежит устремить к нулю, чтобы заработал математический анализ - основа формального аппарата квантовой теории!

Это означает, что квантовый формализм ограничен априори из чисто логических соображений...

Специалист: Это формальные придирки, аргументация математика.

Дилетант: Я слышал от кого-то, что физики относятся к математике как бандиты к уголовному кодексу. Допуская некоторую разумность такого отношения в данном случае, все же этот кодекс невозможно взять и просто так отменить. Как и математику. Жизнь не позволит.

Ведь главный аргумент за серьезный пересмотр квантовой теории для ее распространения в область сложных процессов - неудача экспериментов по масштабированию квантового компьютера. Эти эксперименты идут уже четвертый десяток лет. Пора делать серьезные выводы, а не ждать, как Вы хотите.

Специалист: А что Вы предлагаете?

Дилетант: Строить компьютерные модели динамики сложных систем на квантовых основах с самого начала, считая, что декогерентность есть следствие ограниченности памяти моделирующего компьютера. Иметь в виду, что чем сложнее процесс, тем менее точно, в традиционном смысле, его можно описать. Не имеет никакого значения точное расположение миллиардов атомов в клетках организма, важно только - выживет этот организм или погибнет. Вот это и есть будущее проекта квантового компьютера.

Специалист: Это уже не будет физикой!

Дилетант: Как скажете. Вам решать - будет или не будет. Важно только одно: эффективность модели. Если мы получаем правдивый видеофильм, построенный на основе этой модели, причем без введения артефактов моделирования, то есть только опираясь на строго ограниченное число первых принципов, то модель эффективна. Если же мы вынуждены будем, для правдоподобия, вводить такие артефакты, то модель неэффективна.

Специалист: Поясните, что Вы понимаете под артефактами моделирования?

Дилетант: Вот что такое модель. Это описание алгоритма, который воспроизводит динамику реальной системы. Если Вы можете просто задать параметры внешнего окружения и получить с помощью этого алгоритма видеофильм, реалистично отражающий поведение моделируемой системы, значит, данная модель адекватна. Если же для реалистичного изображения динамики вам надо вводить в алгоритм дополнения, которые называются артефктами, значит, данная модель не адекватна.

Cnequanucm: То есть модель - это алгоритм, такой что соответствующее ему вычисление является реалистичным видеофильмом?

Дилетант: Да.

Cnequanucm: Рассмотрим конкретный пример. Прохождение сложной молекулы через пору в мемблане живой клетки. Как получить реалистичный видеофильм, исходя из законов физики в этом случае? Нам придется вводить артефакт моделирования: расширение поры при приближении данной молекулы, потому что иначе в пору попадут ненужные молекулы. Как этого избежать?

Дилетант: В реальности такой процесс обязательно нуждается в специальных белках - помощниках, которые подцепляют нужную молекулу и протаскивают ее через мембрану. Подобно тому, как паровоз тянет за собой вагончики.

Специалист: Дополнительное усложнение модели?

Дилетант: Вовсе нет! Введение в модель таких белков - помощников необходимо, потому что они являются одним из главных действующих лиц данного сценария; обойтись без их нельзя.

Cneuuanucm: Ваш пример означает, что одной только физики недостаточно для построения реалистичного сценария хоть сколько-нибудь интересного широкому кругу зрителей. В чем же тогда роль физики?

Диленант: В точном разделении объективных и субъективных факторов в модели.

Специалист: Поясните.

Дилетант Вот смотрите. Объективные факторы - это законы физики. Только на них должен быть основан алгоритм моделирования. Этот алгоритм не должен меняться в зависимости от ситуации. А окружение и начальное условие - это субъективный фактор, который может быть разным, но пользователь модели должен иметь возможность быстро формализовать субъективный фактор. Он не обязан знать законов физики, но должен построить режим окружения и начальное условие так, чтобы алгоритм выдал ему реалистичный сценарий динамики моделируемой системы.

Специалист: Удовлетворить Вашим условиям почти невозможно. Я не знаю примеров таких алгоритмов, кроме, конечно, стандартных задач физики, где алгоритм моделирования состоит в решении классического или квантового уравнения динамики: Ньютона или Шредингера, так что это решение и даст нам видеофильм процесса. Уже для химии не существует модели в Вашем понимании этого слова. Как учесть многообразие начальных условий, когда одна молекула приближается к другой под определенным углом, электронные спины имеют опрееленной направление, и т.п. Люди тратят целую жизнь, чтобы разобраться в невообразимой сложности химических реакций!

Дилетант: Согласен с Вами. Компьютерная модель химии - пример неверно поставленной задачи. Важна не химия как таковая. Важно, как она работает в живом. В бактериальной клетке, или клетке организма, каналы химических реакций жестко детерминированы белковой машинерией, и, в конечном счете - ДНК. Там нет никакой свободы выбора начальных условий, и не нужно исследовать, под каким углом сближаются реагенты - все эти входные параметры определены однозначно. Но принципиально важен механизм жизни, то есть главная последовательность реакций, по которой можно восстановить динамику живого, а, значит, и научиться управлять этой динамикой.

Управлять поведением живого можно лишь в той мере, в которой мы способны это поведение воспроизвести в компьютерной модели; еще Фейнман говорил, что по настоящему понимаешь только то, что можешь сам сделать.

Cnequanucm: Вы говорите о моделировании, о воспроизведении реальной, видимой динамики сложного объекта. Но для этого надо знать окружающие условия. Причем эти условия могут оказаться даже сложнее самого объекта, и намного сложнее. Нам придется расширять нашу модель. Как справиться с постоянно возникающей проблемой неполноты наших знаний об окружении? В простых системах, которые Вы так называете, окружение выступает в форме граничных условий, и его поведение всегда гораздо проще рассматриваемой системы. КОУ предполагает, что окружающая среда не имеет долговременной памяти, это уравнение описывает квантовые марковские процессы. Такое же предположение делается во всех стандартных моделях, для которых есть регулярные методы, математические и компьютерные.

В Ваших сложных системах, наподобие живых существ или их сообществ, это не выполняется: там окружение не может быть марковским; более того, здесь трудно даже точно отделить окружение от самой системы, которую мы рассматриваем. Что с этим делать?

Дилетант: Это вопрс о том, где нам остановиться в процессе расширения нашей системы, где тот островок стабильности, на котором мы можем считать окружение марковским. Я думаю, что ответ дает сама практика исследовательского поиска и научных дисциплин, в рамках которых мы можем совершать эксперименты.

Формально, самая всеобъемлющая из таких дисциплин изучает человеческое общество. В советское время это называлось историческим материализмом. В практическом плане - это политика.

Специалист: Квантовая политика ? Звучит необычно и даже как-то парадоксально. Конечно, над далекими галактиками мы не можем совершать эксперименты, да и на геологию не слишком сильно воздействуем. Общество - это, пожалуй, действительно, самый глобальный объект, где такие эксперименты вообще возможны. Хотя и очень опасны.

Однако, оставаясь на естественно-научных позициях, тогда мы должны признать, что человеческое поведение в своей основе биологично, так что вся политика в конечном счете определяется биологией, а та, в свою очередь, химией и физикой. По своему опыту я знаю, что если химики с этим еще и согласятся, то биологи уже вряд ли просто так примут, а гуманитарии вообще встретят в штыки: это же их область, а мы тут со своим КК...

Дилетант: Вы правы, в свой огород никто никого просто так не пустит. Границы научных областей - святы и непроходимы. Но это - в мирное время. А в условиях войны эти границы потеряют святость. Разделение труда сохранится, но эти границы придется переходить, причем в обе стороны. Посмотрите, как физика повлияла на политику во второй мировой и после нее. И обратное влияние - тоже было.

Специалист: Квантовый подход к политике приобретает актуальность именно в условиях гибридной войны. В которую вовлечены не только непосредственные, традиционные войска, но и средства воздействия на психику - своего и вражеского населения, на экологию, на медицину. Может ли фундаментальная наука - физика и математика, остаться в стороне от политики? И если ответ отрицательный, не попадем ли мы в логическую петлю, занимаясь именно фундаментальной наукой? Ведь тогда получится, что никакой абсолютной истины не существует.

Дилетант, что-то хочет ответить, но его прерывают...

Модератор: Дискуссия затянулась, позвольте мне подвести предварительный итог.

Итак, проект квантового компьютера переживает серьезную трансформацию, своего рода метаморфозу. Не отказываясь от построения КК, самое содержание этого объекта сильно меняется по сравнению с концом 20 века.

И, у меня сложилось такое впечатление, что сам проект КК, его задача, как-то растворяется в других дисциплинах. Он как бы становится даже не "меж-" а "наддисциплинарным" ? А что этот проект дает уже сегодня, за исключением квантовой криптографии?

Дилетант: Возможность незаметного физического воздействия на поведение людей. Вот вам факты. В одной пробирке - культура размножающихся патогенов (болезнетворных бактерий), в другой - водный раствор белков и отдельных нуклеиновых звеньев. И во второй пробирке, которая отделена от первой несколькими метрами, начинается синтез ДНК именно тех патегенов, которые в первой пробирке! Это эксперименты Люка Монтанье, первооткрывателя вируса ВИЧ, и эффект дистанционного переноса ДНК подтвержден в независимой лаборатории.

Это говорит о том, что электромагнитное поле может переносить сложнейшие биологические сценарии на расстоянии. Классическая физика отрицает такую возможность. Точная модель такого эффекта - это и есть применение методов квантового компьютинга.

Специалист: Ну что же, это неплохая задача, но мне кажется, она слишком ограничена. Мне бы хотелось услышать перспективу: тот научный горизонт, который нам откроется, если предположить, что мы успешно решим проблему компьютерного моделирования. Про общество мы уже слышали, что можно сказать о индивиде, свободу которого Вы проповедуете? Что ему даст КК?

Дилетант: Вот три крупные направления, над которыми можно было бы подумать. Первое - это проблема реинкарнации сознания. Пенроуз и Хамерофф предложили считать индивидуальное сознание чем-то вроде результата измерения вектора состояния электронов в микротубулах нервных клеток. Но сознание никогда не должно кончаться, и не должно зависеть от структуры нервных волокон - сознание есть нечто более высокое. И потому оно должно реинкарнироваться.

Cneuuanucm: С помощью определенных мод электромагнитного поля? Сложного состояния поля, которое бы перенесло индивидуальное сознание на другой носитель, то есть в другое тело?

Дилетант: Да.

Cnequanucm: Ну что же, это неплохо. Я подозреваю, что эта идея связи Ваших моделей с теорией реинкарнации возникла из-за возможности моделирования настоящего переноса сценария, правда, очень простого - коллективных осцилляций из полости в полость. Но здесь Вам придется потрудиться: реальные сценарии живого намного сложнее Выших осцилляций. А что еще?

Дилетант: Я надеюсь, что трудиться придется не мне одному, а нам... Что еще? Нелокальность и ее связь с эффективностью передачи информации, в особенности, для массовых событий, таких как репликация генетического материала, и не только его. *Cnequanucm:* А что еще можно реплицировать? Сценарии, идущие в живых клетках?

Дилетант: Например. Эти сценарии сильно зависят от контекста, и тут можно сформулировать посреднее направление исследований, тесно связанное с первыми двумя. Углубление наших представлений о элементарности частиц. Мы знаем, что стандартная "теория всего" исходит из неразличимости элементарных частиц. Эта неразличимость подтверждается в экспериментах, но только на том узком поле, на котором действует традиционная квантовая механика. А мы знаем, что это поле ограничено.

Cnequanucm: Это Вы знаете, а я не знаю. Гипотеза об ограниченности удобна Вам для целей моделирования реальности на компьютере, не более того.

Дилетант: Можно мне продолжить?

Специалист: Да, пожалуйста.

Дилетант: Итак, некоторые атомы могут быть отличны от других. Например, некоторые атомы кислорода могут отличаться, причем это отличие невозможно определить в физических эксперименах...

Cnequanucm: Я понимаю, куда Вы клоните: раз нельзя в физических, то можно - в биологических?

Дилетант: Ну вот это Вы первый сказали! Живые существа могут состоять не из произвольных атомов, а из специально подобранных. Если мы видим всеобщую роль отбора в биологии, почему этот отбор не должен простираться вглубь вещества?

Cnequanucm: Вы хотите сказать, что в какой то момент живое существо отбирает не только химические соединения, но и сами атомы, их которых эти соединения состоят?

Дилетант: Фактически да. Но согласитесь, если химические соединения имеют уникальные свойства, то они должны зависеть каким-то образом от настолько же уникальных свойств материала для химии - атомов.

Cneuuaлucm: Это фантастика. Но хорошо, а как Вы можете в принципе обнаружить этот факт отбора атомов? Например, в какой момент он идет: в момент кроссинговера ДНК? Или в период роста организма?

Дилетант: Обнаружить можно косвенно. Если это предположение позволит писать более эффективные компьютерные программы моделирования, значит, это имеет место и в реальности.

Cnequanucm: Наши тела состоят не из обыкновенных атомов, а из избранных? Это противоречит стандартной теории "всего". И потом, это не облегчает, а затрудняет моделирование. Ведь тогда надо допустить, что эти атомы находятся не только в нас, но и вне нас, в живой природе? И в той, что мы считаем неживой? Странная у Вас теория!

Дилетант: Почему Вас удивила эта теория, но не удивляет реинкарнация?

Специалист: Потому что реинкарнация давно на слуху... хотел было сказать "из-
вестна", но одумался. А особые свойства некоторых атомов - это новость!

Дилетанты А вот и нет! У атома кислорода в ядре 16 нуклонов: 8 протонов и столько же нейтронов. У каждого есть спин- вот уже 2¹⁶ состояний; а если считать еще орбитальные состояния нуклонов, и электронную оболочку - есть возможность закодировать все человечество!

Специалист: Получается, что на мне нужно вводить QR- коды, они у нас уже есть, причем это не ДНК?

Дилетант: Мне было бы очень странно считать, что метод, используемый для идентификации в человеческом обществе, не применялся бы в природе. Конечно, есть молекула ДНК, которая индивидуальна. Но согласитесь, что не ДНК определяет личность. Как по ДНК различить однояйцевых близнецов?

Cnequanucm: Да, но тогда выходит, что личность может быть идентифицирована по одному единственному атому?

Дилетант: ... и этот атом - я думаю, это атом кислорода, он и является материальным носителем реинкарнации.

Cneциалист: Возможно, возможно. Есть, правда, поле, оно тоже может служить убежищем для сознания, лишенного тела. Я думаю, здесь мы оказываемся в плену произвольных гипотез.

Дилетант: Согласен с Вами. Но атом как носитель личности - это мне нравится!

Cneuuaлucm: Все таки обсуждение реинкарнации не относится к науке, потому что это во-первых, непроверяемо, а во вторых, относится к сфере религии, где прямо противоречит Святому Писанию.

Дилетант: Ого! Я вижу, Вы повторяете известный аргумент инквизиции. Насколько я помню уроки истории, эта самая инквизиция также преследовала за приверженность к геоцентрической теории, что уже само по себе - аргумент в пользу реинкарнации, хотя и косвенный. Но есть второй аргумент. Я готов с Вами спорить на что хотите; я утверждаю, что после смерти личность не исчезает. Если я неправ и проиграл, Вы никак не сможете получить приз. В отличие от меня!

Специалист: Я знаю, что в софистике Вы мастер. Спорить с Вами я не буду, потому что, повторяю: это не наука.

Дилетант: Это - не современная наука. Но в будущем этот вопрос может в науку войти.

Modepamop: Я хочу подвести итог дискуссии; надеюсь, что выражу мнение, которое в целом разделяют обе стороны. Точное естествознание стоит на распутье. Теория простых систем давно создана и даже технические решения известны, совершенствование идет только в деталях технологий. Проблема - в сложных системах и сложных процессах, а эта область, в которой мало что известно даже на уровне теории. Здесь мы движемся методом проб и ошибок. Вопрос в том, как создать теорию сложных процессов.

Во-первых, это требует квантовых методов с самого начала. Во-вторых, это требует новой математики, которая, наряду с формулами, опирается на алгоритмы; причем формулы относятся к системам простым, а алгоритмы - к сложным.

И в третьих. Алгоритмы, в отличие от формул, обладают фундаментальной индивидуальностью. Мы не можем предсказать их поведения. Даже если нам известен код алгоритма, ход вычисления по нему невозможно предсказать в принципе. Это значит, что в сложных системах нет априорной истины, доступной сразу всем; правит бал конкуренция...

Голос с места: А ведь это - прекрасно! Значит, у каждого есть шанс. Даже если ты где-то ошибся, ты можешь оказаться прав в будущем!

Второй голос с места: Ох, уж эти мне ученые... Конкуренция то конкуренцией, только ведь кончиться это плохо может, с ядерным то оружием.

Modepamop: Верно отметили, товарищи. Значит, надо изучать ядерную физику настоящим образом! На этой мажорной ноте позвольте мне завершить нашу дискуссию!

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"; мышление - 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 несложных 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 котором создавалась микроэлектроника: это квантовые гейты Фейнмана, их массивы, и представления о квантовом вычислении. Эксперименты в этой области выявили удивительные, контр-интуитивные феномены, такие как дальнодействие. 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 Марковамладшего (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 дальнодействие.

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

Автор признателен проф. Надежде Викторовой за обсуждение и ряд ценных замечаний по первому изданию, а также проф. Хай Вонгу за ценные замечания ко второму изданию книги.

Приложение А

Приложение

А.1 Задания для студентов

А.1.1 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

$$H = \hbar \omega H_0, \ H_0 = \frac{1}{2} (X^2 + P^2)$$
(A.1)

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

$$a = \frac{X + iP}{\sqrt{2}}, \ a^+ = \frac{X - iP}{\sqrt{2}}.$$
 (A.2)

Найти $[a, a^+]$ и выразить H_0 через них. (Указание: $[\alpha, a^+] = 1, H_0 = a^+a + \frac{1}{2}$.

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:

$$|0\rangle = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$
(A.3)

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, ..., 6) 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:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \ a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \ a^+a|n\rangle = n|n\rangle.$$
 (A.4)

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.1.2 Приближение вращающейся волны

Гамильтониан Джейса - Каммингса (Jaynes-Cummings, JC) имеет вид

$$H_{JC} = H_0 + H_1, \ H_0 = \hbar \omega a^+ a + \hbar \omega \sigma^+ \sigma, \ H_1 = g(a^+ + a)(\sigma^+ + \sigma).$$

Целью данного цикла задач является доказательство справедливости RWA:

При $g/\hbar\omega \ll 1$ часть взаимодействия H_1 в гамильтониане H_{TC} 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_{TC} другую волновую функцию

$$|\Psi_{int}(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\Psi(t)\rangle.$$

Доказать, что эта функция является решением уравнения Шредингера для нового гамильтониана

$$H_{int} = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}H_1e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$$

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:

$$[a,a^+] = 1, \ \{\sigma,\sigma^+\} = 1, [a,\sigma] = [a^+,\sigma] = [a,\sigma^+] = [a^+\sigma^+] = 0.$$

3. Доказать следующую Лемму:

Лемма 1. $[H_0, H_1] = 2g\hbar\omega(a^+\sigma^+ - a\sigma).$

(Указание: использовать результут задачи 2.)

4. Определим индукцией по *n* коммутатор *n*- ой степени:

$$F_1 = [H_0, H_1], \ F_n = [H_0, F_{n-1}].$$

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, ... вид

$$K_n = \frac{i^n}{n!} g\omega^n 2^n (a^+ \sigma^+ + (-1)^n a\sigma),$$

а свободный член равен $g(a^+\sigma + a\sigma^+ + a^+\sigma^+ + a\sigma)$. 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 кусочномонотонными 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 уравниения Шредингера при переходе от H_{JC} к H_{JC}^{RWA} становится бесконечно малой при $g/\hbar\omega \rightarrow 0$.

А.1.3 Конечномерные модели КЭД в полостях

А.1.4 Конечномерные задачи химии

Задача 1

Рассмотрите случай двух искусственных атомов, сближенных на расстояние гибридизации, с фиксированным положением ядер. Спины электронов различны. В базисных состояниях в молекулярном базисе на первом месте должно стоять состояние электрона со спином вниз ($|\Phi_0 \downarrow$ или $|\Phi_1 \downarrow$), на втором - со спином вверх ($|\Phi_0 \uparrow$ или $|\Phi_1 \uparrow$). Состояния фотонов ограничены числом 1 - всего их 4. Общая размерность пространства состояний 16.

Начальное состояние имеет вид:

$$\frac{1}{2}|00\rangle_{ph}|0_1\downarrow 0_2\uparrow\rangle$$

Требуется: найти зависимость молекулярного состояния $|\Phi_0 \downarrow \Phi_0 \uparrow \rangle$ в зависимости от времени (построить график).

Указание:

1) следовать алгоритму, изложенному в 8.9: представить гамильтониан в виде

 $H\downarrow +H\uparrow .$

2) Пользуясь выражениями для молекулярных состояний, выразить через них начальное условие.

3) Решить уравнение Шредингера для данной задачи Коши.

4) Просуммировать вероятности состояний вида $|??\rangle_{ph}|molecula\rangle$ по всем состояниям поля.

5) Вывести результирующую вероятность на график в зависимости от времени.

Задача 2*

То же условие, но в базисное состояние введено положение атомных ядер: $|0\rangle$ близко, $|1\rangle$ - далеко. В гамильтониан добавлены слагаемые, соответствующие взаимодействию атомов с полем атомных возбуждений (моды $\Omega \downarrow, \Omega \uparrow$) и туннелированию ядер H_n . В начальный момент ядра находятся близко. Задание то же, что и в задаче 1.

Задача 3**

То же условие, что и в задаче 2, но добавляется мода поля, поворачивающая спины. В начальное состояние добавляется один фотон этой моды. Задание то же, что и в задаче 2.

А.2 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 $exp(-\frac{i}{h}Ht)$. 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 суперкомпьтера.

Именно это называется квантовым ускорением классического вычисления. Мы покажем, что если понимать под классической системой конкретную функцию f: $\mathcal{K} \longrightarrow \mathcal{K}$ из конфигурационного пространство 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. [17]).

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 функции f, так что она имеет вид

$$x_0 \longrightarrow f(x_0) \longrightarrow f(f(x_0)) \longrightarrow \ldots \longrightarrow f^k(x_0) \longrightarrow \ldots \longrightarrow f^T(x_0)$$

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 $f_{quant} : |x, y\rangle \longrightarrow |x, y \oplus f(x)\rangle$. 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

$$d_{\Psi}(f,g) = [\sum_{a: f(a) \neq g(a)} \delta_a(\Psi)]^{1/2}.$$

Из этого определения сразу вытекает, что

$$\|f_{quant}(\Psi) - g_{quant}(\Psi)\| \le 2d_{\Psi}(f,g).$$
(A.5)

В этой оценке - слабая сторона Ахиллеса. Оператор вопроса к оракулу f_{quant} - 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:

$$\begin{aligned}
\Psi_0 &\longrightarrow \Psi_1 &\longrightarrow \dots &\longrightarrow \Psi_t, \\
\Psi'_0 &= &\Psi_0 &\longrightarrow \Psi'_1 &\longrightarrow \dots &\longrightarrow \Psi'_t,
\end{aligned}$$
(A.6)

Пусть f действуют всюду одинаково, кроме одного слова a, на котором $f(a) \neq g(a)$. Из неравенства (A.5) простой индукцией по t непосредственно устанавливается, что

$$\|\Psi_t - \Psi'_t\| \le 2\sum_{i=0}^{t-1} d_a(\Psi_i).$$
 (A.7)

Теперь нам надо выбрать *а* так, чтобы доставить Ахиллесу максимум неудобств. Определим матрицу

$$a_{ij} = \delta_{f^j}(\Psi_i), \ i = 1, 2, \dots, t; \ j = 1, 2, \dots, T.$$

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

$$\|\Psi_t - \Psi'_t\| \le 2\sum_i \sqrt{a_{i\tau}} \le 2\sqrt{t\sum_i a_{i\tau}} \le 2t/\sqrt{T}.$$

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. [15], [16]), а также, что любой квантовый алгоритм, более быстрый, чем гроверовский, должен почти для всех переборных задач давать ошибочный ответ (см. [14]).

Более детальное рассмотрение квантового вычисления [17] 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. [71]). Задача типа итераций, рассмотренная нами, относится к типу GMSP (см. [72]) 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 какиелибо формы детерминистического описания квантовых эволюций, предпринимавшиеся нами в третьей главе, не являются только лишь математическими упражнениями.

А.3 Система гармонических осцилляторов

Гармонический осциллятор представляет собой особую квантовую систему, основное состояние которой - гауссиан $exp(-\frac{x^2}{2})$ есть образец гладкости. В роевом представлении (см. [36]) здесь не возникает никаких "пиков", плотность которых существенно отличалась бы от окружения. Причина в том, что градиент плотности, деленный на саму плотность, пропорционален силе Гука, действующей на рой, представляющий гармонический осциллятор. Во всех других случаях уже в основном состоянии возникают "пики"; например для частицы в прямоугольной потенциальной яме ([76]). Гармонический осциллятор представляет собой очень удобную стартовую точку и для изучения многочастичного эффекта квантовой запутанности.

Мы рассмотрим понятие квазичастицы, в рамках пока обычной квантовой теории,

на модельной задаче о системе взаимодействующих гармонических осцилляторов. Эта задача выбрана ввиду ее особой важности для всего дальнейшего. Для одного осциллятора гамильтониан имеет вид $H = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 q^2/2$; его собственные функции имеют вид

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi h}\right)^{1/4} exp(-m\omega x^2/2h) H_n(x\sqrt{m\omega/h})$$
(A.8)

где полиномы Эрмита $H_n = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$, а соответствующие собственные значения энергии $E_n = h\omega(n+1/2)$.

Рассмотрим систему N гармонических осцилляторов, взаимодействующих друг с другом по закону Гука. Такой системой может быть, например, цепочка положительных металлических ионов в ловушке Пауля. Кулоновское взаимодействие между ними, если рассматривать малые колебания около положения равновесия, дает квадратичные потенциалы, то есть приближенно можно считать, что сила между ионами подчиняется закону Гука.

Пусть u_n обозначает отклонение осциллятора n от его положения равновесия. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H = \sum_{n=1}^{N} N(\frac{p_n^2}{2m} + \kappa u_n^2) - \kappa \sum_{n=1}^{N} u_n u_{n+1}$$

который получен из вычитания сил Гука $-\kappa(u_n - u_{n+1})$ по всем n, с приведением подобных членов (так получается $u_n u_{n+1}$) и пренебрежением граничными эффектами.

Борьба с запутанностью есть борьба с взаимодействием. Суть канонического преобразования в том, чтобы избавиться от члена взаимодействия $u_n u_{n+1}$. Этого члена не должно быть для квазичастиц - эти новые "частицы" должны быть не зависимы друг от друга. Оказывается, что для этой цели подходит преобразование Фурье, но не над волновой функцией, как это было при переходе от координатного к импульсному базису в гильбертовом пространстве состояний, а над самими амплитудами u_n колебаний осцилляторов.

Роль координаты r здесь будет играть n- номер осциллятора, а роль пси-функции будет играть u_n . Значения настоящей пси-функции еще называют амплитудами, поэтому здесь есть полное согласие с лингвистикой. Однако тот факт, что "координата" n и "амплитуда" u_n есть r и $\Psi(r)$ не есть просто забавная аналогия. Он говорит о природе квантовой амплитуды и о ее глубокой связи с роевым представлением реальных частиц. Механические колебательные амплитуды u_n не могут быть комплексными, подобно квантовым амплитудам. И классическое уравнение колебаний, описывающее динамику осцилляторов, также не может быть прообразом уравнения Шредингера, из-за своего детерминизма, что мы уже видели.

Поэтому осцилляторы не годятся как основа для полной модели квантовой динамики в общем случае. Однако, они подходят как модель электромагнитного поля, взаимодействие с которым и дает полную картину динамики частиц, которая оказывается динамикой "частиц + поля". Поле оказывается прибежищем детерминизма. Квантовый же хаос связан именно с тем, что амплитуды там будут комплексными; это связано с хаотической природой самих частиц, и это невозможно преодолеть так же, как в случае детерминистического мира осцилляторов. Это означает, что нам предстоит квантовать поле, то есть систему осцилляторов, что будет, фактически, распространением на поле того внутреннего стохастического поведения, которое первоначально было свойственно частицам материи.

Итак, каноническое преобразование в нашем случае выглядит так:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q U_q e^{-iqnd},\tag{A.9}$$

а обратное к нему:

$$U_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n u_n e^{iqnd}, \qquad (A.10)$$

где $d = 2\pi/N$. Используя определение импульса $p_n = \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial u_n}$ и правила дифференцирования, можно вывести формулы преобразований импульсов вида

$$p_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q P_q e^{iqnd},\tag{A.11}$$

и обратное к нему:

$$P_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n p_n e^{-iqnd},\tag{A.12}$$

где $P_n = \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial U_n}$. То что мы допустили здесь комплексные амплитуды, не существенно, потому что мы сейчас вернемся к вещественным числам, чего нельзя было бы сделать, будь у нас пси-функция вместо u_n .

Каноническое преобразование - линейно, и переводит любой малый кубик деления конфигурационного пространства в столь же малый параллелепипед, так что вместо одного деления возникнет другое. Более того, наше преобразование вида (А.9) будет даже ортогональным, то есть, как мы увидим ниже, кубики перейдут в кубики.

Итак, каноническое преобразование имеет вид "точка в точку" и явяется перестановкой базисных векторов гильбертова пространства квантовых состояний. Новые координаты \overline{U} есть координаты независимых квазичастиц - фононов.

Сдвинем также начало координат для q так, чтобы этот параметр, заменяющий n, принимал значения из симметричного промежутка. Тогда вместо q + q' = N мы будем писать q + q' = 0. Отношение неравенства индуцируется из старого набора 1, 2, ..., N так что пар q > -q практически половина (краевым эффектом всюду пренебрегаем)

Переписав гамильтониан в новых координатах, мы имеем:

$$\begin{split} H &= \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2mN} (\sum_{q,q'} P_q P_{q'} e^{1(q+q')nd}) + \frac{K}{N} \sum_{q} U_q U_{q'} \\ &- \frac{K}{N} \sum_{q,q'} (U_q U_{q'} e^{-iqnd} e^{-iq'(n+1)d}) = \\ &= \frac{1}{2mN} \sum_{q} P_q P_{-q} - \frac{K}{N} \sum_{q,q'} U_q U_{q'} (\sum_{n=1}^{N} e^{-ind(q+q')}) e^{-iq'd} + \frac{K}{N} \sum_{q} U_q U_{q'} = \\ &= \frac{1}{2mN} \sum_{q} P_q P_{-q} - \frac{K}{N} \sum_{q} U_q U_{-q} e^{+iqd} + \frac{K}{N} \sum_{q} U_q U_{-q} = \\ &= \frac{1}{2mN} \sum_{q} P_q P_{-q} + \frac{2K}{N} \sum_{q>-q} U_q U_{-q} (1 - \cos(qd)). \end{split}$$

Здесь $K = m\omega^2/2$, использовалась стандартная формула для суммирования геометрической прогрессии из экспонент, дающая 0 в случае $q \neq q'$, а также произведено упорядочение пар q, -q, так что мы явно выписали только половину, в которых q > q'-отсюда коэффициент 2 в последнем слагаемом.

Теперь перейдем еще раз к новым переменным, на этот раз - вещественным:

$$\begin{split} U_q &= X_q + iY_q, \ X_q = \frac{U_q + U_{-q}}{2}, \ Y_q = \frac{U_q - U_{-q}}{2i}; \\ X_q &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n u_n cos(qnd), \ Y_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n u_n sin(qnd), \\ \frac{\partial}{\partial U_q} &= \frac{\partial}{\partial X_q} \frac{1}{2} + \frac{\partial}{\partial Y_q} \frac{1}{2i}, \\ \frac{\partial}{\partial U_{-q}} &= \frac{\partial}{\partial X_q} \frac{1}{2} - \frac{\partial}{\partial Y_q} \frac{1}{2i}, \\ \frac{\partial^2}{\partial U_q \partial U_{-q}} &= \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2}{\partial X_q^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_q^2} \right). \end{split}$$

Окончательно получаем

$$H = -\frac{1}{4mN} \sum_{q > q'} \left(\frac{\partial^2}{\partial X_q^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_q^2} \right) + \frac{2K}{N} \sum_{q > -q} (X_q^2 + Y_q^2) (1 - \cos(qd)).$$

Мы видим, что в новых координатах наша система представляет собой набор независимых гармонических осцилляторов массы $\tilde{m} = 2m$, с новым коэффициентом $\tilde{K} = 2K(1 - \cos(qd))$ и частотами

$$\tilde{\omega}_q = \sqrt{\frac{2K}{m}(1 - \cos(qd))} \tag{A.13}$$

Это означает, что основное состояние этих новых осцилляторов, которые представляют собой квази-частицы, есть произведение основных состояний вида (А.8) каждого из них в отдельности (то же верно и для возбужденных - они возбуждаются независимо друг от друга). Поскольку полиномы Эрмита имеют вид $H_0 = 1, H_1 = x, H_2 = x^2 - 1$, основное состояние (с H_0) можно записать как

$$\Psi_0 = \prod_q \left(\frac{m\omega_q}{\pi h}\right)^{1/2} exp\left(-\frac{m\omega_q(X_q^2 + Y_q^2)}{2h}\right).$$

Переводя это в старые координаты, получим

$$\Psi_0 = \prod_q \left(\frac{m\omega_q}{\pi h}\right)^{1/2} exp\left\{-\frac{m\omega_q}{2hN}\left[\left(\sum_n u_n \cos(qnd)\right)^2 + \left(\sum_n u_n \sin(qnd)\right)^2\right]\right\}.$$

Выражение, стоящее в квадратных скобках, есть $U_q U_{-q}$, и потому, если бы все ω_q были одинаковы, это было бы не запутанное состояние, так как $\sum_q U_q U_{-q} = \sum_n u_n^2$. Но согласно (А.13) все ω_q разные, и это рассуждение не проходит. Основное состояние системы зависимых гармонических осцилляторов на уровне их первоначальных координат оказывается запутанным.

Мы можем оценить степень этой запутанности и сравнить ее со степенью запутанности возбужденного состояния, если воспользоваться следующим простым соображением (см. [52]). Функция F(x, y) двух переменных представляется в виде произведения $f_1(x)f_2(y)$ тогда и только тогда, когда $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} ln(F) = 0$. На основании этого мы можем оценивать степень запутанности пси-функции относительно переменных u_i, u_j по формуле

$$Zap_{i,j}(\Psi) = \int_{u_1, u_2, \dots} |\Psi|^2 \left| \frac{\partial^2 ln(\Psi)}{\partial u_i \ \partial u_j} \right| \ du_1 du_2 \dots du_N \tag{A.14}$$

где под нормой второй производной понимается либо простой модуль, либо квадрат.

Формула (А.14) для приближенного подсчета запутанности хороша тем, что ее удобно применять для систем, допускающих аналитические решения, типа ансамбля гармонических осцилляторов, в отличие от других иникаторов запутанности (см. [52], [77]). Возможность досчитать почти вручную - есть, по-существу, единственное достоинство данного индикатора; никакими свойствами типа аддитивности (для энтропии) этот индикатор не обладает. Но подсчет запутанности методом, приспособленным для системы кубитов, например, [77] встречается в данном случае с затруднениями из-за существенно непрерывного характера системы осцилляторов.

Мы видим, что запутанность будет присутствовать в любом состоянии, начиная с основного. Ее график будет периодическим в зависимости от номеров осцилляторов; рассчитать численно степень запутанности по формуле (A.14) для возбужденных состояний разных типов можно, используя метод Монте Карло для вычисления многомерных интегралов.

А.4 Фотоны - квазичастицы электромагнитного поля

Каноническое преобразование, являющееся перестановкой базисных векторов, применимо к элекромагнитному полю.

Классические (базисное) состояние поля - это 4-вектор $\phi(\bar{R}, t), \bar{A}(\bar{R}, t),$ где $\bar{R} \in R^3$ - обычная координата, ϕ - скалярный потенциал, отвечающий за кулоновское взаимодействие, \bar{A} - векторный потенциал. Переход от напряженностей электрической и магнитной частей поля E и B, фигурирующих в уравнениях Максвелла, к векторному и скалярному потенциалу осуществляется алгебраическкими преобразованиями с применениями формул векторного анализа; этот переход можно найти в книге [4].

Если напрямую квантовать поле, надо делать дискретным не только R^3 , но и ϕ

и *Ā*. Это - сложностной тупик!. Поле изучают при помощи канонического преобразования.

Каноническое преобразование для поля имеет вид:

$$A(R,t) = \sqrt{4\pi}c \int a_k(t)e^{ikR}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \ \phi(R,t) = \int \phi_k(t)e^{ikR}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

Теперь вместо (ϕ , \bar{A}) у нас будет состояние (ϕ_k , \bar{a}_k) - классическое состояние переходит в классическое же, то есть имеет место **перемена местами базисных векторов гильбертова пространства состояний**.

В новом порядке базисных векторов уравнения Максвелла при токе зарядов *j* и поляризации *s* приобретают вид

$$\ddot{a}_{sk} + k^2 c^2 a_{sk} = \sqrt{4\pi} j_{sk}$$

- это уравнение гармонического осциллятора с вынуждающей силой *j*; квантование которого дает фотоны. Это позволяет затем перейти к конечномерным моделям квантовой электродинамики, которые рассматривались в основной части книги.

А.5 Явный вид темных состояний в модели ТС

Доказательство Теоремы о структуре темных состояний 3.6.

Докажем сначала пункт 1. Поскольку состояние $|\Psi\rangle = \sum_{j} \lambda_{j} |j\rangle$ является темным тогда и только тогда, когда выполнена система уравнений (3.11), принадлежность $|\Psi\rangle \in D_{k}^{n}$ эквивалентна выполнению системы S_{k}^{n} , состоящей из всех равенств вида (3.11) 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 $(a_s, b_s)(a_{s-1}, b_{s-1})...(a_1, b_1)j$, где все номера $a_1, a_2, ..., a_s, b_1, b_2, ..., b_s$ различны, и s равно удвоенному расстоянию Хамминга между j и πj .

Доказательство. Пусть s минимальное из таких чисел, что для некоторого набора подстановок $(a_q, b_q), q = 1, 2, ..., s$ строка πj имеет вид $(a_s, b_s)(a_{s-1}, b_{s-1})...(a_1, b_1)j$.

Докажем, что все номера

 $a_1, a_2, ..., a_s, b_1, b_2, ..., b_s$ 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

 $j' = (a_{q-2}, b_{q-2})(a_{q-3}, b_{q-3})...(a_1, b_1)j$ 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 $c = 1, (a_q, b_q), (a_{q-1}, b_{q-1})j' = (a_{q-1}, b_q)j'$ 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 $j \kappa j'$.¹

Последовательность состояний $j_0, j_1, ..., j_r$, такую что любой переход $j_i \longrightarrow j_{i+1}$, i = 0, 1, ..., r - 1 в ней является существенной транспозицией, назовем правильной, если любой кубит затрагивается в ней не более чем однажды.

Зафиксируем произвольно $j_0 \in B_{k-1}^n$.

Лемма 1. Пусть $j_0, j_1, j_2, \ldots, j_r$ - последовательность состояний из B_{k-1}^n . Если для любого $q = 0, 1, \ldots r - 1$

$$d(j_q, j_0) = d(j_{q+1}, j_0) - 1, \ d(j_{q+1}, j_q) = 1,$$
(A.15)

то существует правильная последовательность транспозиций вида $j_0 \longrightarrow j_1 \longrightarrow \dots j_r$, 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.15).

Индукция по r. Базис очевиден. Шаг. Пусть Лемма 1 верна для r-1 и докажем ее для r. Пусть сначала выполнены равенства (A.15). По предположению индукции существует правильная последовательность P транспозиций $j_0 \longrightarrow \ldots j_{r-1}$, и, в силу $d(j_{q+1}, j_q) = 1$ переход $j_{r-1} \longrightarrow j_r$ - 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 $j_0 \longrightarrow \ldots \longrightarrow j_r$, причем он затрагивается именно на последнем шаге $j_{r-1} \longrightarrow j_r$. 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

¹Так определенное расстояние - через число транспозиций, удобнее хамминговского, так как последнее между элементами B_{k-1}^n всегда четно.

с номерами 1, 2, ..., r-1 на позиции r, r+1, ..., 2r-2 в произвольном порядке, на которых первоначально стояли нули. Причем последняя транспозиция $j_{r-1} \longrightarrow j_r$ 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 $j_0 \longrightarrow j_1 \longrightarrow \ldots j_r$, 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 $j_0 \longrightarrow \ldots \longrightarrow j_r$ - правильная последовательность транспозиций, и, по предположению индукции, равенства (A.15) выполнены для всех $q = 0, 1, \ldots, r - 1$. Второе равенство будет выполнено в силу того, что $j_{r-1} \longrightarrow j_r$ - 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 $j_0 \longrightarrow \ldots \longrightarrow j_r$, 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 $j_0 \longrightarrow \ldots \longrightarrow$ $j_1 \longrightarrow \ldots \longrightarrow j_2$. 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 .

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 р. Тогда ровно р членов его семьи имеют ранг p-1, остальные n-k+1-p имеют ранг p.

Доказательство. Заметим сначала, что $0 \le p \le \min\{k-1, n-k+1\}$. 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 какомто кубите из rem(j'). Тогда все остальные члены семьи [j'] будут иметь ранг p (см. рисунок A.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



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 $j_0 \rightarrow$... $\rightarrow j'$ не делать подстановку с кубитом q, получив вместо j' нового родоначальника для члена [j'] ранга 2.

следующим образом. Пусть p = r(j). Положим

$$\lambda_j^0 = (-1)^p \frac{p!}{\prod_{s=0}^p (n-k+1-s)}.$$
(A.16)

Корректность этого определения следует из Леммы 2, которая обеспечивает отсутствие нулей в знаменателе. Действительно, в силу $p \leq n - k + 1$ единственная 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 (3.11) 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 (3.11) 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.16) для p и p-1, преобразуем уравнение (3.11) в сумму слагаемых вида

$$(-1)^{p-1} \frac{(p-1)!p}{\prod\limits_{s=0}^{p-1} (n-k+1-s)} + (-1)^p \frac{p!(n-k+1-p)}{\prod\limits_{s=0}^{p} (n-k+1-s)} = 0.$$

Выполнение уравнения (3.11) для любой семьи ненулевого ранга и его нарушение для семьи нулевого ранга при выбранных значениях переменных доказывает, что уравнение (3.11) 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.



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.

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):

$$|\mathcal{S}\rangle = |(1 * \dots * * \dots * 0 - 0 * \dots * * \dots * 1)(*1 \dots * * \dots 0 * - * 0 \dots * * \dots 1*) \\ \dots \\ (* \dots * 10 * \dots * - * \dots * 01 * \dots *)\rangle.$$
(A.17)

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:

$$s_{p,q} = |0\rangle_p |1\rangle_q - |1\rangle_p |0\rangle_q, \ t_{p,q}^0 = |0\rangle_p |1\rangle_q + |1\rangle_p |0\rangle_q, \ t_{p,q}^1 = |0\rangle_p |0\rangle_q, \ t_{p,q}^{-1} = |1\rangle_p |1\rangle_q.$$
(A.18)

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 $p \neq q \ Im(An_{p,q}) = L_{p,q}, \ Ker(An_{p,q}) = L_{p,q}^{\perp} \ u \ dля |\Psi\rangle \in L_{p,q}$ 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:

$$\mathcal{P}_{p,q} = \frac{1}{2} \sum_{k \in r(p,q)} |s_{p,q} \otimes k\rangle \langle s_{p,q} \otimes k|.$$
(A.19)

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 $\pm 2^{-r}$, r = 0, 1, ..., n-1. Указание: если есть два разбиения множества Q кубитов на пары: \mathcal{K}_1 и \mathcal{K}_2 , соответствующих двум синглетным состояниям $|\Psi_{\mathcal{K}_1}\rangle$ и $|\Psi_{\mathcal{K}_2}\rangle$, можно разбить множество Q на s циклов, в каждом из которых пара кубитов, спаренных в \mathcal{K}_1 , будет чередоваться с парой кубитов, спаренных в \mathcal{K}_2 . Докажите, что тогда $\langle \Psi_{\mathcal{K}_1} | \Psi_{\mathcal{K}_2} \rangle = \pm 2^{s-n/2}$.

Cnedcmeue: $An_{p,q} = 2\mathcal{P}_{p,q}$.

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.
$$\Pi pu \ k > 0$$
 $D_k^n \subset L(\bigcup_{p \neq q} L_{p,q}).$

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 $k \in \{1, 2, ..., N-1\}$ 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, 6.3) 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 **Q** квантования амплитуд они различны, и их аплитуды противоположны. Поскольку разница между $|\theta\Psi\rangle$ и $cH|\Psi\rangle = 0$ (c, конечно, зависит от ε) стремится к нулю при $\varepsilon \to 0$ в силу (6.6), 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 $\varepsilon \to 0$, 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

$$|D_0\rangle = \sum_{p \neq q} s_{p,q} \otimes |D_{p,q}\rangle, \tag{A.20}$$

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.20).

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 [26] доказано, что это эквивалентно выполнению раветства $U^{\otimes n}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ 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 [26] и нашего определения темноты для точного решения.

В работе [26] также дана похожая алгебраическая характеристика темных состояний *d*- уровневых атомов при *d* > 2; явное описание таких состояний представляет интересную задачу.

А.6 Энтропия

Энтропия - понятие из термодинамики, означающее меру хаоса в каком-либо статистическом распределении вероятностей $\bar{p} = (p_1, p_2, ..., p_N)$. 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 класические символы 1, 2, ..., N, причем делает это для каждого символа с вероятностями $p_1, p_2, ..., p_N$ 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

$$S(\bar{p}) = -\sum_{i=1}^{N} p_i \, \log(p_i).$$
 (A.21)

Квантовый аналог - энтропия фон Неймана от матрицы плотности ρ , определяется как $N(\rho) = -tr(\rho \log(\rho))$, где логарифм матрицы определяется через степенной ряд. Она совпадает с энтропией Шеннона для диагональной формы матрицы ρ . $N(tr_1(\rho_{comp}))$ 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. [73]).

А.7 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. [74]). 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 $r_1, r_2, ..., r_n, ... \to x$ $(n \to \infty)$, 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. A 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 $r_n^x \to x \ (n \to \infty)$, то $r_n^y \to y \ (n \to \infty)$.

Задача. Будет ли функция Хэвисайда

$$\mathcal{X}(x) = \begin{cases} 0 & ecnu \ x \le 0, \\ 1 & ecnu \ x > 0 \end{cases}$$
(A.22)

конструктивной?

Указание. Ответ: нет. Применить уже упоминавшуюся неразрешимость проблемы применимости алгоритма к паре "алгоритм, слово".

Справедливо и более сильное утверждение - Теорема Маркова - Цейтина ([74], [75]):

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. [3].



А.8 Реализация квантового преобразования Фурье на квантовом компьютере

Договоримся представлять целое число вида $a = a_0 + a_0 2 + \ldots + a_{l-1} 2^{l-1}$ базисным состоянием $|a_0 \ a_1 \ \ldots \ a_{l-1}\rangle$ и располагать все a_j сверху вниз. Такое же соглашение примем и для выхода, только бинарные знаки b_j числа $b = b_0 + b_0 2 + \ldots + b_{l-1} 2^{l-1}$ будем писать в обратном порядке - снизу вверх.

Окружности здесь обозначают преобразование W^1 , двухкубитовые операции имеют вид:

$$U_{k,j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi/2^{k-j}} \end{pmatrix}, \ k > j.$$
(A.23)

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: $b'_j = b_{l-1-j}, \ j = 0, 1, \ldots, l-1$ - 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 $a \ k \ b$ 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:

$$\pi \sum_{l>k>j\geq 0} \frac{a_j b'_k}{2^{k-j}} + \pi \sum_{l>j\geq 0} a_j b'_j = 2\pi \sum_{l>j+k\geq 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = 2\pi \sum_{l>j,k\geq 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = 2\pi \sum_{l>j,k\geq 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = 2\pi \sum_{l>j\geq 0} a_j 2^j \sum_{l>k\geq 0} b_k 2^j = \frac{2\pi}{2^l}.$$
(A.24)

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.

A.9 Спонтанная эмиссия фотонов темными состояниями

Ансамбль атомов, находящийся в темном состоянии, не способен испускать фотоны. Но что будет происходить, если мы станем деформировать гамильтониан? Такую деформацию легко устроить, перемещая атомы в полости с помощью медленных движений оптических пинцетов. Такое перемещение вызовет изменение энергии взаимодействия с полем для перещаемого атома.

Интересен такой вопрос: в какой мере сохраняется свойство темноты при движении атомов внутри полости? Оказывается, такое перемещение сохраняет темноту только с большой вероятностью, но есть малая вероятность испускания фотона или фотонов, если атомов много.

Рис. А.4: Вероятность испускания фотона синглетом при деформации гамильтониана так, что сначала $g_2(t) \to 0$ а потом симметричным образом $g_2(t) \to g_1$ - отсюда два горба на графике. Максимальная вероятность не зависит от плавности деформации.



Рассмотрим темное состояние - синглет двух атомов вида $g_1|01\rangle - g_2|10\rangle$, где $g_{1,2}$ энергия взаимодействия первого или второго атома с полем. Допустим, что мы двигаем второй атом, приближая его к зеркалу, так что $g_2(t) \rightarrow 0$, причем первый атом стоит на месте: $g_1(t) = const$. Если это движение очень медленное, на участке, где спектральные линии не сливаются, может быть выполнено условие адиабатической теоремы (4.0.1), так что мы можем утверждать, что собственное состояние гамильтониана $|0\rangle_{ph}|s_{12}\rangle$ переходит в собственное. Однако, это нам не гарантирует сохранения свойства темноты: атомная часть в собственном состоянии может быть и не темной (такие состояния мы называем химерами).

На рисунке А.4 изображена вероятность спонтанной эмиссии фотона синглетом при плавной деформации гамильтониана; при этом максимальная вероятность порядка 10⁻⁴не зависит от того, насколько плавно меняется гамильтониан. При циклической деформации состояние созвращается к первоначальному синглету.

Введем функцию деформации гамильтониана

$$G(t) = \begin{cases} e^{-(5\frac{t}{T})^2} & 0 \le t \le 0.5T\\ e^{-(5\frac{T-t}{T})^2} & 0.5T \le t \le T \end{cases}$$
(A.25)

график которой изображен на рисунке А.5.



Рис. А.5: G(t)

Рассмотрим теперь более сложный случай состояния 4 атомов в виде пары синглетов: $|s_{12}\rangle|s_{34}\rangle = (g_1|01\rangle - g_2|10\rangle) \otimes (g_3|01\rangle - g_4|10\rangle)$ и будем изменять гамильтониан таким образом, что $g_1 = g_3 = const, g_2(0) = g_4(0) = g_1, g_2(t) = g_4(t) \rightarrow 0$, а затем симмтерично $g_2 = g_4 \rightarrow g_1$. Численный расчет показывает, что вероятность эмиссии хотя бы одного фотона при такой деформации гамильтониана имеет вид, показанный на рисунке А.6



Рис. А.6: вероятность того, что в полости в момент t будет хотя бы один явный фотон при разных видах деформации гамильтониана.

Если допустить перемещения атомов из полости в полость, а вместо темных состояний рассмотреть черные, эффект спонтанной эмиссии при деформации гамильтониана также будет наблюдаться. Но в этом случае при добавлении новых атомов в систему этот эффект будет не усиливаться, а ослабляться. Этот факт говорит о том, что взаимодействие между синглетами осуществляется именно через виртуальные фотоны, так как их влияние усиливается в случае единого поля в одном резонаторе.

Литература

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. 5-е изд., стереотип. М.: ФИЗМАТ-ЛИТ, 2012. — 224 с. — 500 экз. — ISBN 978-5-9221-0819-5.
- [2] Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. 4-е изд. М.: Наука 1984.— 600 с.
- [3] R.Feynman, QED: The strange theory of linght and matter, Princeton University Press, 1985.
- [4] 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.
- [5] Ю. И. Богданов, Д. В. Фастовец, 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.
- 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
- [7] H. H. Rosenbrock. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // The Computer Journal. 1963. Т. 5, вып. 4.
- [8] P.Benioff, Quantum Mechanical Models of Turing Machines That Dissipate No Energy Phys. Rev. Lett., Vol. 48, 1982, pp. 1581–1585.
- [9] Richard P. Feynman, Simulating Physics with Computers, International Journal of Theoretical Physics, Vol. 21, Nos. 6/7, 1982, pp. 467-488.
- [10] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. Smolin, H. Weinfurte r, Elementary gates for quantum computation Phys.Rev. A52 (1995) 3457.
- [11] А. Китаев, А. Шень, М. Вялый, Классические и квантовые вычисления, 1999. 192 с. ISBN 5-900916-35-9.
- [12] 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).

- [13] 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.
- [14] Y.Ozhigov, Lower bounds of a quantum search for an extreme point, Proc.Roy.Soc.Lond. A455 (1999) 2165-2172.
- [15] 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.
- [16] C. Zalka: Grover's quantum searching algorithm is optimal. Phys. Rev. A 60 (1999) 2746–2751.
- [17] Ozhigov Y.I. Quantum computers speed up classical with probability zero, Chaos, Solitons and Fractals, 1999, 10, 1147-1163.
- [18] C.Zalka, Simulating quantum systems on a quantum computer, Proceedings of The Royal Society A 454(1969):313-322, January 1998.
- [19] S.Wiesner, Simulations of Many-Body Quantum Systems by a Quantum Computer, arXiv:quant-ph/9603028.
- [20] P.W.Shor, Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory, Phys. Rev. A 52, R2493(R), 1995.
- [21] H. Breuer and F. Petruccione, The Theory of Open Quantum Systems, Oxford (2002).
- [22] 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.
- [23] R. Dicke, Phys. Rev. 93, 99 (1954).
- [24] 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
- [25] Michael Thomas Tavis, A Study of an N Molecule Quantized-Radiation-Field Hamiltonian, Dissertation, https://arxiv.org/abs/1206.0078.
- [26] 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.
- [27] Kulagin A. V., Ozhigov Yu. I. Optical Selection of Dark States of Multilevel Atomic Ensembles, Computational Mathematics and Modeling (Consultants Bureau) - 2020.
 - vol. 31, № 4. - pp. 431-441.
- [28] 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

- [29] 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
- [30] 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.
- [31] Popescu, S., Knill-Laflamme-Milburn Quantum Computation with Bosonic Atoms, PRL 99, 130503 (2007).
- [32] 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.
- [33] 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).
- [34] Azuma H., Quantum computation with the Jaynes-Cummings model, Prog. Theor. Phys. 126, 369-385 (2011).
- [35] Kulagin A.V., Ozhigov Y.I., Realization of Grover Search Algorithm on the Optical Cavities, Lobachevskii Journal of Mathematics, 2022, Vol. 43, No. 4, pp. 870–878.
- [36] Ю.И.Ожигов, Конструктивная физика, РХД, 2009, англ. перевод "Constructive Physics", Nova Publishers, 2010.
- [37] 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
- [38] Plenio, M., et al., "Dephasing assisted transport: Quantum networks and biomolecules New J. Phys. 10, 113019 (2008).
- [39] 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
- [40] 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.
- [41] Miao Huei-huei, Yuri Ozhigov, Using a modified version of the Tavis-Cummings-Hubbard model to simulate the formation of neutral hydrogen molecule, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, Elsevier BV (Netherlands), vol. 622, № 1, pp. 128851, https://arxiv.org/abs/2209.09607.
- [42] А. Мессиа, Квантовая механика, том I, II. 1978-1979, М. Наука.
- [43] Y.Ozhigov, Three principles of quantum computing, Quantum Information and Computation, 22, 15-16, 2022, DOI: 10.26421/QIC22.15-16-2

- [44] Мак-Каллок У. С., Питтс В. Логическое исчисление идей, относящихся к нервной активности Архивная копия от 27 ноября 2007 на Wayback Machine // Автоматы / Под ред. К. Э. Шеннона и Дж. Маккарти. — М.: Изд-во иностр. лит., 1956. — С. 363—384. (Перевод английской статьи 1943 г.)
- [45] Галушкин А. И. Синтез многослойных систем распознавания образов. М.: Энергия, 1974.
- [46] Барцев С. И., Охонин В. А. Адаптивные сети обработки информации. Красноярск: Ин-т физики СО АН СССР, 1986. Препринт N 59Б. — 20 с.
- [47] Гальберштам Н. М., Баскин И. И., Палюлин В. А., Зефиров Н. С. Нейронные сети как метод поиска зависимостей структура — свойство органических соединений // Успехи химии. — Российская академия наук, 2003. — Т. 72, № 7. — С. 706—727.
- [48] Баскин И. И., Палюлин В. А., Зефиров Н. С. Применение искусственных нейронных сетей в химических и биохимических исследованиях Архивная копия от 10 июля 2007 на Wayback Machine // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1999. Т. 40. № 5. стр. 323-326.
- [49] A.V.Tsukanov, Optomechanical systems and quantum computing, Russian Microelectronics, September 2011, 40:333.
- [50] Бор Н., Дискуссии с Эйнштейном о проблемах теории познания в атомной физике // Атомная физика и человеческое познание М.: ИЛ, 1961. стр. 60.
- [51] Гейзенберг В. Физика и философия. Часть и целое. М.: Наука, 1989. 400 с.
 ISBN 5-02-012452-9.
- [52] V.M.Akulin, Dynamics of Complex Quantum Systems, Theoretical and Mathematical Physics, Spinger, 2006.
- [53] D. Bohm, "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden Variables"I". Physical Review. 1952, 85: 166–179.
- [54] A.Khrennikov, Vaxjo Interpretation of Wave Function: 2012, Reconsideration of Foundations-6, AIP, 1508, 244-252 (2012), DOI: 10.1063/1.4773136.
- [55] 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.
- [56] 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.
- [57] Edward Farhi, Jeffrey Goldstone, Sam Gutmann, Michael Sipser, Quantum Computation by Adiabatic Evolution, https://arxiv.org/abs/quant-ph/0001106.
- [58] J. Bell, "On the Einstein Podolsky Rosen Paradox"; Physics, (1964), 1 (3): 195–200.
- [59] J. Bell, "On the problem of hidden variables in quantum mechanics"; Reeview of Modern Physics, (1966), 38, N3, ctp. 447-452.

- [60] 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.
- [61] 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).
- [62] 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.
- [63] 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.
- [64] 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
- [65] Y.I.Ozhigov, Distributed synthesis of chains with one-way biphotonic control, Quantum Information and Computation, vol. 18, 7-8, pp. 0592-0598.
- [66] Н. Н. Боголюбов, О. С. Парасюк (1955). «К теории умножения причинных сингулярных функций». ДАН СССР 100: 25.
- [67] S. Hameroff; R. Penrose, "Consciousness in the universe: A review of the 'Orch OR' theory". Physics of Life Reviews, 2014, 11 (1): 51–53.
- [68] Ф.Маттук, Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел, М., Мир, 1974.
- [69] 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.
- [70] A.Y.Khrennikov, Social Laser. Application of Quantum Information and Field Theories to Modeling of Social Processes, ISBN 9789814800839, Published November 13, 2020 by Jenny Stanford Publishing, 280 Pages.
- [71] В.В.Воеводин, Вл.В.Воеводин, Параллельные вычисления, БХВ-Петербург, 2002. 608 с. ISBN 5-94157-160-7.
- [72] Limits to Parallel Computation: P-Completeness Theory, R. Greenlaw, H. J. Hoover, W. L. Ruzzo, Oxford University Press, 1995, pp. 336.
- [73] А.С.Холево, Некоторые оценки для количества информации, передаваемого квантовым каналом связи, Пробл. передачи информ., 1973, том 9, выпуск 3, страницы 3–11.
- [74] А.А.Марков младший, О непрерывности конструктивных функций, Успехи мат. наук, 1954, 9, N 3 (61), стр. 226-229.
- [75] G.S.Tseitin, Algorithmic operators in the constructive metric spaces, Doklady Academii Nauk USSR (rus), 1959, 128, N 1, pp.49-52.
- [76] V.Kukushkin, Y.Ozhigov, Comparizon of dynamic diffusion with explicit difference scheme for Shredinger equation, Complex Systems, 22, 4, pp. 423-450, 2013, arXiv:1105.0518.
- [77] A. Yu. Chernyavskiy, Multiparticle analogue for Schmidt coefficients, pp. Quantum computers and computing, 2008,vol.8 N1, 141 -148. https://drive.google.com/drive/folders/1vanNKm1gBbNg-9uO6vRdUWkX7UupyucB
- [78] A.Y.Khrennikov, Social Laser. Application of Quantum Information and Field Theories to Modeling of Social Processes, ISBN 9789814800839, Published November 13, 2020 by Jenny Stanford Publishing, 280 Pages.
- [79] M.Buchanan, Social atom, Bloomsbury Publishing, 5 дек. 2008 г. Всего страниц: 256
- [80] 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
- [81] Michael Thomas Tavis, A Study of an N Molecule Quantized-Radiation-Field Hamiltonian, Dissertation, https://arxiv.org/abs/1206.0078.
- [82] R.Dawkins, The selfish gene, 1976, Oxford Univ. Press.
- [83] Plenio, M., et al., "Dephasing assisted transport: Quantum networks and biomolecules New J. Phys. 10, 113019 (2008).
- [84] 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.
- [85] Ожигов Ю.И., Сковорода Н.А., Проводимость атомных возбуждений в системе оптических полостей, Математическое моделирование, том 29, 1917, № 12, с. 123-134.
- [86] James Q. Quach, William J. Munro, Using dark states to charge and stabilise open quantum batteries, Phys. Rev. Applied 14, 024092 (2020).
- [87] Andre A., Duan L.M., Lukin M.D., Coherent atom interactions mediated by darkstate polaritons, Phys Rev Lett. 2002 Jun 17;88(24):243602.
- [88] J. Hansom, C. Schulte, C. Le Gall, C.Matthiesen, E. Clarke, M.Hugues, J. M. Taylor. , M.Atatüre, Environment-assisted quantum control of a solid-state spin via coherent dark states, Nature Physics 10, 725–730 (2014).
- [89] E. S. Lee, C. Geckeler, J. Heurich, A. Gupta, Kit-Iu Cheong, S. Secrest, and P. Meystre, Dark states of dressed Bose-Einstein condensates, Phys. Rev. A 60, 4006, 1999.

- [90] M. Ferretti, R. Hendrikx, E. Romero, J. Southall, R. J. Cogdell, Vladimir I. Novoderezhkin, G. D. Scholes, and R. van Grondelle, Dark States in the Light-Harvesting complex 2 Revealed by Two-dimensional Electronic Spectroscopy, Sci Rep. 2016; 6: 20834, Published online 2016 Feb 9. doi: 10.1038/srep20834.
- [91] C. Pöltl, C. Emary, T. Brandes, Spin entangled two-particle dark state in quantum transport through coupled quantum dots, Phys. Rev. B 87, 045416 (2013).
- [92] T.Tanamoto, K. Ono, F. Nori, Steady-state solution for dark states using a three-level system in coupled quantum dots, Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 51, 02BJ07 (2012).
- [93] H. Rose, D. V. Popolitova, O. V. Tikhonova, T. Meier, P. R. Sharapova, Dark-state and loss-induced phenomena in the quantum-optical regime of Lambda -type threelevel systems, Phys. Rev. A 103, 013702 (2021).
- [94] Yuri Ozhigov, You Jiangchuan, Description of the non-Markovian dynamics of atoms in terms of a pure state, accepted for publication in Computational mathematics and modelling, https://arxiv.org/abs/2305.00564.
- [95] Á. R. Vasconcellos, †, F. S. Vannucchi, *, S. Mascarenhas and R. Luzzi, Fröhlich Condensate: Emergence of Synergetic Dissipative Structures in Information Processing Biological and Condensed Matter Systems, Information 2012, 3(4), 601-620; https://doi.org/10.3390/info3040601
- [96] S. Spiegelman, I. Haruna, I. B. Holland, and D. MillsAuthors, The synthesis of a self-propagating and infectious nucleic acid with a purified enzyme, 1965, Proc. Natl. Acad. Sci. U S A, 54 (3) 919-927, https://doi.org/10.1073/pnas.54.3.91
- [97] Herbert Fröhlich and F. Kremer Coherent Excitations in Biological Systems (Springer-Verlag, 1983) ISBN 978-3-642-69186-7.
- [98] A.Y. Khrennikov, Social Frohlich condensation: preserving societal order through sufficiently intensive information pumping, Kybernetes, 51, 13, pp. 138-155.
- [99] Fröhlich, H. Long-range coherence and energy storage in biological systems. Int. J. Quantum Chem. 1968, 2, 641–649. https://doi.org/10.1002/qua.560020505.
- [100] https://www.chem.ucl.ac.uk/cosmicdust/er-lh.htm
- [101] Francesca Fassioli, Kyu Hyung Park, Sarah E. Bard, Gregory D. Scholes, Femtosecond Photophysics of Molecular Polaritons, J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 46, 11444, https://doi.org/10.48550/arXiv.2302.05670
- [102] Li-Bao Fan, Chuan-Cun Shu, Daoyi Dong, Jun He, Niels E. Henriksen, Franco Nori, Quantum Coherent Control of a Single Molecular-Polariton Rotation, accepted by Physical Review Letters on 19 December, 2022, https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.11649
- [103] Eric W. Fischer, Janet Anders, Peter Saalfrank, Cavity-Altered Thermal Isomerization Rates and Dynamical Resonant Localization in Vibro-Polaritonic Chemistry, J. Chem. Phys. 156,154305 (2022),https://doi.org/10.48550/arXiv.2109.13574

- [104] David Wellnitz, Guido Pupillo, Johannes Schachenmayer, Disorder enhanced vibrational entanglement and dynamics in polaritonic chemistry, Commun Phys 5, 120 (2022), https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.06053
- [105] F. Herrera and F. C. Spano, Cavity-Controlled Chemistry in Molecular Ensembles, Phys. Rev. Lett. 116, 238301 (2016).
- [106] J. A. Cwik, S. Reja, P. B. Littlewood, and J. Keeling, 'Polariton condensation with saturable molecules dressed by vibrational modes, EPL 105, 47009, (2014).
- [107] F. Herrera and F. C. Spano, Theory of nanoscale organic cavities: The essential role of vibration-photon dressed states, ACS Photonics 5, 65 (2018).

Учебное издание

Ожигов Юрий Игоревич

КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТЕР

Учебное пособие

2-е издание, переработанное и дополненное

Электронное издание сетевого распространения Художественное оформление Ю. Н. Симоненко Макет утвержден 25.08.2023. Изд. № 12505



Издательство Московского университета 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 15 Тел.: (495) 939-32-91; e-mail: secretary@msupress.com http: // msupress.com. Отдел реализации: тел.: (495) 939-33-23; e-mail: zakaz@msupress.com В книге о грандиозном проекте, условно называемом «квантовый компьютер», сформулировано ограничение аппарата стандартной квантовой механики соотношением «сложность квантового состояния — точность его описания». Внимание уделено роли квантового компьютера в теории биологической эволюции и квантовому подходу к социальным процессам.

Второе издание дополнено главами, посвященными новому математическому аппарату для квантового компьютера, основанному на алгоритмах и использующему биологическую эвристику. В книге даны задачи для самостоятельной работы.



ISBN 978-5-19-011914-5

85190