

# Квантовый компьютер

Ю.И.Ожигов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова, Физико-технологический институт РАН им. К.А.Валиева, e-mail: ozhigov@cs.msu.su

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

## Аннотация

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

# Оглавление

Предисловие . . . . .	6
<b>1 Введение в квантовую механику</b>	<b>11</b>
1.1 Квантовые состояния. Формализм Дирака . . . . .	12
1.2 Измерение. Матрица плотности . . . . .	14
1.3 Композитные системы. . . . .	17
1.3.1 Частичные измерения. Смешанные состояния . . . . .	20
1.3.2 Теорема Шмидта . . . . .	24
1.3.3 Парадокс квантовой энтропии . . . . .	25
1.4 Физические величины как наблюдаемые . . . . .	26
1.4.1 Наблюдение координаты . . . . .	26
1.4.2 Квантовый оператор Фурье и наблюдение импульса . . . . .	27
1.4.3 Наблюдение момента импульса и спина . . . . .	29
1.4.4 Одновременное наблюдение нескольких величин . . . . .	29
1.5 Унитарная эволюция . . . . .	31
1.5.1 Уравнение Шредингера и решение задачи Коши для него . . . . .	31
1.5.2 Уравнение Шредингера для матрицы плотности . . . . .	32
1.5.3 Матричная динамика . . . . .	33
1.5.4 Интегралы по путям . . . . .	34
1.6 Открытая квантовая система. Квантовое основное уравнение . . . . .	37
1.7 Фейнмановский квантовый компьютер . . . . .	39
1.8 Квантовые гейты . . . . .	40
1.9 Алгоритм Гровера . . . . .	43
1.10 Алгоритм Гровера как квантовая модель сложного процесса . . . . .	46
1.11 Алгоритм Залки-Визнера . . . . .	48

1.12 Реалистическая схема квантового компьютера . . . . .	50
1.12.1 Ядро операционной системы квантового компьютера . . . . .	52



# Предисловие

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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



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



# Глава 1

## Введение в квантовую механику

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

Поэтому основным иллюстративным материалом для нас будут примеры из электродинамики.

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

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

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

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

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

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

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

## 1.1 Квантовые состояния. Формализм Дирака

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## 1.2 Измерение. Матрица плотности

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

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

Амплитуды можно представить по формуле Эйлера  $\lambda_j = |\lambda_j|e^{i\phi_j}$ ; если модуль амплитуды выражает вероятность обнаружить частицу в состоянии  $|j\rangle$  в данный момент, то фаза  $\phi_j$  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

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

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

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

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

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

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

что служит обобщением правила Борна на любой базис измерения.

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

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

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

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

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

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

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

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

Описанный прием называется квантовой томографией. Он позволяет, имея большой запас одинаково приготовленных состояний определить их амплитуды<sup>2</sup>.

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

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

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

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

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

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

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

<sup>2</sup>Различные результаты по квантовой томографии можно найти в работе [4].



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

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

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

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

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

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

### 1.3 Композитные системы.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Пользуясь данным правилом, мы можем привести тензор  $T$  к виду

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

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

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

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

### 1.3.1 Частичные измерения. Смешанные состояния

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

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

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

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

Рассмотрим матрицу плотности композитной системы вида

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

Допустим, например, что мы измеряем первый кубит и получили значение  $|j\rangle$ . В каком тогда состоянии будет находиться второй кубит? Нам надо получить матрицу плотности  $\rho_2$  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:

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

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

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

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

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

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

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

Однако матрица  $\rho_1$ , полученная по формуле (1.11), вообще говоря, уже не будет иметь вида  $|\psi\rangle \langle \psi|$  ни для какого состояния  $|\psi\rangle$  первого кубита. Что убедиться в этом, рассмотрим пример:  $|\Psi\rangle = |EPR\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ .

Матрица плотности состояния  $|EPR\rangle$  суть

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Формула (1.15) задает общий вид смешанного состояния, которое мы будем отождествлять с матрицей плотности  $\rho_1$ . Однако по заданной матрице плотности  $\rho_1$  разложение (1.15) определено не однозначно. Дело в том, что система, находящаяся в

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

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

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

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

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

Вид матрицы тензорного произведения для двухкубитного пространства выглядит так:

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

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

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

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

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

### 1.3.2 Теорема Шмидта

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

А именно, имеет место следующая

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

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

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

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

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

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



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

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

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

Что если в нашем распоряжении есть только одна из двух компонент композитной системы, например,  $S_1$ , а другая  $S_2$  находится вне доступа? В этом случае у нас имеется, фактически, только матрица плотности  $\rho_1$  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  $\rho_1$  и соответствующие им собственные вектора  $|\phi_i\rangle$ , положим  $\alpha_i = \sqrt{A_i}$ , и определим  $|\Psi\rangle \in C^N \otimes C^N$  как  $\sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i |\phi_i\rangle |\phi_i\rangle$ . Тогда из правила нахождения относительной матрицы плотности (1.11) мы получаем  $\rho_1 = tr_2(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$ .

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

### 1.3.3 Парадокс квантовой энтропии

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

Шеннона

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

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

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

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

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

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

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

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

## 1.4 Физические величины как наблюдаемые

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

Рассмотрим три примера: наблюдение координаты, импульса и энергии.

### 1.4.1 Наблюдение координаты

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

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

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

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

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

## 1.4.2 Квантовый оператор Фурье и наблюдение импульса

Квантовый оператор импульса в одномерном случае имеет в непрерывном формализме вид

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

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

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

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

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

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

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

делающим обратный переход.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 1.4.3 Наблюдение момента импульса и спина

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

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

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

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

- матрицы Паули.

### Наблюдение энергии

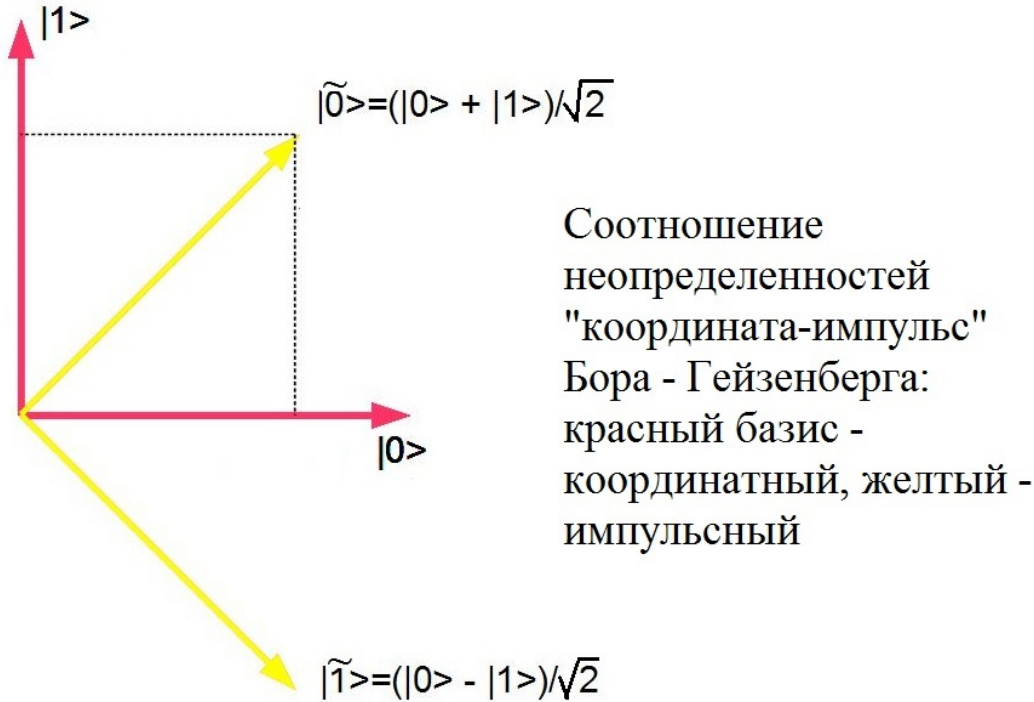
Эрмитов оператор энергии, называемый гамильтонианом, для механической системы есть сумма кинетической и потенциальной энергий:  $H = E_{kin} + V$ , где для одной частицы  $E_{kin} = p^2/2m$ , оператор импульса  $p = \frac{\hbar}{i}\nabla$ , потенциал есть функция, зависящая только от координаты  $V =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

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

### 1.4.4 Одновременное наблюдение нескольких величин

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

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



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

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

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

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

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

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

значения в отличии от момента).

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

## 1.5 Унитарная эволюция

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

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

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

### 1.5.1 Уравнение Шредингера и решение задачи Коши для него

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

Итак, уравнение Шредингера имеет вид:

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

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

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

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

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

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

(Доказать!)

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

### 1.5.2 Уравнение Шредингера для матрицы плотности

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

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

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

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



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

### 1.5.3 Матричная динамика

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

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

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

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

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

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

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

$$\lambda_i(nt) = \sum_{j,k_1,r_2,\dots,k_{n-1}} \lambda_j(0)u_{ik_{n-1}} \dots u_{k_2 k_1} u_{k_1 j} \quad (1.31)$$

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

### 1.5.4 Интегралы по путям

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

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

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

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

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

Если начальное состояние частицы  $\Psi(x, t)$  - дельта-функция, сосредоточенная в точке  $x_0$ , то фейнмановское ядро есть волновая функция в момент  $t$ . Для случая свободной частицы  $V = 0$ , так что действие будет интегралом от кинетической энергии. Можно показать (см. [3]), что ядро для свободной частицы имеет вид  $c \cdot \exp(-im(x - x_0)^2/2\hbar t)$  для константы  $c$ , зависящей лишь от времени  $t$ . Это определяет 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 (1.33) мы можем увидеть некоторое несоответствие с формулой (1.26), а именно: здесь нет знака минус, и при вычислении показателя экспоненты вместо гамильтониана, как в (1.26) используется лагранжиан, у которого потенциальная энергия стоит со знаком минус. Как это объяснить?

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

Разумеется, это рассуждение не есть доказательство того, что фейнмановские

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

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

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

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

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

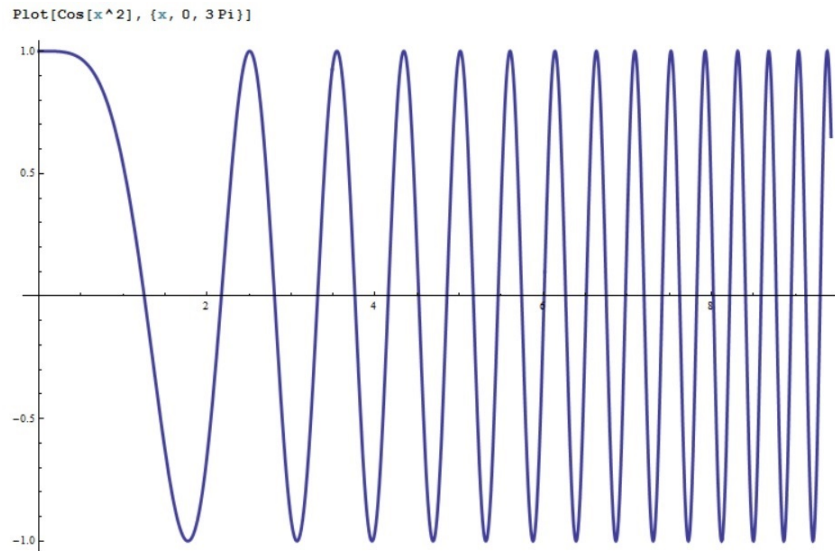
Допустим, мы моделируем какой-либо процесс, выбирая шаг по времени  $dt$ . Если этот процесс можно адекватно представить, выбрав такое  $dt$ , при котором изменение действия  $dS$  будет намного больше постоянной Планка  $\hbar \approx 10^{-27}$  эрг сек., то в формуле (1.33) "выживут" только те траектории,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

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

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

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

Рис. 1.2: Вещественная часть ядра Фейнмана свободной частицы.



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

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

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

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

## 1.6 Открытая квантовая система. Квантовое основное уравнение

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

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

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

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

основным уравнением Коссаковского - Линдблада - Глаубера - Сударшана:

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

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

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

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

1. Вычисляется унитарная динамика матрицы плотности

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

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

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

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

## 1.7 Фейнмановский квантовый компьютер

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

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

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

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

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

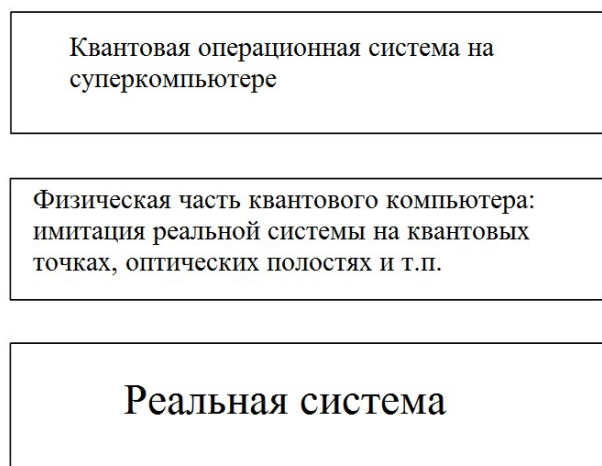
Таким образом, если выполнять последовательные действия над квантовой частью, на которые указывает классическая часть, мы получим квантовое вычисление, определяемое данным алгоритмом.

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

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

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

Рис. 1.3: Моделирование реальности на квантовом компьютере



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

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

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

## 1.8 Квантовые гейты

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



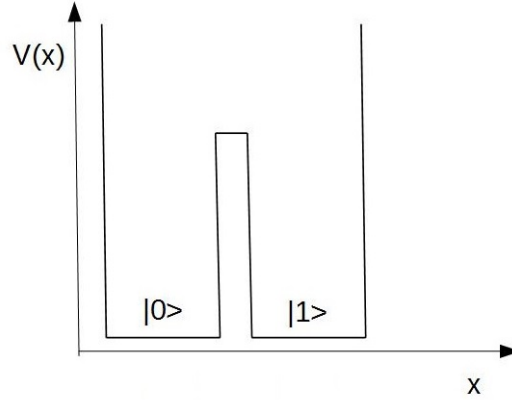


Рис. 1.4: Квантовая точка в виде двух-ямного потенциала

заданной точностью (см. [8])<sup>3</sup>.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

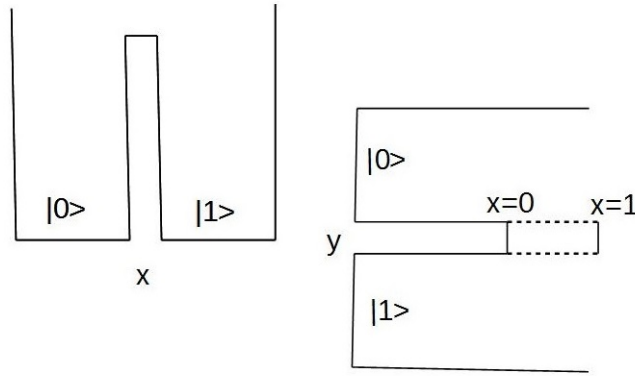


Рис. 1.5: CiNOT на зарядовых состояниях

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

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

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

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

Допустим сначала, что положение электрона  $x$  нам удалось каким-то образом зафиксировать, так что он не туннелирует между своими ямами. Тогда можно подыскать такое время  $\tau_{CiNOT}$ , 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  $\tau_{CiNOT}$  в него укладывалось бы четное число осцилляций с верхним индексом 0 и нечетное - с верхним индексом 1, что и даст нам требуемый оператор  $CNOT$  при фиксации положения  $x$ - электрона. Детали представляются читателю.

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

## 1.9 Алгоритм Гровера

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

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

Пусть задана булева функция  $f$  от  $n$  переменных, причем уравнение

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

После этого будем делать последовательные применения оператора  $G = -I_{\bar{0}}I_{x_{tar}}$ , начиная с  $|\bar{0}\rangle$   $[\pi\sqrt{N}/4]$  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  $|\bar{0}\rangle$  и  $|x_{tar}\rangle$ , причем  $G$  будет дважды инвертировать ориентацию этой двумерной вещественной плоскости. Значит,  $G$  есть ее поворот на некий угол  $\beta$ , найти который можно, следя за одной единственной точкой, например, за концом вектора  $|\bar{0}\rangle$ . Легко показать (сделайте это!), что  $\beta = 2 \arcsin(1/\sqrt{N})$ . Теперь из высокой точности равенства  $\alpha \approx \arcsin(\alpha)$  следует искомое равенство

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

что и требовалось.

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

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

<sup>4</sup>См. также [13], [14].

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

## 1.10 Алгоритм Гровера как квантовая модель сложного процесса

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$S = S_f = \sigma_x(i_1)\sigma_x(i_2)\dots\sigma_x(i_s)$ , инвертирующий в точности те биты, в которых в  $x_{tar}$

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

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

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

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

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

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

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

Оператор  $G_{x_{in}}$  осуществляет запутывание частиц, входящих в систему таким образом, что целевое состояние  $|x_{tar}\rangle$  на каждом шаге получается оптимальным образом<sup>5</sup>, 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  $\tau$ , важна именно концентрация амплитуды на следующем состоянии системы.

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

<sup>5</sup>Оптимальность GSA доказана с разных точек зрения, см., например, [12].

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

## 1.11 Алгоритм Залки-Визнера

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

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

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

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

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

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

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

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



приближение Троттера

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

мы получим алгоритм  $Z$  вычисления эволюции в виде:

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

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

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

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

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

## 1.12 Реалистическая схема квантового компьютера

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

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

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

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

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

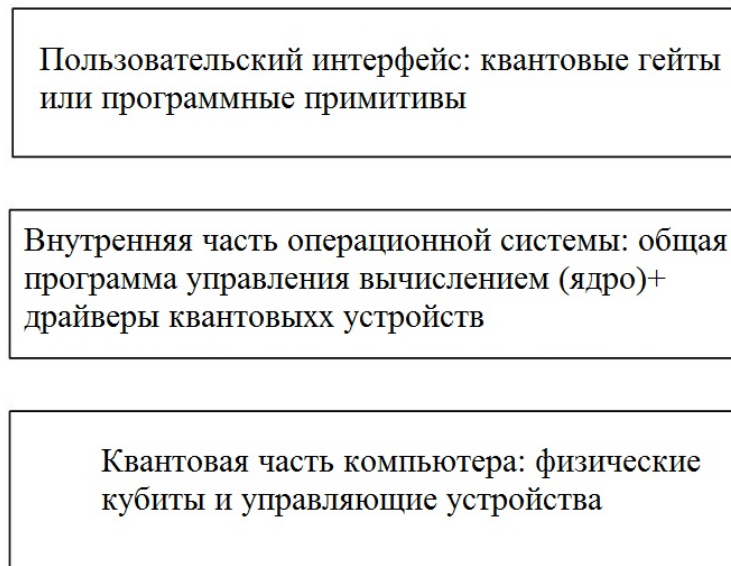


Рис. 1.6: Схема квантового компьютера

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

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

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

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

нашу модель классическими средствами отображения реальности.

### 1.12.1 Ядро операционной системы квантового компьютера

Ядром квантовой операционной системы является программа, написанная для классического суперкомпьютера, которая должна управлять общим ходом вычислений. Если программные примитивы с высокой точностью моделируют динамику малого фрагмента всей модели, то ядро операционной системы должно управлять динамикой квантового состояния всей рассматриваемой системы, причем на достаточно большом отрезке времени, для того, чтобы модель отражала содержательные черты 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  $k = 0, 1, \dots, N - 1$ ,  $N = 2^n$ , для  $k$ , бинарное разложение которого представляет базисный вектор  $|k\rangle$  в  $n$  кубитном пространстве. Тогда линейным преобразованием в классическом пространстве мы переводим отрезок  $[-A, A]$ , на котором разыгрывается динамический сценарий, в множество точек  $k/N$ , а переход к импульсному базису производится в виде квантового преобразования Фурье. В этом случае мы имеем  $|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |j\rangle$  и можем применять фейнмановский интерфейс для моделирования динамики волнового вектора по схеме, изложенной в параграфе 1.11.

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

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

# 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] R.Feynman, QED: The strange theory of light and matter, Princeton University Press, 1985.
- [3] R.Feynman, D.Hibbs, Quantum mechanics and path integrals, 1984, Р.Фейнман, Д.Хиббс, Квантовая механика в интегралах по траекториям, Москва, Наука, Физ.-мат. лит.
- [4] Ю. И. Богданова, Д. В. Фастовецас, Б. И. Бантыш, А. Ю. Чернявский, И. А. Семенихин, Н. А. Богданова, К. Г. Катамадзе, Ю. А. Кузнецов, А. А. Кокин, В. Ф. Лукичев, Методы анализа качества элементной базы квантовых информационных технологий, Квантовая электроника, 2018, том 48, N 11, страницы 1016–1022.
- [5] Shor P. Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithms and Factoring // Foundations of Computer Science, 1994 Proceedings., 35th Annual Symposium on — IEEE, 1994. — P. 124–134. — ISBN 0-8186-6580-7 — doi:10.1109/SFCS.1994.365700
- [6] P.Benioff, Quantum Mechanical Models of Turing Machines That Dissipate No Energy Phys. Rev. Lett., Vol. 48, 1982, pp. 1581–1585.
- [7] Richard P. Feynman, Simulating Physics with Computers, International Journal of Theoretical Physics, VoL 21, Nos. 6/7, 1982, pp. 467-488.
- [8] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. Smolin, H. Weinfurter, Elementary gates for quantum computation Phys.Rev. A52 (1995) 3457.
- [9] А. Китаев, А. Шень, М. Вялый, Классические и квантовые вычисления, 1999. 192 с. ISBN 5-900916-35-9.
- [10] L. Fedichkin, M. Yanchenko, K. A. Valiev, Novel coherent quantum bit using spatial quantization levels in semiconductor quantum dot, Quantum Computers and Computing 1, 58 (2000).
- [11] L.Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search, Proceedings, 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC), May 1996, pages 212-219. Proceedings, Melville, NY, 2006, vol. 810, electronic version: xxx.lanl.gov, quant-ph/0610052.

- [12] Y.Ozhigov, Lower bounds of a quantum search for an extreme point, Proc.Roy.Soc.Lond. A455 (1999) 2165-2172.
- [13] C.H. Bennett, E. Bernstein, G. Brassard and U.V. Vazirani, "Strengths and weaknesses of quantum computing" SIAM J. on Computing, Vol. 26, No. 5, pp. 1510-1523, 1997.
- [14] C. Zalka: Grover's quantum searching algorithm is optimal. Phys. Rev. A 60 (1999) 2746-2751.
- [15] Ozhigov Y.I. Quantum computers speed up classical with probability zero, Chaos, Solitons and Fractals, 1999, 10, 1147-1163.
- [16] C.Zalka, Simulating quantum systems on a quantum computer, Proceedings of The Royal Society A 454(1969):313-322, January 1998.
- [17] S.Wiesner, Simulations of Many-Body Quantum Systems by a Quantum Computer, arXiv:quant-ph/9603028.
- [18] P.W.Shor, Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory, Phys. Rev. A 52, R2493(R), 1995.
- [19] H. Breuer and F. Petruccione, The Theory of Open Quantum Systems, Oxford (2002).
- [20] A. V. Kulagin, V. Y. Ladunov, Y. I. Ozhigov, N. A. Skovoroda, and N. B. Victorova "Homogeneous atomic ensembles and single-mode field: review of simulation results Proc. SPIE 11022, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2018, 110222C (15 March 2019); <https://doi.org/10.1117/12.2521763>.
- [21] R. Dicke, Phys. Rev . 93, 99 (1954).
- [22] E.T. Jaynes, F.W. Cummings, Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser, Proc. IEEE 51 (1): 89-109, (1963). doi:10.1109/PROC.1963.1664
- [23] Michael Thomas Tavis, A Study of an N Molecule Quantized-Radiation-Field Hamiltonian, Dissertation, <https://arxiv.org/abs/1206.0078>.
- [24] P. Kok, K. Nemoto, and W. J. Munro, Properties of multi-partite dark states, e-print 2002 <http://lanl.arxiv.org/abs/quant-ph/0201138>.
- [25] Knill, E., Laflamme, R., Milburn, G. J. (2001). "A scheme for efficient quantum computation with linear optics". Nature. Nature Publishing Group. 409 (6816): 46-52
- [26] Gottesman, D., Chuang, I. L. (1999-11-25). "Demonstrating the viability of universal quantum computation using teleportation and single-qubit operations". Nature. 402 (6760): 390-393
- [27] Bennett, Charles H.; Brassard, Gilles; Crépeau, Claude; Jozsa, Richard; Peres, Asher; Wootters, William K. (1993-03-29). "Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels". Physical Review Letters. 70 (13): 1895-1899.

- [28] Popescu, S., Knill-Laflamme-Milburn Quantum Computation with Bosonic Atoms, PRL 99, 130503 (2007).
- [29] G. Rempe, H. Walther, and N. Klein. Observation of quantum collapse and revival in a one-atom maser, Phys. Rev. Lett., 1987, Vol. 58, no. 4, p. 353.
- [30] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano, and D. J. Wineland, Demonstration of a Fundamental Quantum Logic Gate, Phys. Rev. Lett. 75, 4714 (1995).
- [31] Azuma H., Quantum computation with the Jaynes-Cummings model, Prog. Theor. Phys. 126, 369-385 (2011).
- [32] V. Ladunov, Y. Ozhigov, N. Skovoroda , Computer simulation of quantum effects in Tavis-Cummings model and its applications, SPIE Proceedings, vol. 10224, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2016; 102242X (2017) <https://doi.org/10.1117/12.2267190>
- [33] Plenio, M., et al., "Dephasing assisted transport: Quantum networks and biomolecules New J. Phys. 10, 113019 (2008).
- [34] Fenna, R. E.; Matthews, B. W. (1975). "Chlorophyll arrangement in a bacteriochlorophyll protein from *Chlorobium limicola*". Nature 258 (5536): 573–7. Bibcode:1975Natur.258..573F. doi:10.1038/258573a0
- [35] Y.Ozhigov, Dark states of atomic ensembles: properties and preparation, Proc. SPIE 10224, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2016, 102242Y (December 30, 2016); doi:10.1117/12.2264516.
- [36] A.V.Tsukanov, Optomechanical systems and quantum computing, Russian Microelectronics, September 2011, 40:333.
- [37] Бор Н., Дискуссии с Эйнштейном о проблемах теории познания в атомной физике // Атомная физика и человеческое познание — М.: ИЛ, 1961. — стр. 60.
- [38] Гейзенберг В. Физика и философия. Часть и целое. — М.: Наука, 1989. — 400 с. — ISBN 5-02-012452-9.
- [39] V.M.Akulin, Dynamics of Complex Quantum Systems, Theoretical and Mathematical Physics, Springer, 2006.
- [40] D. Bohm, "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden Variables" I". Physical Review. 1952, 85: 166–179.
- [41] A.Khrennikov, Vaxjo Interpretation of Wave Function: 2012, Reconsideration of Foundations-6, AIP, 1508, 244-252 (2012), DOI: 10.1063/1.4773136.
- [42] Aspect, Alain; Dalibard, Jean; Roger, Gérard (December 1982). "Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers". Physical Review Letters. 49 (25): 1804–1807.
- [43] Jian-Wei Pan; D. Bouwmeester; M. Daniell; H. Weinfurter; A. Zeilinger (2000). "Experimental test of quantum nonlocality in three-photon GHZ entanglement". Nature. 403 (6769): 515–519.

- [44] J. Bell, "On the Einstein Podolsky Rosen Paradox"; *Physics*, (1964), 1 (3): 195–200.
- [45] J. Bell, "On the problem of hidden variables in quantum mechanics"; *Reeview of Modern Physics*, (1966), 38, N3, стр. 447-452.
- [46] Aspect, Alain; Dalibard, Jean; Roger, Gérard, (1982), Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time- Varying Analyzers. *Physical Review Letters*. 49 (25): 1804–1807. Bibcode:1982PhRvL..49.1804A. doi:10.1103/PhysRevLett.49.1804.
- [47] Daniel M. Greenberger, Michael A. Horne, Anton Zeilinger, Going Beyond Bell's Theorem, in: 'Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe', M. Kafatos (Ed.), Kluwer, Dordrecht, 69-72 (1989).
- [48] AIP Conference Proceedings, vol. 962, Quantum Theory: Reconsideration of foundations -4, ed. Guillaume Adenier, Andrei Yu. Khrennikov, Pekka Lahti, Vladimir I. Man'ko and Theo M. Nieuwenhuizen, (2007), ISBN: 978-0-7354-0479-3.
- [49] F.Ablayev, C.Moore, C.Pollett, Quantum and Stochastic Branching Programs of Bounded Width, International Colloquium on Automata, Languages, and Programming , ICALP 2002: Automata, Languages and Programming pp 343-354.
- [50] Dovesi, R., Civalleri, B., Roetti, C., Saunders, V. R. and Orlando, R. (2005) Ab Initio Quantum Simulation in Solid State Chemistry, in *Reviews in Computational Chemistry*, Volume 21 (eds K. B. Lipkowitz, R. Larter and T. R. Cundari), John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA. doi: 10.1002/0471720895.ch1
- [51] Y.I.Ozhigov, Distributed synthesis of chains with one-way biphotonic control, *Quantum Information and Computation*, vol. 18, 7-8, pp. 0592-0598.
- [52] Н. Н. Боголюбов, О. С. Парасюк (1955). «К теории умножения причинных сингулярных функций». *ДАН СССР* 100: 25.
- [53] S. Hameroff; R. Penrose, "Consciousness in the universe: A review of the 'Orch OR' theory". *Physics of Life Reviews*, 2014, 11 (1): 51–53.
- [54] Ф.Маттук, Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел, М., Мир, 1974.
- [55] V. P. Maslov, "Rotation of a Neutron in the Coat of Helium-5 as a Classical Particle for a Relatively Large Value of the Hidden Parameter  $t_{meas}$ ", *Math. Notes*, 103:1 (2018), 67–74.
- [56] В.В.Воеводин, Вл.В.Воеводин, Параллельные вычисления, БХВ-Петербург, 2002. — 608 с. ISBN 5-94157-160-7.
- [57] Limits to Parallel Computation: P-Completeness Theory, R. Greenlaw, H. J. Hoover, W. L. Ruzzo, Oxford University Press, 1995, pp. 336.
- [58] А.С.Холево, Некоторые оценки для количества информации, передаваемого квантовым каналом связи, *Пробл. передачи информ.*, 1973, том 9, выпуск 3, страницы 3–11.
- [59] А.А.Марков младший, О непрерывности конструктивных функций, *Успехи мат. наук*, 1954, 9, N 3 (61), стр. 226-229.



- [60] G.S.Tseitin, Algorithmic operators in the constructive metric spaces, Doklady Akademii Nauk USSR (rus), 1959, 128, N 1, pp.49-52.