*ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА*
*2008. Т. 39. ВЫП. 4*

# ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ НЕСТАЦИОНАРНЫЕ МОДЕЛИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ИХ ПРИМЕНЕНИЯ

*А. А. Сузько, Г. Гиоргадзе*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА
2008. Т. 39. ВЫП. 4

# ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ НЕСТАЦИОНАРНЫЕ МОДЕЛИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ИХ ПРИМЕНЕНИЯ

*А. А. Сузько, Г. Гиоргадзе*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Обсуждаются методы нахождения точных и приближенных решений эволюционных задач квантовой механики. Изучается циклическая эволюция квантовых систем для гамильтонианов, периодически зависящих от времени. В замкнутом аналитическом виде предъявлен класс периодически зависящих от времени гамильтонианов и вычислены соответствующие ему циклические решения. Построены зависящие от времени гамильтонианы, средние значения которых, вычисленные по циклическим решениям, не зависят от времени. Показано, что средние значения проекции спина, вычисленные по тем же циклическим решениям, и плотность вероятности нахождения частицы в данной точке пространства-времени также не зависят от времени. Как следствие, подход может быть использован для моделирования квантовых динамических потенциальных ям, обладающих эффектом локализации частиц. Неадиабатические геометрические фазы определены в терминах полученных циклических решений. Точно решаемые нестационарные задачи используются для построения универсального набора вентилей для квантовых компьютеров. Обсуждается способ получения операторов запутывания.

A method of deriving exact and approximate solutions for time-evolution problems of quantum mechanics is discussed. The cyclic evolution of quantum systems for periodic in time Hamiltonians is studied. A class of periodic time-dependent Hamiltonians with cyclic solutions is constructed in a closed analytic form. The periodic time-dependent Hamiltonians are generated whose expectation values for cyclic solutions do not depend on time. It is shown, the spin-expectation values and probability density in a given point of space-time are not dependent on time, too. As a consequence, this approach can be used for modelling quantum dynamic wells and wires with the effect of the particle localization. Nonadiabatic geometric phases are calculated in terms of obtained cyclic solutions. A time-dependent periodic Hamiltonian admitting exact solutions is applied to construct a set of universal gates for quantum computer. A way of obtaining entanglement operators is discussed, too.

PACS: 03.65 Nk, 03.65 Vf, 03.67 Lx

## ВВЕДЕНИЕ

Задачи об эволюции динамических систем привлекают пристальное внимание исследователей в связи с последними достижениями в различных областях физики. Много интересных явлений, таких как молекулярный эффект Ааронова–Бома [1,2], геометрическая фаза [3,4], проблема пересечения уровней [5], отождествляемая с переходами Ландау–Зинера [6, 7], динамическая локализация частиц в системах с ограниченной пространственной размерностью [8–11], были обнаружены в атомной и молекулярной физике, квантовой химии, квантовой оптике и физике твердого тела. Интенсивные исследования в области квантовых компьютеров (см., например, [13–18] и ссылки в этих работах) возобновили интерес к эффекту геометрической фазы в квантовой механике. Недавно было предложено конструировать голономный квантовый компьютер [19–21], используя неабелеву фазу Берри [3]. Поэтому проблема моделирования динамических систем с заранее заданными свойствами с помощью методов квантовой механики становится весьма актуальной. Точно решаемые стационарные и нестационарные модели в квантовой механике послужат, на наш взгляд, для плодотворных исследований в этих областях науки, а также помогут в обнаружении новых свойств.

Обычно в качестве нулевого приближения задачи с гамильтонианом $H(t) = h + h_1(t)$ рассматривается система с гамильтонианом $h$, не зависящим от времени. Зависящая от времени часть гамильтониана $h_1$ предполагается малой, $h_1 \ll h$, и рассматривается как возмущение, вызывающее переходы между собственными состояниями $h$. Однако если гамильтониан $h_1$ не мал и периодически зависит от времени, $h_1(t+T) = h_1(t)$, более целесообразен другой подход [22–24], поскольку ни теория возмущений, ни адиабатическое приближение неприменимы. Согласно теоретико-групповым представлениям, если $H(t)$ периодически зависит от времени $H(t+T) = H(t)$, то среди решений уравнения Шредингера можно найти такие, которые периодически изменяются со временем. Отметим, однако, что эти состояния воспроизводятся через период с точностью до фазового фактора $\Psi_\nu(r, t+T) = \exp(-i\beta_\nu T)\Psi_\nu(r,t)$. Помимо обычной динамической фазы этот фазовый фактор содержит еще и геометрическую часть, изучению которой в последнее время посвящено много работ. Периодические состояния $\Psi_\nu(r,t)$ при данном $t$ взаимно ортогональны и играют такую же роль, как состояния с определенной энергией в обычной стационарной теории. Циклическая эволюция важна при описании квантовых систем в периодически изменяющихся средах. Наиболее хорошо изучены задача для квантового осциллятора под действием периодической внешней силы [23–33] и задача о движении частицы со спином в однородном периодическом магнитном поле [22,23] (см. также относительно недавние публикации [34–37]). Методы разделения переменных [38] и суперсимметрии [39] расширяют класс точно решаемых нестационарных задач. На наш взгляд, особенно перспективен для конструирования точно решаемых динамических задач метод преобразования от стационарных уравнений к нестационарным [36, 41–45]. Техника преобразований Барганна и Дарбу, метод суперсимметрии в квантовой механике и универсальная техника соотношений сплетения обеспечивают множество точно решаемых стационарных задач (см., например, [46–61] и ссылки в этих работах). Каждая из этих моделей с не зависящим от времени гамильтонианом может быть преобразована в семейство зависящих от времени гамильтонианов, допускающих точные решения.

При исследовании эволюции квантовых систем важную роль играет выбор как гамильтониана, так и начальных условий. Берри [3], имя которого носит топологическая фаза, при изучении циклической эволюции в качестве начальных использовал мгновенные собственные состояния гамильтониана $H(t = 0)$, которые адиабатически эволюционируют от $t = 0$ до $t = T$ по замкнутому контуру в параметрическом пространстве. Для того чтобы обеспечить периодическую эволюцию с таким выбором начальных условий, пришлось прибегнуть к адиабатическому приближению. Ааронов и Анандан [4] отказались от адиабатического приближения, рассматривая замкнутый контур в проективном гильбертовом пространстве; при этом вопрос выбора начальных условий не обсуждался. Чтобы обеспечить циклическую эволюцию, в [40] начальные состояния были взяты как линейная комбинация решений для $H(t = 0)$. В статье [41] в качестве начальных состояний выбраны собственные состояния стационарного (реперного) уравнения и показано, что эти состояния обеспечивают периодичность решений при определенном выборе преобразований от стационарной к нестационарной задаче. Получены семейства потенциальных матриц с различной функциональной зависимостью от времени для систем двух связанных уравнений Шредингера, допускающие решение нестационарного уравнения Шредингера в замкнутом аналитическом виде. Исследуются полная, динамическая и геометрическая фазы, возникающие при циклической эволюции квантовых систем. Построены зависящие от времени $t$ такие гамильтонианы, что их среднее математическое ожидание, взятое по циклическим решениям, не зависит от $t$. Это означает, что такие состояния ведут себя как стационарные состояния с сохраняющейся энергией, т. е. имеет место эффект локализации частицы в определенном состоянии. Таким образом, подход может быть использован для моделирования динамических квантовых ям и точек с предопределенными свойствами.

Достижения последнего времени в таких областях, как развитие информационных технологий, а также микро- и нанотехнологий, позволяют создавать низкоразмерные структуры с прогнозируемым и управляемым спектром носителей заряда. Этот технический прогресс делает перспективными и актуальными исследования одномерных и двумерных динамических квантовых ям, квантовых точек и решеток со свойствами локализации. Как было показано Паулем и Ратцем [8] и, независимо от них, Гапоновым и Миллером [9] в рамках классической электродинамики, заряженная частица может быть локализована в неоднородном электромагнитном поле высокой частоты. Следовало бы отметить, что Пауль в 1989 г. получил Нобелевскую премию за создание так называемой ловушки Пауля. Квантово-механический анализ этого эффекта для потенциалов разных типов был проведен несколькими авторами [10–12]. Главный вывод авторов состоит в том, что при выполнении определенных условий и ограничениях, накладываемых на масштаб неоднородности поля и его частоту, становится возможной локализация заряженной частицы в квантовом режиме, например, динамическая локализация носителей тока в квантовых проволоках (quantum wires).

Используя метод преобразования стационарных задач в нестационарные [41], будем конструировать семейства потенциалов с более сложной зависимостью от временной и пространственной переменных, и, в частности, потенциалы, которые отвечают свойству динамической локализации частиц. Подход может быть с успехом использован в исследовании свойств низкоразмерных структур (квантовых ям, проволок и квантовых точек). Исследуется проблема эволюции частицы со спином $1/2$ в неоднородном $T$-периодическом магнитном поле, частным случаем которой является динамика спиновых состояний в однородном магнитном поле [34–37]. Полученные в явном виде матрицы эволюции используются для построения универсального набора вентилей, необходимого для моделирования квантового компьютера. Обсуждается способ получения операторов запутывания.

## 1. КОНСТРУИРОВАНИЕ ЗАВИСЯЩИХ ОТ ВРЕМЕНИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ МАТРИЦ

Предположим, что состояние $\Psi(r,t)$ квантовой системы эволюционирует в соответствии с матричным уравнением Шредингера

$$i\frac{d\Psi(r,t)}{dt} = H(r,t)\Psi(r,t), \tag{1}$$

где $H(r,t)$ периодична по временной переменной $t$, $H(t+T) = H(t)$, и имеет вид

$$H(r,t) = \hat{p}_r^2 + V(r,t). \tag{2}$$

Потенциальная матрица $V(r,t)$ эрмитова, периодична $V(r,t+T) = V(r,t)$ и имеет размерность $d \times d$, $\hat{p}_r = -i\nabla_r$ — оператор момента, определяющий кинетическую энергию. Для целого ряда более простых задач $H(r,t)$ представима как $d \times d$-матрица без кинетического слагаемого. Например, движение нейтральной частицы со спином $1/2$ в однородном магнитном поле $\mathbf{B}(t)$ описывается гамильтонианом $H(t) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(t)$.

В терминах оператора эволюции $\mathcal{U}(t) \equiv \mathcal{U}(t,0)$, $\mathcal{U}(0) = 1$, решение (1) записывается как

$$\Psi(r,t) = \mathcal{U}(t)\Psi(r,0), \tag{3}$$

где $\Psi(r,0)$ — начальное состояние, а $\mathcal{U}(t)$ удовлетворяет уравнению

$$i\frac{d\mathcal{U}(t)}{dt} = H(t)\mathcal{U}(t), \tag{4}$$

которое связывает $H(t)$ и $\mathcal{U}(t)$. Если предполагается, что гамильтониан $H(t)$ эрмитов, то оператор $\mathcal{U}(t)$ по необходимости унитарен. Действительно, изменение нормы вектора эволюционирующего состояния $|\Psi(t)\rangle$ с учетом уравнения Шредингера (1) можно записать в виде

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\right)|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\left(\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle\right) = \\ = i\langle\Psi(t)\left(H^\dagger - H\right)|\Psi(t)\rangle = 0.$$

Отсюда получаем, что $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \mathrm{const}$, т. е. динамика сохраняет норму состояния $|\Psi(t)\rangle$. Поэтому можем записать $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t=0)|\times \Psi(t=0)\rangle$. Следовательно, должен существовать такой унитарный оператор $\mathcal{U}(t,t')$, который обеспечивает это условие: $\langle\Psi(t=0)\mathcal{U}^\dagger(t,0)|\mathcal{U}(t,0)\times \Psi(t=0)\rangle = \langle\Psi(t=0)|\Psi(t=0)\rangle$, т. е. $\mathcal{U}^\dagger(t,0)|\mathcal{U}(t,0) = 1$. Это оператор эволюции (3).

Помимо оператора эволюции, отображающего вектор начального состояния $|\Psi(t=0)\rangle$ в вектор состояния $|\Psi(t)\rangle$ в произвольный момент времени, удобно ввести унитарное преобразование $\mathcal{S}^\dagger(t) = \mathcal{S}^{-1}(t)$, $\mathcal{S}^\dagger(t)\mathcal{S}(t) = 1$,

$$\Psi(r,t) = \mathcal{S}(t)\widetilde{\psi}(r,t) \tag{5}$$

таким образом, чтобы в полученном из (1) с его помощью уравнении

$$i\frac{d\widetilde{\psi}(t)}{dt} = \widetilde{H}(r)\widetilde{\psi}(t) \tag{6}$$

гамильтониан $\widetilde{H}$, определяемый соотношением

$$\widetilde{H} = \mathcal{S}^\dagger(t)H(t)\mathcal{S}(t) - i\mathcal{S}^\dagger(t)\left(\frac{d\mathcal{S}}{dt}\right)\mathcal{S}(t), \tag{7}$$

не зависел от времени, т. е. $d\widetilde{H}/dt = 0$. Отсюда следует уравнение для определения $\mathcal{S}(t)$

$$\dot{\mathcal{S}}^\dagger H\mathcal{S} + \mathcal{S}^\dagger\dot{H}\mathcal{S} + \mathcal{S}^\dagger H\dot{\mathcal{S}} - i\hbar\dot{\mathcal{S}}^\dagger\dot{\mathcal{S}} - i\hbar\mathcal{S}^\dagger\ddot{\mathcal{S}} = 0, \tag{8}$$

где принято обозначение $\dot{\mathcal{S}} = (d/dt)\mathcal{S}$. Решение уравнения (6) для новых функций $\widetilde{\psi}(r,t) = \mathcal{S}^\dagger(t)\Psi(r,t)$ есть

$$\widetilde{\psi}(r,t) = \exp\left(-i\widetilde{H}(r)t\right)\widetilde{\psi}(r,0) \tag{9}$$

и определяется решением стационарной задачи

$$\widetilde{H}|F(\widetilde{\mathcal{E}})\rangle = \widetilde{\mathcal{E}}|F(\widetilde{\mathcal{E}})\rangle. \tag{10}$$

Тогда, как следует из (6) и (9), решение уравнения движения (1) представимо в виде

$$\Psi(r,t) = \mathcal{S}(t)\exp\left(-i\widetilde{H}(r)t\right)\widetilde{\psi}(r,0) \tag{11}$$

и сводится к решению стационарной задачи (10) и определению $\mathcal{S}(t)$ из условия независимости $\widetilde{H}$ от временной переменной (8). Преобразования такого рода часто используются в квантовой механике. Следует отметить, что решение (8) относительно $\mathcal{S}(t)$ при заданном $H(t)$ в общем случае очень сложная задача.

Мы здесь используем другой подход, позволяющий контролируемым образом генерировать нестационарный гамильтониан взаимодействия и находить решения соответствующей задачи. Действительно, если в качестве исходного использовать стационарное уравнение Шредингера (10), решение которого известно численно или аналитически, и задать в явном виде преобразование $\mathcal{S}(t)$, то можно, используя соотношение (7) и унитарность $\mathcal{S}(t)$, найти зависящие от времени гамильтонианы

$$H(t) = \mathcal{S}(t)\widetilde{H}\mathcal{S}^\dagger(t) + i\dot{\mathcal{S}}(t)\mathcal{S}^\dagger(t) \tag{12}$$

и решения уравнения Шредингера (1) по формуле (11). Из (12) незамедлительно следует связь между гамильтонианом при $t = 0$ и стационарным гамильтонианом $\widetilde{H}$: $H(0) = \mathcal{S}(0)\widetilde{H}\mathcal{S}^\dagger(0) + i\dot{\mathcal{S}}(0)\mathcal{S}^\dagger(0)$. Сравнение соотношений (3), (5) и (11) приводит к важному соотношению связи между $\mathcal{U}(t)$ и $\mathcal{S}(t)$:

$$\mathcal{U}(t) = \mathcal{S}(t)\exp(-i\widetilde{H}t)\mathcal{S}^\dagger(0). \tag{13}$$

Техника канонических преобразований от стационарного гамильтониана к нестационарному была использована для вращающихся систем (см., например, [32, 44] и ссылки в них).

Понятно, что в такой постановке зависимость от $t$ в гамильтониане и решениях определяется выбором $\mathcal{S}(t)$. Решение (1) существенным образом зависит также от начальных условий. Достоинство метода состоит в том, что он позволяет конструировать семейства зависящих от времени гамильтонианов с заданными свойствами. В частности, рассмотрим здесь построение гамильтонианов, периодически изменяющихся со временем, для которых уравнение Шредингера имеет точные решения.

**1.1. Конструирование $2 \times 2$-периодической потенциальной матрицы.** Будем исследовать системы двух связанных уравнений Шредингера с гамильтонианом вида

$$H(r,t) = h(r) + h_1(r,t), \tag{14}$$

где $h(r)$ — стационарная часть гамильтониана, гамильтониан $h_1(r,t)$ периодически зависит от времени $h_1(r,t+T) = h_1(r,t)$ и может быть представлен в виде

$$h_1(r,t) = \sum_i \hat{\sigma}_i B_i(r,t), \tag{15}$$

где $\hat{\sigma}_i$ — матрицы Паули; $B_i(r,t)$ периодичны со временем. Гамильтонианы (14) применимы для анализа динамики частицы со спином $1/2$ во вращающемся неоднородном магнитном поле, квантовых систем в присутствии зависящих от времени магнитных и электрических полей, атомных и молекулярных столкновений.

Наша задача — построить семейства зависящих от времени гамильтонианов $H(r,t)$ вида (14), для которых могут быть найдены точные решения уравнения (1). Для этого будем использовать не зависящий от времени гамильтониан

$$\widetilde{H}(r) = p_r^2 + V(r) \tag{16}$$

с действительной и симметричной $2\times 2$-потенциальной матрицей $V(r)$ и зависящую от времени унитарную матрицу преобразования $\mathcal{S}(t)$, с помощью которой известный стационарный гамильтониан (16) преобразуется в зависящий от времени гамильтониан (12). Выберем $\mathcal{S}(t)$-преобразование в виде $2\times 2$-матрицы

$$\mathcal{S}(t) = \exp\left(-i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(t)\right) = \exp\left(-i\sum_{i=1}^{3} s_i q_i(t)\right), \tag{17}$$

где $\mathbf{s} = (1/2)\boldsymbol{\sigma}$ — оператор спина; $\boldsymbol{\sigma} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$, $\hat{\sigma}_i$ — матрицы Паули; $q_i$ — в общем случае произвольные вещественные функции времени. Под действием этого преобразования стационарный гамильтониан (16) с учетом уравнений (1) и (12) преобразуется в зависящий от времени гамильтониан

$$H(r,t) = p_r^2 + \exp\left(-i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(t)\right)V(r)\,\exp\left(i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(t)\right) + \mathbf{s}\cdot\dot{\mathbf{q}}(t). \tag{18}$$

Точка над буквой обозначает дифференцирование по временной переменной. Решения уравнения (1) с гамильтонианом (18) в соответствии с (11) представимы как

$$|\Psi(r,t)\rangle = \exp\left(-i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(t)\exp\left(-i\widetilde{H}(r)t\right)|\widetilde{\psi}(r,t=0)\rangle. \tag{19}$$

Удобно представить $2\times 2$-гамильтониан (16) в виде суммы диагональной и бесследовой матриц

$$\begin{aligned}\widetilde{H}(r) &= p_r^2\hat{I} + \begin{pmatrix} v_{11}(r) & v_{12}(r)\\ v_{21}(r) & v_{22}(r)\end{pmatrix} = \\ &= \left(p_r^2 + \frac{v_{11}(r)+v_{22}(r)}{2}\right)\hat{I} + \begin{pmatrix} \frac{v_{11}(r)-v_{22}(r)}{2} & v_{12}(r)\\ v_{21}(r) & -\frac{v_{11}(r)-v_{22}(r)}{2}\end{pmatrix} = \qquad (20)\\ &= \left(p_r^2 + u(r)\right)\hat{I} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}(r), \qquad (21)\end{aligned}$$

где $v_{ij}$ — вещественны и $v_{12} = v_{21}$. Здесь приняты обозначения: $u = (v_{11} + v_{22})/2$, $B_1 = v_{12}$, $B_2 = 0$, $B_3 = (v_{11} - v_{22})/2$ и $\hat{I}$ — единичная матрица. Очевидно, что гамильтониан для системы из двух связанных уравнений соответствует двумерной или трехмерной задаче с коэффициентами $B_i$, зависящими от внешнего параметра $r$. Посредством унитарного преобразования $\mathcal{S}(t)$ стационарный гамильтониан (20) (или (21)) с учетом уравнений (1) и (12) преобразуется в зависящий от времени гамильтониан

$$H(r,t)=(p_r^2+u(r))\hat{I}+2\,\exp(-i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(t))(\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}(r))\,\exp(i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(t))+\mathbf{s}\cdot\dot{\mathbf{q}}(t)= \quad (22)$$

$$=(p_r^2+u(r))\hat{I}+2(\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}(r,t)). \quad (23)$$

Ясно, что преобразование (17) не изменяет первое слагаемое в соотношениях (20), (21). Отметим, что гамильтониан (23) совпадает по форме с гамильтонианом (14), если положить $h(r) = (p_r^2 + u(r))\hat{I}$ и $h_1(r,t) = 2(\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}(r,t)) = \sum_i \hat{\sigma}_i B_i(r,t)$.

Запишем теперь оператор эволюции, учитывая соотношение связи (13) между $\mathcal{U}(t)$ и $\mathcal{S}(t)$. Если $\Psi(r,0) = \widetilde{\psi}(r,0)$, то $\mathcal{S}(0) = 1$, и связь (13) между операторами $\mathcal{U}(t)$ и $\mathcal{S}(t)$ становится проще. С учетом (17) имеем

$$\mathcal{U}(t) = \mathcal{S}(t)\,\exp(-i\widetilde{H}t) = \exp(i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(t))\,\exp(-i\widetilde{H}t). \quad (24)$$

Оператор эволюции через период запишется как

$$\mathcal{U}(T) = \exp(-i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(T))\,\exp(-i\widetilde{H}T). \quad (25)$$

Рассмотрим теперь циклические решения, которые через период $T = 2\pi/\omega$ воспроизводятся с точностью до фазового фактора, т. е. начальные состояния $|\Psi_\nu(r,0)\rangle$ — собственные векторы оператора $\mathcal{U}(T)$:

$$|\Psi_\nu(r,T)\rangle = \mathcal{U}(T)|\Psi_\nu(r,0)\rangle = \exp(-i\beta_\nu)|\Psi_\nu(r,0)\rangle, \quad (26)$$

где $\exp(-i\beta_\nu)$ — собственные значения $\mathcal{U}(T)$ и $\beta_\nu$ — полная фаза. Потребуем, чтобы начальные состояния были собственными состояниями стационарной задачи (10) с известным гамильтонианом $\widetilde{H}$:

$$|\Psi_\nu(r,0)\rangle = |F_\nu(r)\rangle.$$

Это выполнимо при условии коммутации $\mathcal{U}(T)$ и $\widetilde{H}$:

$$[\mathcal{U}(T), \widetilde{H}] = 0. \quad (27)$$

Тогда $\mathcal{U}(T)$ и $\widetilde{H}$ обладают общими собственными векторами решений $|F_\nu\rangle$. Легко показать теперь, что $\mathcal{S}(T)$ и $\widetilde{H}$ коммутируют:

$$[\mathcal{S}(T), \widetilde{H}] = 0. \quad (28)$$

Действительно, учитывая (24) в (27) и унитарность $\mathcal{U}(T)$, получим $\mathcal{U}^\dagger(T)\widetilde{H}\mathcal{U}(T) = \mathcal{S}^\dagger(T)\exp(-i\widetilde{H}T)\widetilde{H}\exp(i\widetilde{H}T)\mathcal{S}(T) = \mathcal{S}^\dagger(T)\widetilde{H}\mathcal{S}(T) = \widetilde{H}$. Отсюда немедленно следует соотношение коммутации (28) между $\mathcal{S}(T)$ и $\widetilde{H}$, которое является условием на выбор $\mathcal{S}(t)$. Другие условия на выбор $\mathcal{S}(t)$ очевидны. Поскольку $\mathcal{U}(t)$ и $\exp(-i\widetilde{H}t)$ унитарны, то и $\mathcal{S}(t)$ должна быть унитарной матрицей той же размерности, что и $\mathcal{U}(t)$ и $\widetilde{H}$. Принимая во внимание (3) и соотношение связи (24) между $\mathcal{U}(t)$ и $\mathcal{S}(t)$, циклические решения в любой момент запишем как

$$|\Psi_\nu(r,t)\rangle = \mathcal{S}(t)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_\nu t)|F_\nu(r)\rangle. \tag{29}$$

При выборе преобразования $\mathcal{S}(t)$, как в (17), имеем

$$|\Psi_\nu(r,t)\rangle = \exp(-i\mathbf{s}\cdot\mathbf{q}(t))\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_\nu t)|F_\nu(r)\rangle. \tag{30}$$

Очевидно, чтобы определить решения $\Psi_\nu(r,t)$, необходимо знать собственные значения и собственные функции стационарной задачи (10) с гамильтонианом $\widetilde{H}$, заданным, как в (20). В дальнейшем предполагаем $\widetilde{H}$ таким, что $|F_\nu(r)\rangle$ образуют полный, ортонормированный набор:

$$\sum_\nu |F_\nu\rangle\langle F_\nu| = 1; \quad \langle F_\nu|F_{\nu'}\rangle = \delta_{\nu\nu'}. \tag{31}$$

При определенном выборе $\widetilde{H}(r)$ система уравнений (10) точно решается. Тогда система уравнений (1) с зависящим от времени гамильтонианом, построенным, как в (18), имеет точные циклические решения. Примерами точно решаемых стационарных задач могут служить системы уравнений (10) с баргмановскими потенциальными матрицами [48,55,58], с потенциальными матрицами, полученными в результате обобщенных алгебраических преобразований [56–59], а также удовлетворяющие суперсимметричной квантовой механике [54,60,61].

Точные решения нестационарных задач могут быть использованы для изучения различных физических величин, таких, например, как поляризация $P(t) = \langle\Psi(r,t)|\boldsymbol{\sigma}|\Psi(r,t)\rangle$ или математическое ожидание $\langle\Psi(r,t)|H(r,t)|\Psi(r,t)\rangle$, а также для исследования неадиабатической эволюции квантовых систем, динамических и геометрических фаз, переходов между уровнями. Рассмотрим несколько конкретных примеров периодических гамильтонианов и исследуем циклическую эволюцию квантовой системы при специальных начальных условиях.

**1.2. Семейства точно решаемых зависящих от времени потенциальных матриц.** Используя метод преобразования стационарных задач в нестационарные [41], рассмотрим примеры конструирования семейств точно решаемых гамильтонианов с соответствующими решениями, используя

$SU(2)$-преобразования (17), в которых компоненты $\mathbf{q}(t)$ — линейные функции времени $q_i(t) = \omega_i t$. Как будет показано, эти примеры отвечают свойству динамической локализации.

*1-е семейство.* Выберем $\mathcal{S}(t)$ как оператор вращения вокруг оси $z$:

$$\mathcal{S}_3(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{\sigma}_3\omega t}{2}\right) = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right) \end{pmatrix}, \tag{32}$$

где $\omega$ — угловая частота. В соответствии с (23) стационарный гамильтониан (20) преобразуется в зависящий от времени следующим образом:

$$H(r,t) = (p_r^2 + u(r))\hat{I} + \begin{pmatrix} \dfrac{v_{11}(r) - v_{22}(r) + \omega}{2} & v_{12}(r)\exp(-i\omega t) \\ v_{21}(r)\exp(i\omega t) & -\dfrac{v_{11}(r) - v_{22}(r) + \omega}{2} \end{pmatrix}. \tag{33}$$

Очевидно, что гамильтониан $H(r,t)$ $T$-периодичен, $T{=}2\pi/\omega$, $H(t){=}H(t{+}T)$. Исходный стационарный гамильтониан (раутиан) $\widetilde{H}$ связан с $H(t{=}0)$ следующим образом: $H(0) = \widetilde{H} + \dfrac{\omega}{2}\hat{\sigma}_3$. С использованием (29) циклические решения могут быть записаны в виде

$$|\Psi_\nu(r,t)\rangle = \begin{pmatrix} \exp\left(-i\left(\widetilde{\mathcal{E}}_1^\nu + \frac{\omega}{2}\right)t\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\left(\widetilde{\mathcal{E}}_2^\nu - \frac{\omega}{2}\right)t\right) \end{pmatrix} |F_\nu(r)\rangle, \tag{34}$$

где $\widetilde{\mathcal{E}}_\alpha^\nu = (\widetilde{\mathcal{E}}_\nu - \Delta_\alpha)$ и $\Delta_\alpha$ — пороговые энергии, в общем случае различные для разных каналов $\alpha$. Естественно, энергия порога первого (входного) канала равна нулю; мы имеем дело с процессами упругого рассеяния. Если $\Delta_\alpha = 0$ во всех каналах, то собственные состояния $|F_\nu(r)\rangle$ являются вырожденными; в нашем случае системы $2 \times 2$ — двукратно вырожденными. Через период $T$ решение представимо в виде

$$|\Psi_\nu(r,(T+t))\rangle = \begin{pmatrix} \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1^\nu T - i\pi) & 0 \\ 0 & \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2^\nu T + i\pi) \end{pmatrix} |\Psi_\nu(r,t)\rangle.$$

Известно, что гамильтониан двухканальной задачи ковариантен относительно локальных $SU(2) \times U(1)$-преобразований и соответствует трехмерной задаче с координатами, зависящими от дополнительной параметрической координаты $r$. Представим стационарный и нестационарный гамильтонианы в виде, удобном для анализа движения частицы со спином $1/2$ в неоднородном магнитном поле [42]. Стационарный гамильтониан (20) можно представить как

$$\widetilde{H}(r) = (p_r^2 + u(r))\hat{I} + \widetilde{\Omega}(r)\begin{pmatrix}\cos\widetilde{\theta}(r) & \sin\widetilde{\theta}(r)\\ \sin\widetilde{\theta}(r) & -\cos\widetilde{\theta}(r)\end{pmatrix}. \tag{35}$$

Здесь $u(r) = (v_{11}(r) + v_{22}(r))/2$ можно трактовать как аналог стационарного электрического поля, а аналог магнитного поля $\widetilde{\mathbf{B}}(r)$ в терминах потенциальной матрицы можно записать как

$$\begin{gathered}\widetilde{\mathbf{B}}(r) = \widetilde{\Omega}(r)(\sin\widetilde{\theta}(r), 0, \cos\widetilde{\theta}(r)),\\ \widetilde{\Omega}(r) = \frac{1}{2}\sqrt{(v_{11}(r) - v_{22}(r))^2 + 4v_{12}^2(r)} = \sqrt{B_3^2(r) + B_1^2(r)},\end{gathered} \tag{36}$$

$$\sin\widetilde{\theta}(r) = \frac{v_{12}(r)}{\widetilde{\Omega}(r)}, \quad \cos\widetilde{\theta}(r) = \frac{v_{11}(r) - v_{22}(r)}{2\widetilde{\Omega}(r)}. \tag{37}$$

Зависящий от времени гамильтониан (33) можно представить в виде (23)

$$H(t,r) = (p_r^2 + u(r))\hat{I} + \Omega(r)\begin{pmatrix}\cos\theta(r) & \sin\theta(r)\,\exp{(-i\omega t)}\\ \sin\theta(r)\,\exp{(i\omega t)} & -\cos\theta(r)\end{pmatrix}, \tag{38}$$

удобном для анализа динамики частицы со спином $1/2$ во вращающемся вокруг оси $z$ неоднородном магнитном поле:

$$\mathbf{B}(t,r) = \Omega(r)(\sin\theta(r)\,\cos{(\omega t)},\, \sin\theta(r)\,\sin{(\omega t)},\, \cos\theta(r)), \tag{39}$$

где

$$\begin{gathered}\Omega(r) = \frac{1}{2}\sqrt{(v_{11}(r) - v_{22}(r) + \omega)^2 + 4v_{12}(r)^2},\\ \sin\theta(r) = \frac{v_{12}(r)}{\Omega(r)}, \quad \cos\theta(r) = \frac{v_{11}(r) - v_{22}(r) + \omega}{2\Omega(r)}.\end{gathered} \tag{40}$$

Сравнение (36) и (39) показывает, что в результате $\mathcal{S}(t)$-преобразования возникла $B_2(t,r)$-компонента магнитного поля $bfB(t,r)$. Очевидно, что $z$-компонента магнитного поля $B_3(r) = \Omega(r)\cos\theta(r)$ не зависит от времени, а $x$- и $y$-компоненты периодически изменяются со временем: $B_1(t,r) = \Omega(r)\sin\theta(r)\cos{(\omega t)}$ и $B_2(t,r) = \Omega(r)\sin\theta(r)\sin{(\omega t)}$. Непосредственно применяя $\mathcal{S}(t)$-преобразование (32) к стационарному гамильтониану (35), получим представление зависящего от времени гамильтониана через компоненты стационарного поля

$$H(t,r) = (p_r^2 + u(r))\hat{I} + \\ + \widetilde{\Omega}(r)\begin{pmatrix} \cos\widetilde{\theta}(r) + \dfrac{\omega}{2\widetilde{\Omega}(r)} & \sin\widetilde{\theta}(r)\exp(-i\omega t) \\ \sin\widetilde{\theta}(r)\exp(+i\omega t) & -\cos\widetilde{\theta}(r) - \dfrac{\omega}{2\widetilde{\Omega}(r)} \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Сравнение (38) и (41) дает

$$\Omega(r) = \widetilde{\Omega}(r)\left(1 + \frac{\omega^2}{4\widetilde{\Omega}^2(r)} + \frac{\omega}{\widetilde{\Omega}(r)}\cos\widetilde{\theta}(r)\right)^{1/2}, \\ \sin\theta(r) = \frac{\widetilde{\Omega}(r)\sin\widetilde{\theta}(r)}{\Omega(r)}, \quad \cos\theta(r) = \frac{\widetilde{\Omega}(r)\cos\widetilde{\theta}(r)}{\Omega(r)} + \frac{\omega}{\Omega(r)}. \quad (42)$$

При отсутствии зависимости от пространственной переменной в $H(r,t)$ и при $u = 0$ задача упрощается и сводится к задаче для частицы со спином $\mathrm{s} = 1/2$ во вращающемся вокруг оси $z$, но однородном магнитном поле $\mathbf{B}(t)$ с гамильтонианом

$$H(t) = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}(t) = \Omega\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\exp(-i\omega t) \\ \sin\theta\exp(i\omega t) & -\cos\theta \end{pmatrix}, \\ \mathbf{B}(t) = \Omega(\sin\theta\cos(\omega t), \sin\theta\sin(\omega t), \cos\theta), \quad (43)$$

вместо (38), который соответствовал пространственно-неоднородному полю (39). Очевидно, что соответствующий ему раутиан (35) имеет вид

$$\widetilde{H} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\widetilde{\mathbf{B}} = \widetilde{\Omega}\begin{pmatrix} \cos\widetilde{\theta} & \sin\widetilde{\theta} \\ \sin\widetilde{\theta} & -\cos\widetilde{\theta} \end{pmatrix} \quad (44)$$

с пространственно-однородным магнитным полем

$$\widetilde{\mathbf{B}} = \widetilde{\Omega}(\sin\widetilde{\theta}, 0, \cos\widetilde{\theta}).$$

Гамильтониан (44) имеет два собственных вектора решений, которые соответствуют двум собственным значениям

$$|\Phi_1\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\widetilde{\theta}/2) \\ \sin(\widetilde{\theta}/2) \end{pmatrix}, \quad |\Phi_2\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\widetilde{\theta}/2) \\ \cos(\widetilde{\theta}/2) \end{pmatrix}, \quad \widetilde{\mathcal{E}}_1 = +\widetilde{\Omega}, \quad \widetilde{\mathcal{E}}_2 = -\widetilde{\Omega}. \quad (45)$$

Имеются два циклических решения, отвечающих гамильтониану (43), для которых начальные состояния являются собственными состояниями стационарного гамильтониана (44). В соответствии с (34) они эволюционируют следующим образом:

$$|\Psi_1(t)\rangle = \begin{pmatrix} \exp\left[-\left(\dfrac{i\omega t}{2}\right) - i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t\right]\cos(\widetilde{\theta}/2) \\ \exp\left[\left(\dfrac{i\omega t}{2}\right) - i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t\right]\sin(\widetilde{\theta}/2) \end{pmatrix},$$
$$|\Psi_2(t)\rangle = \begin{pmatrix} -\exp\left[-\left(\dfrac{i\omega t}{2}\right) - i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t\right]\sin(\widetilde{\theta}/2) \\ \exp\left[\left(\dfrac{i\omega t}{2}\right) - i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t\right]\cos(\widetilde{\theta}/2) \end{pmatrix}. \tag{46}$$

Это хорошо известная проблема для эволюции частицы со спином $1/2$ во вращающемся вокруг оси $z$ однородном магнитном поле [34–37], полученная здесь как частный случай задачи для эволюции частицы со спином $1/2$ частицы в пространственно-неоднородном магнитном поле. Теперь понятно, что решения (34) уравнения (1) с гамильтонианом (38) или (33) определяются подобным образом. Отличие состоит в том, что собственный вектор решений $|F_\nu(r)\rangle$ $\nu = 1, 2, \ldots, N$ соответствующей стационарной задачи (10) имеет более сложную форму и число собственных значений может быть произвольным, а не только $N = 2$, как для задачи с однородным магнитным полем.

*2-е семейство.* Если $\mathcal{S}(t)$ выбран как оператор вращения вокруг $y$-оси

$$\mathcal{S}_2(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{\sigma}_2\omega_2 t}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_2 t/2) & -\sin(\omega_2 t/2) \\ \sin(\omega_2 t/2) & \cos(\omega_2 t/2) \end{pmatrix}, \tag{47}$$

то в соответствии с (18) стационарный гамильтониан (20) переходит в нестационарный гамильтониан $H(t)$ вида

$$H(r,t) = (p_r^2 + u(r))\hat{I} + \\ + \begin{pmatrix} \dfrac{v_{11}-v_{22}}{2}\cos\omega_2 t - v_{12}\sin\omega_2 t & v_{12}\cos\omega_2 t + \dfrac{v_{11}-v_{22}}{2}\sin\omega_2 t - \dfrac{i\omega_2}{2} \\ v_{12}\cos\omega_2 t + \dfrac{v_{11}-v_{22}}{2}\sin\omega_2 t + \dfrac{i\omega_2}{2} & -\left(\dfrac{v_{11}-v_{22}}{2}\cos\omega_2 t - v_{12}\sin\omega_2 t\right) \end{pmatrix}. \tag{48}$$

Если унитарное преобразование (47) осуществить над гамильтонианом (20), представленным в виде (35), то получим

$$H(r,t) = (p_r^2 + u(r))\hat{I} + \\ + \widetilde{\Omega}(r)\begin{pmatrix} \cos(\widetilde{\theta}(r) + \omega_2 t) & \sin(\widetilde{\theta}(r) + \omega_2 t) - \dfrac{i\omega_2}{2\widetilde{\Omega}(r)} \\ \sin(\widetilde{\theta}(r) + \omega_2 t) + \dfrac{i\omega_2}{2\widetilde{\Omega}(r)} & -(\cos(\widetilde{\theta}(r) + \omega_2 t)) \end{pmatrix}. \tag{49}$$

Этот гамильтониан может быть использован для исследования эволюции частицы со спином $1/2$, прецессирующей вокруг оси $0y$ в пространственно-неоднородном магнитном поле $\mathbf{B}(t,r)$ с компонентами $B_1(t,r) = \widetilde{\Omega}(r)\times(\sin\widetilde{\theta}(r)+\omega_2 t)$, $B_2(t,r)=\omega_2/2$, $B_3(t,r)=\widetilde{\Omega}(r)\cos(\widetilde{\theta}(r)+\omega_2 t)$. В соответствии с (29) циклические (или воспроизводящиеся) решения уравнения (1) немедленно запишутся следующим образом:

$$|\Psi_\nu(r,t)\rangle = \\ = \begin{pmatrix} \cos(\omega_2 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1^\nu t) & -\sin(\omega_2 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2^\nu t) \\ \sin(\omega_2 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1^\nu t) & \cos(\omega_2 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2^\nu t) \end{pmatrix} |F_\nu(r)\rangle. \quad (50)$$

Через период они имеют вид

$$|\Psi_\nu(r,(t+T))\rangle = -\begin{pmatrix} \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1^\nu T) & 0 \\ 0 & \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2^\nu T) \end{pmatrix} |\Psi_\nu(r,t)\rangle.$$

При отсутствии зависимости от пространственной переменной нестационарный гамильтониан и соответствующие циклические решения становятся

$$H(t) = \widetilde{\Omega}\begin{pmatrix} \cos(\widetilde{\theta}+\omega_2 t) & \sin(\widetilde{\theta}+\omega_2 t) - \dfrac{i\omega_2}{2\widetilde{\Omega}} \\ \sin(\widetilde{\theta}+\omega_2 t) + \dfrac{i\omega_2}{2\widetilde{\Omega}} & -(\cos(\widetilde{\theta}+\omega_2 t)) \end{pmatrix}, \quad (51)$$

$$|\Psi_1(t)\rangle = \\ = \begin{pmatrix} \cos(\omega_2 t/2)\ \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t)\ \cos\widetilde{\theta}/2 - \sin(\omega_2 t/2)\ \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t)\ \sin\widetilde{\theta}/2 \\ \sin(\omega_2 t/2)\ \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t)\ \cos\widetilde{\theta}/2 + \cos(\omega_2 t/2)\ \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t)\ \sin\widetilde{\theta}/2 \end{pmatrix},$$

$$(52)$$

$$|\Psi_2(t)\rangle = \\ = \begin{pmatrix} -\cos(\omega_2 t/2)\ \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t)\ \sin\widetilde{\theta}/2 - \sin(\omega_2 t/2)\ \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t)\ \cos\widetilde{\theta}/2 \\ -\sin(\omega_2 t/2)\ \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t)\ \sin\widetilde{\theta}/2 + \cos(\omega_2 t/2)\ \exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t)\ \cos\widetilde{\theta}/2 \end{pmatrix}.$$

Проблема тождественна задаче для движения частицы со спином $1/2$ в однородном магнитном поле, вращающемся в $x{-}z$-плоскости. Легко видеть, что соотношения (51), (52) можно получить, применяя преобразование (47) к пространственно-однородному стационарному гамильтониану (44).

*3-е семейство*. Пусть теперь $\mathcal{S}(t)$ выбран как оператор вращения вокруг $x$-оси

$$\mathcal{S}_1(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{\sigma}_1\omega_1 t}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t/2) & -i\sin(\omega_1 t/2) \\ -i\sin(\omega_1 t/2) & \cos(\omega_1 t/2) \end{pmatrix}. \quad (53)$$

Тогда из (18) получим зависящий от времени гамильтониан

$$H(r,t) = (p_r^2 + u(r))\hat{I} +$$
$$+ \begin{pmatrix} \dfrac{v_{11} - v_{22}}{2} \cos(\omega_1 t) & v_{12} - \dfrac{\omega_1}{2} + i\dfrac{v_{11} - v_{22}}{2} \sin(\omega_1 t) \\ v_{12} - \dfrac{\omega_1}{2} - i\dfrac{v_{11} - v_{22}}{2} \sin(\omega_1 t) & -\dfrac{v_{11} - v_{22}}{2} \cos(\omega_1 t) \end{pmatrix}. \quad (54)$$

По аналогии с предыдущими случаями стационарный гамильтониан (20) преобразуется в нестационарный гамильтониан и может быть представлен в виде, удобном для описания эволюции частицы со спином $1/2$ в пространственно-неоднородном магнитном поле, прецессирующем вокруг оси $0x$:

$$H(r,t) = (p_r^2 + u(r))\hat{I} +$$
$$+\widetilde{\Omega}(r)\begin{pmatrix} \cos\widetilde{\theta}(r)\cos(\omega_1 t) & \sin\widetilde{\theta}(r) - \dfrac{\omega_1}{2\widetilde{\Omega}(r)} + i\cos\widetilde{\theta}(r)\sin(\omega_1 t) \\ \sin\widetilde{\theta}(r) - \dfrac{\omega_1}{2\widetilde{\Omega}(r)} - i\cos\widetilde{\theta}(r)\sin(\omega_1 t) & -\cos\widetilde{\theta}(r)\cos(\omega_1 t) \end{pmatrix}. \quad (55)$$

Циклические решения (1) с учетом (29) запишутся как

$$|\Psi_\nu(r,t)\rangle =$$
$$= \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1^\nu t) & -i\sin(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2^\nu t) \\ -i\sin(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1^\nu t) & \cos(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2^\nu t) \end{pmatrix} |F_\nu(r)\rangle. \quad (56)$$

При отсутствии зависимости от пространственной переменной зависящий от времени гамильтониан и соответствующие ему циклические решения становятся

$$H(t) =$$
$$= \widetilde{\Omega}\begin{pmatrix} \cos\widetilde{\theta}\cos(\omega_1 t) & \sin\widetilde{\theta} - \dfrac{\omega_1}{2\widetilde{\Omega}} + i\cos\widetilde{\theta}\sin(\omega_1 t) \\ \sin\widetilde{\theta} - \dfrac{\omega_1}{2\widetilde{\Omega}} - i\cos\widetilde{\theta}\sin(\omega_1 t) & -\cos\widetilde{\theta}\cos(\omega_1 t) \end{pmatrix}. \quad (57)$$

$$|\Psi_1(t)\rangle =$$
$$= \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t)\cos\widetilde{\theta}/2 - i\sin(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t)\sin\widetilde{\theta}/2 \\ -i\sin(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t)\cos\widetilde{\theta}/2 + \cos(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t)\sin\widetilde{\theta}/2 \end{pmatrix}, \quad (58)$$

$$|\Psi_2(t)\rangle =$$
$$= \begin{pmatrix} -\cos(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t)\sin\widetilde{\theta}/2 - i\sin(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t)\cos\widetilde{\theta}/2 \\ i\sin(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t)\sin\widetilde{\theta}/2 + \cos(\omega_1 t/2)\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t)\cos\widetilde{\theta}/2 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, при различном выборе операторов преобразования $\mathcal{S}_i(t)$, $i = 1, 2, 3$, в замкнутом аналитическом виде генерируются три семейства зависящих от времени потенциальных матриц с соответствующими циклическими решениями. Полученные выражения переходят в обычные для частицы со спином $1/2$, эволюционирующей в периодически зависящем от времени пространственно-однородном магнитном поле. Очевидно, что во всех рассмотренных случаях гамильтонианы (33), (49), (55) являются $T$-периодичными, $T = 2\pi/\omega$, а решения (34), (50) и (56) — $2T$-периодичными, $2T = 4\pi/\omega$, и через один период $T$ решения меняют свой знак. Легко видеть, если преобразование $\mathcal{S}(t)$ выбрано с периодом $T$, например, $\mathcal{S}_i(t) = \exp(-i\hat{\sigma}_i\omega_i t)$, $i = 1, 2, 3$, то гамильтониан становится $T/2 = \pi/\omega$-периодичен, а решения имеют период $T$. В этом случае полная фаза кратна $2\pi$, $\beta_\nu = \widetilde{\mathcal{E}}_\nu T + 2\pi$. Ясно, что могут быть взяты более общие преобразования: в частности, i) как прямое произведение $\mathcal{S}_i(t)$, $\mathcal{S}(t) = \prod\limits_{i=1}^{3} \mathcal{S}_i(t)$, ii) с более сложной зависимостью $\mathcal{S}$ от времени.

**1.3. Конкретные примеры.** Итак, всякий раз, когда потенциальная матрица $V(r)$ допускает точные решения системы стационарных уравнений Шредингера, мы можем генерировать семейства точно решаемых зависящих от времени гамильтонианов для нестационарного матричного уравнения Шредингера (1). Пусть $V(r)$ — баргмановская потенциальная матрица, для которой система стационарных уравнений (10) имеет точные решения. В качестве первой точно решаемой модели возьмем многоканальное обобщение задачи на всей оси $\infty < r < -\infty$ для так называемого прозрачного потенциала [59, 61], т. е. рассеиваемая частица проходит через потенциальную яму без отражения. В многоканальном случае этому соответствует единичная матрица прохождения. Например, для прозрачного потенциала, имеющего $N$ связанных состояний, с матричными элементами

$$V_{\alpha\alpha'}(r) = 2\frac{d}{dr}\sum_{\nu\lambda}^{N} \exp(-\kappa_\alpha^\nu r)\gamma_\alpha^\nu P_{\nu\lambda}^{-1}(r)\gamma_{\alpha'}^\lambda \exp(-\kappa_{\alpha'}^\lambda r) \tag{59}$$

решения Йоста определяются следующим образом:

$$F_{\alpha\alpha'}^{\pm}(k,r) = \exp(\pm ik_\alpha r)\delta_{\alpha\alpha'} - \\ - \sum_{\nu\lambda}^{N} \gamma_\alpha^\nu \exp(-\kappa_\alpha^\nu r) P_{\nu\lambda}^{-1}(r) \int\limits_r^\infty \gamma_{\alpha'}^\lambda \exp(-(\kappa_{\alpha'}^\lambda \pm ik_{\alpha'})r')dr', \tag{60}$$

где

$$P_{\nu\lambda} = \delta_{\nu\lambda} + \sum_{\alpha'}^{m} \frac{\gamma_{\alpha'}^\nu \gamma_{\alpha'}^\lambda}{\kappa_{\alpha'}^\nu + \kappa_{\alpha'}^\lambda} \exp(-(\kappa_{\alpha'}^\nu + \kappa_{\alpha'}^\lambda)r).$$

Здесь индексы $\nu$ и $\lambda$ соответствуют связанным состояниям, характеризуемым энергиями $\widetilde{\mathcal{E}}_\nu$ и амплитудами $\gamma_\alpha^\nu$, которые определяют нормировочную матрицу $|\gamma_\alpha^\nu\rangle\langle\gamma_{\alpha'}^\nu|$, индексы каналов обозначены как $\alpha,\alpha'$, $\alpha,\alpha' = 1,2,\ldots,m$, $k_\alpha^2 = \widetilde{\mathcal{E}}_\nu - \Delta_\alpha$, $\Delta_\alpha$ — пороговые энергии. Нормированное решение для векторной функции связанного состояния $|\Phi_\nu(r)\rangle = \{\Phi_\alpha(\widetilde{\mathcal{E}}_\nu, r)\}$ немедленно можно записать через матричные решения Йоста, взятые при энергии связанного состояния $\kappa_\nu^2 = -\widetilde{\mathcal{E}}_\nu$:

$$\Phi_\alpha(\widetilde{\mathcal{E}}_\nu, r) = \sum_{\alpha'} F_{\alpha\alpha'}(\kappa_\nu, r)\gamma_{\alpha'}^\nu. \tag{61}$$

Подстановка (59) в (33), (48), (54) и (61) в (34), (50), (56) позволяет определить три семейства потенциальных матриц и соответствующие им циклические решения в замкнутом аналитическом виде.

Рассмотрим простейший пример, когда исходная система уравнений (10) состоит из двух несвязанных уравнений:

$$-\begin{pmatrix}\Phi_1''(\widetilde{\mathcal{E}}_\nu, r)\\ \Phi_2''(\widetilde{\mathcal{E}}_\nu, r)\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}V_{11}(r) & 0\\ 0 & V_{22}(r)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Phi_1(\widetilde{\mathcal{E}}_\nu, r)\\ \Phi_2(\widetilde{\mathcal{E}}_\nu, r)\end{pmatrix} = \widetilde{\mathcal{E}}_\nu\begin{pmatrix}\Phi_1(\widetilde{\mathcal{E}}_\nu, r)\\ \Phi_2(\widetilde{\mathcal{E}}_\nu, r)\end{pmatrix}. \tag{62}$$

Диагональная матрица безотражательных потенциалов может быть получена при следующем выборе спектральных параметров: два связанных состояния взяты при энергиях $\widetilde{\mathcal{E}}_1$ и $\widetilde{\mathcal{E}}_2$, энергия порога $\Delta_\alpha = 0$, а две постоянные матрицы нормировок $\gamma_1^{\nu=2} = \gamma_2^{\nu=1} = 0$ и $\gamma_1^{\nu=1} \neq 0$, $\gamma_2^{\nu=2} \neq 0$. Чтобы еще больше упростить рассмотрение, возьмем $\gamma_1^{\nu=1} = \gamma_1 = 2\kappa_1$ и $\gamma_2^{\nu=2} = \gamma_2 = 2\kappa_2$. Тогда из (59) следует, что недиагональные элементы потенциальной матрицы равны нулю, $V_{12} = V_{21} = 0$, а ее диагональные элементы соответствуют прозрачным и симметричным потенциалам скалярного случая

$$V_{11} = -\frac{2\kappa_1^2}{\cosh^2\kappa_1 r}, \quad V_{22} = -\frac{2\kappa_2^2}{\cosh^2\kappa_2 r}.$$

Соответствующие функции связанного состояния определяются как

$$|\Phi(\widetilde{\mathcal{E}}_1, r)\rangle = \begin{pmatrix}\Phi_1(\widetilde{\mathcal{E}}_1, r)\\ 0\end{pmatrix}, \quad |\Phi(\widetilde{\mathcal{E}}_2, r)\rangle = \begin{pmatrix}0\\ \Phi_2(\widetilde{\mathcal{E}}_2, r)\end{pmatrix}$$

с

$$\Phi_1(\widetilde{\mathcal{E}}_1, r) = \frac{\sqrt{\kappa_1/2}}{\cosh\kappa_1 r}, \quad \Phi_2(\widetilde{\mathcal{E}}_2, r) = \frac{\sqrt{\kappa_2/2}}{\cosh\kappa_2 r}. \tag{63}$$

Используя нашу технику для второго из рассмотренных случаев с преобразованиями $\mathcal{S}_2(t) = \exp\left(-\hat{\sigma}_2\omega_2 t/2\right)$, из (48) получим следующий зависящий от времени гамильтониан:

$$H(r,t) = \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\kappa_1^2}{\cosh^2\kappa_1 r} - \frac{\kappa_2^2}{\cosh^2\kappa_2 r}\right)\hat{I} + \frac{V_{11}(r) - V_{22}(r)}{2}\times$$
$$\times\begin{pmatrix} \cos\omega_2 t & \sin\omega_2 t - \dfrac{i\omega_2}{V_{11}(r) - V_{22}(r)} \\ \sin\omega_2 t + \dfrac{i\omega_2}{V_{11}(r) - V_{22}(r)} & \cos\omega_2 t \end{pmatrix}, \quad (64)$$

где

$$\frac{V_{11}(r) - V_{22}(r)}{2} = \frac{\kappa_2^2}{\cosh^2\kappa_2 r} - \frac{\kappa_1^2}{\cosh^2\kappa_1 r}.$$

Отметим, что в результате $\mathcal{S}(t)$-преобразования исходная система несвязанных не зависящих от времени уравнений (62) становится системой связанных зависящих от времени уравнений. Далее, используя (50), получим соответствующие решения:

$$|\Psi_1(r,t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega_2 t/2)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t) \\ \sin(\omega_2 t/2)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t) \end{pmatrix} \frac{\sqrt{\kappa_1/2}}{\cosh\kappa_1 r},$$
$$|\Psi_2(r,t)\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\omega_2 t/2)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t) \\ \cos(\omega_2 t/2)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t) \end{pmatrix} \frac{\sqrt{\kappa_2/2}}{\cosh\kappa_2 r}. \quad (65)$$

Если $\gamma_1^{\nu=2} \neq 0$ и $\gamma_2^{\nu=1} \neq 0$, то, как это следует из (59), недиагональные элементы стационарной потенциальной матрицы не равны нулю, $V_{12} = V_{21} \neq 0$. Немного более сложная процедура также даст нам зависящие от времени потенциалы и соответствующие решения.

Подобные вычисления с третьим семейством гамильтонианов (54) приводят к следующей формуле:

$$H(r,t) = \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\kappa_1^2}{\cosh^2\kappa_1 r} - \frac{\kappa_2^2}{\cosh^2\kappa_2 r}\right)\hat{I} + \frac{V_{11}(r) - V_{22}(r)}{2}\times$$
$$\times\begin{pmatrix} \cos\omega_1 t & i\sin\omega_1 t - \dfrac{\omega_1}{V_{11}(r) - V_{22}(r)} \\ -i\sin\omega_1 t - \dfrac{\omega_1}{V_{11}(r) - V_{22}(r)} & -\cos\omega_1 t \end{pmatrix}. \quad (66)$$

Этот гамильтониан также связывает два зависящих от времени уравнения. Диагональные элементы в (64) и (66) похожи, только $\omega_2$ заменилось на $\omega_1$, но недиагональные элементы отличаются более существенно. Соответствующие (66) решения (56) запишем следующим образом:

$$|\Psi_1(r,t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t/2)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t) \\ -i\,\sin(\omega_1 t/2)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_1 t) \end{pmatrix} \frac{\sqrt{\kappa_1/2}}{\cosh\kappa_1 r},$$
$$|\Psi_2(r,t)\rangle = \begin{pmatrix} -i\,\sin(\omega_1 t/2)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t) \\ \cos(\omega_1 t/2)\,\exp(-i\widetilde{\mathcal{E}}_2 t) \end{pmatrix} \frac{\sqrt{\kappa_2/2}}{\cosh\kappa_2 r}. \tag{67}$$

Применение этой процедуры в первом случае с $\mathcal{S}(t) = \exp(-i\hat{\sigma}_3\omega t/2)$ к системе несвязанных уравнений (62) менее интересно, поскольку ее результатом будет система несвязанных зависящих от времени уравнений с гамильтонианом, который не зависит от времени:

$$H(r) = -\frac{d^2}{dr^2} + \begin{pmatrix} -\dfrac{\kappa_1^2}{\cosh^2\kappa_1 r} + \dfrac{\omega}{2} & 0 \\ 0 & -\dfrac{\kappa_2^2}{\cosh^2\kappa_2 r} - \dfrac{\omega}{2} \end{pmatrix}.$$

Более интересно здесь было бы рассмотрение ситуации, когда все $\gamma_i^\nu \neq 0$. Тогда все элементы исходной стационарной потенциальной матрицы отличны от нуля и, как результат, все элементы полученного нестационарного гамильтониана будут отличны от нуля.

Для примера рассмотрим простой случай стационарной задачи, когда безотражательная потенциальная матрица такова, что имеется только одно связанное состояние. Тогда элементы потенциальной матрицы и решений Йоста соответствующей стационарной задачи, как следует из соотношений (59) и (60), запишем как

$$\widetilde{V}_{\alpha\alpha'}(r) = 2\gamma_\alpha\gamma_{\alpha'}\frac{d}{dr}\left[\frac{\exp(-(\kappa_\alpha+\kappa_{\alpha'})r)}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\,\exp(-2\kappa_i r)}\right], \tag{68}$$

$$\widetilde{F}^{\pm}_{\alpha\alpha'}(k,r) = \exp(\pm ik_\alpha r)\delta_{\alpha\alpha'} - \\ -\frac{\gamma_\alpha\gamma_{\alpha'}\,\exp(-\kappa_\alpha r)\int\limits_r^\infty \exp(-(\kappa_{\alpha'}\pm ik_{\alpha'})r'dr')}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\,\exp(-2\kappa_i r)}. \tag{69}$$

Для компонент связанного состояния имеем

$$\Psi_\alpha(r) = \frac{\gamma_\alpha\,\exp(-\kappa_\alpha r)}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\,\exp(-2\kappa_i r)}. \tag{70}$$

Применение преобразования $\mathcal{S}(t) = \exp(-i\hat{\sigma}_3\omega t/2)$ дает в данном случае следующую зависящую от времени потенциальную матрицу с элементами:

$$
\begin{aligned}
V_{11}(r) &= 2\gamma_1^2 \frac{d}{dr}\left[\frac{\exp(-2\kappa_1 r)}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\exp(-2\kappa_i r)}\right] + \frac{\omega}{2},\\
V_{12}(r,t) &= 2\gamma_1\gamma_2 \frac{d}{dr}\left[\frac{\exp(-(\kappa_1+\kappa_2)r)}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\exp(-2\kappa_i r)}\right]\exp(-i\omega t),\\
V_{21}(r,t) &= 2\gamma_1\gamma_2 \frac{d}{dr}\left[\frac{\exp(-(\kappa_1+\kappa_2)r)}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\exp(-2\kappa_i r)}\right]\exp(i\omega t),\\
V_{22}(r) &= 2\gamma_2^2 \frac{d}{dr}\left[\frac{\exp(-2\kappa_2 r)}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\exp(-2\kappa_i r)}\right] - \frac{\omega}{2}.
\end{aligned}
\tag{71}
$$

Здесь $m = 1, 2$. Диагональные элементы потенциальной матрицы получили сдвиг $\pm\omega/2$, недиагональные элементы приобрели зависимость от времени. Компоненты решений (70) с учетом (34) преобразуются следующим образом:

$$
\Psi_1(r,t) = \exp\left(-i\left(\widetilde{\mathcal{E}}_1 + \frac{\omega}{2}\right)t\right)\frac{\gamma_1\exp(-\kappa_1 r)}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\ \exp(-2\kappa_i r)}, \tag{72}
$$

$$
\Psi_2(r,t) = \exp\left(-i\left(\widetilde{\mathcal{E}}_1 - \frac{\omega}{2}\right)t\right)\frac{\gamma_2\ \exp(-\kappa_2 r)}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\ \exp(-2\kappa_i r)}. \tag{73}
$$

Матричные элементы решений Йоста преобразуются следующим образом:

$$
\begin{aligned}
F_{11}^{\pm}(r,t) = \exp&\left(-i\left(\widetilde{\mathcal{E}}_1 + \frac{\omega}{2}\right)t\right)\times\\
&\times\left(\exp(\pm ik_1 r) - \frac{\gamma_1^2\ \exp(-\kappa_1 r)\int\limits_r^\infty \exp(-(\kappa_1 \pm ik_1)r'dr')}{1+\sum\limits_i^m(\gamma_i^2/2\kappa_i)\ \exp(-2\kappa_i r)}\right),
\end{aligned}
$$

$$F_{12}^{\pm}(r,t) = \exp\left(-i\left(\widetilde{\mathcal{E}}_1 + \frac{\omega}{2}\right)t\right) \times \\ \times \left( -\frac{\gamma_1\gamma_2 \exp(-\kappa_1 r) \int\limits_r^\infty \exp(-(\kappa_2 \pm ik_2)r' dr')}{1 + \sum\limits_i^m (\gamma_i^2/2\kappa_i)\exp(-2\kappa_i r)} \right),$$

$$F_{21}^{\pm}(r,t) = \exp\left(-i\left(\widetilde{\mathcal{E}}_2 - \frac{\omega}{2}\right)t\right) \times \\ \times \left( -\frac{\gamma_1\gamma_2 \exp(-\kappa_2 r) \int\limits_r^\infty \exp(-(\kappa_1 \pm ik_1)r' dr')}{1 + \sum\limits_i^m (\gamma_i^2/2\kappa_i)\exp(-2\kappa_i r)} \right),$$

$$F_{22}^{\pm}(r,t) = \exp\left(-i\left(\widetilde{\mathcal{E}}_2 - \frac{\omega}{2}\right)t\right) \times \\ \times \left( \exp(\pm ik_2 r) - \frac{\gamma_2^2 \exp(-\kappa_2 r) \int\limits_r^\infty \exp(-(\kappa_2 \pm ik_2)r' dr')}{1 + \sum\limits_i^m (\gamma_i^2/2\kappa_i)\exp(-2\kappa_i r)} \right).$$

Как мы покажем в дальнейшем, решения $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix}\Psi_1 \\ \Psi_2\end{pmatrix}$ с $\Psi_1$ и $\Psi_2$, определенными, как в (72) и (73), являются квазистационарными решениями. Очевидно, как построить две другие зависящие от времени потенциальные матрицы и соответствующие им решения.

## 2. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ФАЗЫ И ДИНАМИЧЕСКАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ

Перейдем теперь к вычислению таких физических величин, как динамические фазы, математическое ожидание $\epsilon_\nu(t)$ гамильтонианов $H(t)$ и геометрические фазы, которые ассоциируются с эволюцией циклических решений [3]. Чтобы определить динамическую фазу $\delta_\nu$, необходимо прежде найти математическое ожидание $\epsilon_\nu(t)$, поскольку

$$\delta_\nu = \int\limits_0^T \epsilon_\nu(t)dt, \tag{74}$$

$$\epsilon_\nu(t) = \langle\Psi_\nu(r,t)|H(t)|\Psi_\nu(r,t)\rangle = \langle\Psi_\nu(r,0)|\mathcal{U}^\dagger(t)H(t)\mathcal{U}(t)|\Psi_\nu(r,0)\rangle.$$

Используя (24) и (12), имеем

$$\mathcal{U}^\dagger(t)H(t)\mathcal{U}(t) = \mathrm{e}^{i\widetilde{H}(r)t}\Big(\widetilde{H}(r) - i\mathcal{S}^\dagger(t)\dot{\mathcal{S}}(t)\Big)\,\mathrm{e}^{-i\widetilde{H}(r)t}.$$

Так как для циклических решений $|\Psi_\nu(r,0)\rangle = |F_\nu(r)\rangle$ и $|F_\nu(r)\rangle$ есть вектор собственных состояний с собственным значением $\widetilde{\mathcal{E}}_\nu$, выразим среднее значение $\epsilon_\nu(t)$ и динамическую фазу $\delta_\nu$ следующим образом:

$$\epsilon_\nu(t) = \widetilde{\mathcal{E}}_\nu - \langle F_\nu(r)|i\mathcal{S}^\dagger(t)\dot{\mathcal{S}}(t)|F_\nu(r)\rangle, \tag{75}$$

$$\delta_\nu = \widetilde{\mathcal{E}}_\nu T - \int\limits_0^T \langle F_\nu(r)|i\mathcal{S}^\dagger(t)\dot{\mathcal{S}}(t)|F_\nu(r)\rangle\,dt. \tag{76}$$

Следовательно, геометрическая фаза $\varphi_\nu$, определяемая вычитанием из полной фазы $\beta_\nu$ динамической фазы, можем записать как

$$\varphi_\nu = \beta_\nu - \delta_\nu = \beta_\nu - \widetilde{\mathcal{E}}_\nu T + \int\limits_0^T \langle F_\nu(r)|i\mathcal{S}^\dagger(t)\dot{\mathcal{S}}(t)|F_\nu(r)\rangle\,dt. \tag{77}$$

Покажем теперь, что во всех рассмотренных примерах с $q_i(t) = \omega_i t$ математические ожидания для гамильтониана и спина, вычисленные для соответствующих циклических решений, не зависят от времени. Действительно, соотношение (75) с учетом преобразования $\mathcal{S}(t)$, как в (32), (47) и (53), дает следующее выражение для математического ожидания $H(t)$:

$$\epsilon_\nu^i = \langle F_\nu(r)|\widetilde{H}(r)|F_\nu(r)\rangle + \frac{\omega_i}{2}\langle F_\nu(r)|\hat{\sigma}^i|F_\nu(r)\rangle = \widetilde{\mathcal{E}}_\nu + \frac{\omega_i}{2}\bar{\hat{\sigma}}_\nu^i, \tag{78}$$

где величины $\bar{\hat{\sigma}}_\nu^i$ есть математические ожидания для спинов

$$\bar{\hat{\sigma}}_\nu^i = \langle \Psi_\nu(r,t)|\hat{\sigma}^i|\Psi_\nu(r,t)\rangle = \langle F_\nu(r)|\hat{\sigma}^i|F_\nu(r)\rangle, \tag{79}$$

которые не зависят от времени в этих случаях. Поэтому $\epsilon_\nu^i$ в (78) также не зависят от времени. Отметим, что плотность вероятности нахождения частицы в данной точке пространства-времени

$$P(r,t) = ||\Psi_\nu(r,t)\rangle|^2 = |F_\nu(r)\rangle|^2 \tag{80}$$

также не зависит от времени.

Из (78)–(80) следует, что нестационарное уравнение Шредингера (1) для полученного семейства зависящих от времени потенциальных матриц обладает решениями и свойствами, подобными стационарным. Такие свойства присущи так называемому эффекту динамической локализации, открытому для классических систем Паулем и Ратцем [8], Гапоновым и Миллером [9]. Квантово-механический анализ эффекта динамической локализации для потенциалов разных типов был проведен несколькими авторами [10–12]. В работах [10, 12] исследовались потенциалы вида $V(r,t) = V(r)\cos\omega t$, где зависимость от пространственной переменной определялась параболическим потенциалом, $V(r) = ar^2$, и периодическим потенциалом вида $V(r) = V\cos kr$. Здесь следует отметить, что исследованиям по точно решаемым нестационарным моделям предшествовали работы Фока [62], Ландау [63] и Джонсона и Липпмана [64] в пространственно-однородном магнитном поле. Затем проблема ионной ловушки в однородном магнитном поле и зависящем от времени квадрупольном электрическом была точно решена в [11] посредством сведения к осцилляторному потенциалу. В нашем подходе, основанном на преобразовании стационарных точно решаемых задач в нестационарные, зависимость как от пространственной, так и от временной переменной более сложная. Следует отметить, что класс стационарных точно решаемых задач весьма обширен. Каждый из соответствующих гамильтонианов может быть источником для целого семейства зависящих от времени гамильтонианов, допускающих точные решения. При этом можно конструировать гамильтонианы с желаемыми свойствами. В частности, мы дали примеры гамильтонианов с различной функциональной зависимостью от времени, для которых математические ожидания и плотность вероятности не зависят от времени. Это свойства, характерные для динамической локализации. Таким образом, одно из применений этого подхода — это моделирование таких квантовых систем, как потенциальные ямы, проволоки со свойством динамической локализации. Другое важное применение, которое будет представлено в следующем разделе, — это квантовые вычисления на основе точно решаемых моделей. Здесь мы покажем, как можно использовать подход для изучения геометрических фаз.

Известно, что классическая периодическая система через период возвращается в свое начальное состояние, в то время как квантовая система приобретает дополнительную фазу Берри. Для динамической фазы $\delta_\nu$ из (76) с учетом (78) имеем

$$\delta^i_\nu = \int\limits_0^T \epsilon^i_\nu(t)dt = \widetilde{\mathcal{E}}_\nu T + \pi\bar{\tilde{\sigma}}^i_\nu. \tag{81}$$

Геометрическую фазу получим с использованием формулы (77). Вычитая динамическую фазу (81) из полной фазы $\beta_\nu$

$$\beta_\nu = \pi + \widetilde{\mathcal{E}}_\nu T, \tag{82}$$

получим геометрическую фазу $\varphi_\nu$

$$\varphi^i_\nu = (\beta_\nu - \delta^i_\nu) = \pi(1 - \bar{\tilde{\sigma}}^i_\nu). \tag{83}$$

Очевидно, что геометрическая фаза определяется средним значением спина $\bar{\tilde{\sigma}}^i_\nu$ вдоль оси вращения. Имеет место так называемое выстраивание спина. Если $\bar{\tilde{\sigma}}^i_\nu = 0$, то изменение угла динамической фазы через период определяется как $\beta_\nu = \widetilde{\mathcal{E}}_\nu T$; соответственно, геометрическая фаза есть $\varphi^i_\nu = \pi$. (Например, во втором случае прямое вычисление дает $\bar{\tilde{\sigma}}^2_\nu = 0$.) Следовательно, изменение геометрической фазы через $n$ периодов равно $n\pi$. Это означает, что для четного числа периодов $n = 2, 4, 6, \ldots$ геометрическая фаза Берри $\varphi^i_\nu$ кратна $2\pi$ и она не оказывает влияния на зависящие от времени периодические решения. Это свойство стационарных решений. Как видно из (83), для нечетного числа периодов волновая функция меняет знак. Если через период $\bar{\tilde{\sigma}}^i_\nu = 1/2$, то геометрическая фаза $\varphi^i_\nu$ для нечетного числа периодов $n = 1, 3, 5, \ldots$ кратна $\pi/2$, т. е. $\varphi^i_\nu = n\pi/2$; а для четного числа периодов $n = 2, 4, 6, \ldots$ $\varphi^i_\nu = n\pi$ кратна $\pi$, и для $n = 4, 8, 12 \ldots$ геометрическая фаза снова не влияет на периодические решения. Так что квантование фазы Берри связано с квантованием спинового выстраивания и важно для физики с высокими значениями спинов (см. [36, 66]).

## 3. КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

В этом разделе представим способ получения универсального множества *квантовых вентилей* (quantum gates), используя полученные в явном виде матрицы эволюции для зависящих от времени гамильтонианов [65]. В квантовом компьютере логические операции разбиваются на дискретную совокупность последовательных во времени базисных квантовых операций — квантовых вентилей. Каждый вентиль выполняет унитарное преобразование над определенным числом кубитов. *Кубит* (quantum bit $\equiv$ «qubit») — это носитель информации в квантовом компьютере, является квантовым аналогом классического бита. Одним из основных условий, необходимых для построения квантового компьютера, является наличие универсального набора однокубитовых и двухкубитовых квантовых вентилей, с помощью которого может быть выполнено произвольное унитарное преобразование $\mathcal{U}(t)$ над $n$-кубитовой квантовой системой (*регистром*) в $2^n$-гильбертовом пространстве.

Классический бит — это система, которая может принимать два значения «0» и «1». В качестве кубита может быть взята любая квантовая система, имеющая как минимум два состояния. Одно состояние обозначается как $|0\rangle$, другое состояние, ему ортогональное, обозначается как $|1\rangle$. Произвольное состояние кубита можно представить как

$$|\phi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \tag{84}$$

где $a$ и $b$ — комплексные числа. Компоненты двумерных векторов $|0\rangle$, $|1\rangle$ и $|\phi\rangle$ записываются в виде столбцов

$$|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \quad |\phi\rangle = a\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + b\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}.$$

Множество двумерных векторов состояний $|\phi\rangle$ образует гильбертово пространство кубита $C^2$. Соотношение (84) отражает принцип суперпозиции квантовой механики: если векторы $|0\rangle$ и $|1\rangle$ — решения уравнения Шредингера, то их *любая* суперпозиция также есть решение. Состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ служат ортами в этом пространстве. Соотношение (84) означает, что кубит находится в когерентной суперпозиции двух состояний, при этом с вероятностью $|a|^2$ он находится в состоянии $|0\rangle$ и с вероятностью $|b|^2$ — в состоянии $|1\rangle$, $|a|^2+|b|^2 = 1$, т. е. кубит можно описать единичным вектором в пространстве $C^2$. Способность кубита находиться в когерентной суперпозиции двух состояний есть главное отличие от классического бита, в котором булевы состояния «0» или «1» могут быть заняты с вероятностями либо $p(0) = 1$, либо $p(1) = 1$. Удобным примером кубита является ядерный или электронный спин $\mathbf{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$, который во внешнем постоянном магнитном поле имеет два уровня энергии, соответствующие направлениям спина вдоль и против поля. В этом случае гамильтониан имеет вид $\widetilde{H} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\widetilde{\mathbf{B}}$ (см. (44)). Его два собственных вектора решений (45) можно рассматривать как пример двух кубитов

$$\begin{aligned} |\phi_1\rangle &= \begin{pmatrix}\cos(\widetilde{\theta}/2)\\ \sin(\widetilde{\theta}/2)\end{pmatrix} = \cos(\widetilde{\theta}/2)|0\rangle + \sin(\widetilde{\theta}/2)|1\rangle,\\ |\phi_2\rangle &= \begin{pmatrix}-\sin(\widetilde{\theta}/2)\\ \cos(\widetilde{\theta}/2)\end{pmatrix} = -\sin(\widetilde{\theta}/2)|0\rangle + \cos(\widetilde{\theta}/2)|1\rangle. \end{aligned} \tag{85}$$

Здесь амплитуды $a$ и $b$ — действительные числа: для кубита $|\phi_1\rangle$ имеем $a = \cos(\widetilde{\theta}/2)$ и $b = \sin(\widetilde{\theta}/2)$, для кубита $|\phi_2\rangle$ имеем $a = -\sin(\widetilde{\theta}/2)$ и $b = \cos(\widetilde{\theta}/2)$. При этом $\widetilde{\theta}$ может принимать любое значение в интервале $[0, 2\pi]$. В общем случае $a$ и $b$ — комплексные числа, $a = |a|\exp(i\vartheta_a)$, $b = |b|\exp(i\vartheta_b)$.

Преобразование вектора $|\phi\rangle = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ в вектор $|\phi'\rangle = \begin{pmatrix}a'\\b'\end{pmatrix}$ осуществляется с помощью унитарной матрицы $\mathcal{U}$ второго порядка:

$$|\phi'\rangle = \mathcal{U}(2\times 2)|\phi\rangle.$$

Геометрически такое преобразование есть вращение вектора $|\phi\rangle$ до совпадения с вектором $|\phi'\rangle$, т. е. матрица $\mathcal{U}$ осуществляет поворот вектора $|\phi\rangle$ в гильбертовом пространстве. *Такого рода преобразования в квантовых вычислениях определяют однокубитовые квантовые операции (квантовые гейты «gates» или вентили).*

Квантовый компьютер представляет собой регистр, состоящий из $n$ кубитов, которые контролируемым образом управляются внешними сигналами. Вектор состояния, состоящий из $n$ кубитов, есть единичный вектор в комплексном гильбертовом пространстве, образованном как тензорное произведение из $n$ пространств $C^2 \otimes C^2 \otimes \ldots \otimes C^2$. Базис, состоящий из $2^n$ векторов, выбирают в виде

$$\begin{array}{r}|j_0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \ldots \otimes |0\rangle \\ |j_1\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \ldots \otimes |1\rangle \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ |j_{2^n-1}\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle \ldots \otimes |1\rangle.\end{array} \quad (86)$$

Для краткости тензорное произведение часто опускают и вводят обозначение $|i_1, i_2, \ldots, i_n\rangle = |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \ldots |i_n\rangle \equiv |j\rangle$, $i_1, i_2, \ldots, i_n = \{0, 1\}$. Произвольное состояние в $2^n$-мерном гильбертовом пространстве представляет собой разложение по $2^n$ базисным состояниям (86)

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=0}^{2^n-1} a_k |j_k\rangle. \quad (87)$$

Здесь $a_i$ — проекции вектора $|\Psi\rangle$ на направления ортов $|j_0\rangle, |j_1\rangle, \ldots, |j_{2^n-1}\rangle$, при этом $\sum\limits_k a_k^2 = 1$. Легко посчитать ресурс квантового компьютера: суперпозиция (87) содержит $2^n$ слагаемых. Если выбрать $n \simeq 10^3$ кубитов, то получим экспоненциально большой $2^n = 2^{1000}$ информационный ресурс квантового компьютера.

Процесс вычисления на квантовом компьютере рассматривается как преобразование начального вектора состояния $|\Psi_0\rangle$ в конечный вектор $|\Psi_f\rangle$ с помощью унитарной матрицы эволюции $\mathcal{U}(t)$ размерностью $(2^n \times 2^n)$:

$$|\Psi_f\rangle = \mathcal{U}(2^n \times 2^n)|\Psi_0\rangle. \quad (88)$$

Удобно начальное состояние компьютера выбрать так, чтобы все его кубиты находились в состоянии $|0\rangle$: $|\Psi_0\rangle = |0_1\rangle \otimes |0_2\rangle \ldots \otimes |0_n\rangle = |0_1, 0_2, \ldots, 0_n\rangle \equiv |j_0\rangle$. Эта операция называется подготовкой или *инициализацией* квантового регистра. Матрицы $\mathcal{U}(2^n \times 2^n)$ определяют динамическую эволюцию квантовой системы. Алгоритм решения задачи заключен в матрице преобразования $\mathcal{U}(2^n \times 2^n)$, которая в каждый фиксированный момент времени будет обеспечивать процесс квантового вычисления. Поэтому необходимо найти гамильтониан $\mathcal{H}(t)$, который управляет эволюцией.

Реализация преобразования $\mathcal{U}(2^n \times 2^n)$ при больших $n > 10^3$ весьма сложная задача. Обычно рассматривается возможность разложения матрицы $\mathcal{U}(2^n \times 2^n)$ в упорядоченное произведение матриц второго и четвертого порядков:

$$\mathcal{U}(2^n \times 2^n) = \prod_{i,j} \mathcal{U}_i(2 \times 2) \otimes \mathcal{U}_j(2^2 \times 2^2). \tag{89}$$

Матрицы второго порядка $\mathcal{U}_i(2 \times 2)$ преобразуют векторы состояний одного кубита:

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix}_i \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_i .$$

Матрицы четвертого порядка $\mathcal{U}_j(2^2 \times 2^2)$ преобразуют векторы состояний пар кубитов.

Покажем теперь, как можно генерировать однокубитовые вентили, используя полученные в явном виде матрицы эволюции. В разд. 1 было показано, как, используя стационарные точно решаемые задачи и специальные зависящие от времени преобразования, конструировать зависящие от времени гамильтонианы, допускающие точные решения. Поскольку решения мы представляем в явном виде при любом значении $t$, то в явном виде имеем также матрицу эволюции. Рассмотрим квантовую систему, которая эволюционирует в соответствии с уравнением Шредингера (1) с гамильтонианом (57), представленном в виде

$$H(t) = \\ = \lambda \begin{pmatrix} \cos\widetilde{\theta}\cos(\omega_1 t) & \sin\widetilde{\theta} - \dfrac{\omega_1}{2\lambda} + i\cos\widetilde{\theta}\sin(\omega_1 t) \\ \sin\widetilde{\theta} - \dfrac{\omega_1}{2\lambda} - i\cos\widetilde{\theta}\sin(\omega_1 t) & -\cos\widetilde{\theta}\cos(\omega_1 t) \end{pmatrix}. \tag{90}$$

Здесь использовано обозначение $\lambda$ вместо $\widetilde{\Omega}$ в (44) и (57). Этот гамильтониан и соответствующие ему циклические решения (58) получены с помощью преобразования $S(t) = \exp(-i\sigma_1\omega_1 t/2)$ над стационарным гамильтонианом (44). Предполагаем, что начальное состояние кубита взято в одном из состояний $\phi_1 = \cos\widetilde{\theta}/2|0\rangle + \sin\theta/2|1\rangle$ или $\phi_2 = -\sin\theta/2|0\rangle + \cos\widetilde{\theta}/2|1\rangle$ гамильтониана (44). Матрица эволюции, соответствующая гамильтониану (90), имеет вид

$$\mathcal{U}_1(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t/2) & -i\sin(\omega_1 t/2) \\ -i\sin(\omega_1 t/2) & \cos(\omega_1 t/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(-i\lambda t) & 0 \\ 0 & \exp(i\lambda t) \end{pmatrix}. \tag{91}$$

Эта матрица эволюции дает непрерывный набор однокубитовых вентилей, которая контролируется параметрами $\omega_1$ и $\lambda$.

Важным однокубитовым преобразованием является операция отрицания или инверсии НЕ (NOT):

$$\mathsf{NOT} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x, \tag{92}$$

Операция отрицания NOT соответствует умноженной на мнимую единицу операции поворота вектора состояния кубита на угол $\pi$ вокруг $x$-оси. Действительно, $iS_1(\gamma) = i\begin{pmatrix} \cos(\gamma/2) & -i\sin(\gamma/2) \\ -i\sin(\gamma/2) & \cos(\gamma/2) \end{pmatrix}$. Подставляя сюда $\gamma = \pi$, получим оператор NOT. Очевидно, что операция NOT осуществляет инверсию базисных состояний, а именно, вектор состояния $|0\rangle$ переводит в вектор $|1\rangle$ и наоборот. Вентиль NOT можно получить, используя домноженное на $i$ соотношение (91) при $\omega_1 t = \pi$ и $\lambda t = 2n\pi$:

$$\mathsf{NOT} = iU_1(\omega_1 t = \pi,\ \lambda t = 2n\pi) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{93}$$

Отметим, что NOT может действовать также и на суперпозицию состояний

$$\mathsf{NOT}(a|0\rangle + b|1\rangle) = a|1\rangle + b|0\rangle.$$

Линейность операции NOT ответственна за квантовый параллелизм [67] — важное свойство, встречаемое во всех квантовых алгоритмах.

Другой специальный однокубитовый вентиль можно получить из (91), полагая $\omega_1 t = \pi$ и $\lambda t = \pi/2$ и домножая результат на $i$:

$$\mathsf{Y} = iU_1(\omega_1 t = \pi,\ \lambda t = \pi/2) = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y. \tag{94}$$

Вентиль Z получается из (91) при $\omega_1 t = 4\pi$ и $\lambda t = \pi/2$ после домножения на $i$:

$$\mathsf{Z} = iU_1(\omega_1 t = 4\pi,\quad \lambda t = \pi/2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z. \tag{95}$$

В науке о квантовой информации часто используется матрица преобразования Адамара

$$\mathsf{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z). \tag{96}$$

Характерное свойство операции Адамара состоит в том, что при действии на любое из базисных состояний она создает равновероятную суперпозицию обоих базисных состояний:

$$\mathsf{H}|0\rangle = \mathsf{H}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad \mathsf{H}|1\rangle = \mathsf{H}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle).$$

Предположим теперь, что начальное состояние кубита находится в равновероятной суперпозиции состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$: $\sqrt{1/2}(|0\rangle + |1\rangle) = \sqrt{1/2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$. Тогда матрица эволюции $\mathcal{U}(t)$, соответствующая гамильтониану (90), запишется следующим образом:

$$\mathcal{U}(t) = \exp\left(-\frac{i\sigma_x\omega_1 t}{2}\right)\exp\left(-i\sigma_z\lambda t\right)\exp\left(-\frac{i\sigma_y\widetilde{\theta}}{2}\right) = \\ = \begin{pmatrix}\cos(\omega_1 t/2) & -i\sin(\omega_1 t/2)\\ -i\sin(\omega_1 t/2) & \cos(\omega_1 t/2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\exp(-i\lambda t) & 0\\ 0 & \exp(i\lambda t)\end{pmatrix}\times \\ \times\begin{pmatrix}\cos(\widetilde{\theta}/2) & -\sin(\widetilde{\theta}/2)\\ \sin(\widetilde{\theta}/2) & \cos(\widetilde{\theta}/2)\end{pmatrix}. \quad (97)$$

При $t = 0$, $\widetilde{\theta} = \pi/2$ и любых $\omega_1$ и $\lambda$ из (97) получаем вентиль

$$\mathcal{U}(\omega_1, \lambda; t = 0, \widetilde{\theta} = \pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}. \quad (98)$$

Чтобы получить вентиль Адамара, домножим эту матрицу $\mathcal{U}$ на вентиль $\mathsf{NOT}$, который можно получить, например, как в (93), или используя матрицу (97) $\mathsf{NOT} = iU(\pi, 2\pi n, \widetilde{\theta} = 0)$, поскольку $U_1(t) = U(t; \widetilde{\theta} = 0)$,

$$\mathsf{H} = iU(\pi, 2\pi n, \widetilde{\theta} = 0)U(\omega_1, \lambda, \widetilde{\theta} = \pi/2; t = 0). \quad (99)$$

Итак, вентиль Адамара $\mathsf{H}$ получен как результат последовательности двух преобразований. Будучи примененным к $n$ кубитам $|0\rangle$, вентиль $\mathsf{H}$ генерирует суперпозицию из $2^n$ возможных состояний. Таким образом достигается бинарное представление чисел от 0 до $2^n - 1$

$$(H \otimes H \otimes \ldots \otimes H)|00\ldots 0\rangle = \\ = \frac{1}{\sqrt{2^n}}\left((|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes \ldots \otimes (|0\rangle + |1\rangle)\right) = \frac{1}{\sqrt{2^n}}\sum_{k=0}^{2^n-1}|j_k\rangle. \quad (100)$$

Очевидно, что $\mathcal{U}(t)$ генерирует все матрицы из $SU(2)$. Действие крайней правой матрицы на состояние $\sqrt{1/2}(|0\rangle + |1\rangle)$ обеспечивает все когерентные состояния двух кубитов $|\phi_1\rangle$ и $|\phi_2\rangle$ (см. (85)), которые контролируемым образом можно вращать вокруг осей $z$ и $x$. Отметим, что в нашем подходе при таком построении однокубитовых вентилей эффект геометрической фазы (83) учитывается естественно. Действительно, из-за периодичности матрицы эволюции с периодом $T = 2\pi m$ легко видеть из (91), что состояние изменяет знак при $\omega_j t_j = 2\pi m$. Следует отметить, что приведенная выше последовательность вентилей не является единственной. Все рассмотренные в разд. 1 примеры могут быть использованы аналогичным образом для построения однокубитовых вентилей. Рассмотрим теперь построение двухкубитовых вентилей.

**3.1. Конструирование гамильтониана с заранее заданным оператором запутывания.** Итак, управление работой квантового компьютера с $n$ кубитами моделирует преобразование $\mathcal{U}(2^n \times 2^n)$, которое переводит начальное состояние $|\Psi_0\rangle$ в конечное $|\Psi_f\rangle = \mathcal{U}(2^n \times 2^n)|\Psi_0\rangle$, где $|\Psi_0\rangle$ и $|\Psi_f\rangle$ — векторы с $2^n$ компонентами. Для двухкубитовой системы имеется четыре вычислительных базисных состояния, в четырехмерном гильбертовом пространстве, построенных на однокубитовых состояниях: $\{|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$, $|01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$, $|10\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle$, $|11\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle\}$,

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Вектор произвольного чистого двухкубитового состояния представляется суперпозицией базисных состояний:

$$|\Psi\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{11}|11\rangle = \begin{pmatrix} c_{00} \\ c_{01} \\ c_{10} \\ c_{11} \end{pmatrix},$$

где $|c_{00}|^2 + |c_{01}|^2 + |c_{10}|^2| + |c_{11}|^2 = 1$. Отметим, что ни в каком базисе чистые двухкубитовые состояния не представимы в виде прямого произведения однокубитовых состояний $|\Psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$. Это свойство называют *запутанностью* (принятый английский термин — entanglement). Запутанность свидетельствует о наличии нелокальных квантовых корреляций между двумя спинами, аналога которым нет в классических системах. Степень запутанности характеризуют инвариантным параметром, который называется согласованностью: $C = 2|c_{00}c_{11} - c_{10}c_{01}|$. Для незапутанных (сепарабельных) состояний $C = 0$, при этом $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$. Для запутанных состояний $C \neq 0$. Двухкубитовые операции соответствуют поворотам в четырехмерном гильбертовом пространстве состояний двух кубитов. Если начальное состояние задано как $|\Psi_0\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{11}|11\rangle$, то матрица $\mathcal{U}_j(2^2 \times 2^2)$ преобразует его в вектор $|\Psi_f\rangle = c'_{00}|00\rangle + c'_{10}|10\rangle + c'_{01}|01\rangle + c'_{11}|11\rangle$. Число сомножителей второго и четвертого порядков в (89) определяет число операций, необходимых для реализации квантового алгоритма. Алгоритм считается эффективным, если число операций полиномиально связано с числом кубитов, и алгоритм неэффективен, если число операций экспоненциально возрастает с числом используемых кубитов.

Одним из основных двухкубитовых вентилей является обратимый инвертор или оператор *контролируемое* НЕ (Controlled NOT=CNOT). Этот вентиль описывается матрицей $4 \times 4$, которую можно представить в виде

$$\mathsf{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \sigma_x = \\ = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbf{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x.$$

Здесь $\mathbf{1}$ — единичная матрица $2 \times 2$. Действие оператора CNOT следующее: если первый *контролирующий* кубит находится в состоянии $|0\rangle$, то оператор CNOT не изменяет состояния второго *контролируемого* кубита; но если первый кубит находится в состоянии $|1\rangle$, то оператор CNOT инвертирует состояние второго кубита: $|0\rangle \to |1\rangle$ и $|1\rangle \to |0\rangle$. Оператор CNOT обладает богатыми возможностями: он может действовать на суперпозицию состояний, образовывать суперпозицию состояний, создавать и разрушать запутанные состояния. Отметим, что двухкубитовая операция CNOT плюс множество однокубитовых операций (континуум вращений вектора состояний) образуют универсальный набор вентилей, позволяющий осуществить любое преобразование векторов состояний.

**3.2. Моделирование простой квантовой системы.** При исследовании динамических процессов в квантовой механике решают нестационарное уравнение Шредингера (1). С использованием оператора эволюции $U(t) = \exp(-iHt)$ решение уравнения динамики (1) сводится к преобразованию вектора состояния системы (3): $\Psi(r,t) = U(t)\Psi(r,0)$. Выберем гамильтониан в виде

$$H = h \otimes 1 + 1 \otimes h + \epsilon A, \tag{101}$$

где $\epsilon \in \{0,1\}$, гамильтониан $h$ не зависит от времени и имеет вид $h = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$. Тогда, если оператор $A$ коммутирует с $h \otimes 1 + 1 \otimes h$, то оператор эволюции представится следующим образом:

$$\mathcal{U}(t) = (\mathrm{e}^{-iht} \otimes \mathrm{e}^{-iht})\, \mathrm{e}^{-iAt}. \tag{102}$$

Наша цель — построить гамильтониан $H$ вида (101) так, чтобы соответствующий ему оператор эволюции (102) стал оператором запутывания. Для этого выберем оператор $\mathrm{e}^{-iAt} \equiv R(t)$ в виде

$$R(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(t) & -i\sin(t) & 0 \\ 0 & -i\sin(t) & \cos(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{103}$$

Матрицу $A(t)$ найдем из

$$A = i\frac{dR(t)}{dt}R^{-1}(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{104}$$

Матрица $h = \frac{\sigma_3}{2} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ удовлетворяет условию коммутации $[A, (h\otimes 1 + 1\otimes h)] = 0$. Наконец, подстановка $\mathrm{e}^{-iAt}$ и $h$ в (102) дает оператор запутывания

$$\mathcal{U}(t) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{it} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(t) & -i\sin(t) & 0 \\ 0 & -i\sin(t) & \cos(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathrm{e}^{-it} \end{pmatrix}.$$

Итак, оператор запутывания получен с использованием унитарного зависящего от времени преобразования (103), которое приводит к зависящему от времени периодическому оператору $\mathcal{U}(t)$ и запутыванию состояний. Этому $\mathcal{U}(t)$ соответствует гамильтониан (101) с $A$, как в (104). Интересно отметить, что даже в случае, когда начальный гамильтониан не дает оператора запутывания, после подходящего выбора калибровочного преобразования можно получить гамильтониан, который будет приводить к запутыванию.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дан метод решения в явном аналитическом виде нестационарных матричных уравнений Шредингера. Метод основан на стационарных точно решаемых задачах, определенном выборе начальных условий и специальных зависящих от времени калибровочных преобразованиях, переводящих стационарные задачи в нестационарные. Показано, что каждая из стационарных точно решаемых моделей может быть обобщена так, чтобы получить целое семейство нестационарных точно решаемых моделей.

Предъявлены семейства гамильтонианов с различной функциональной зависимостью от времени, допускающие решения систем уравнений Шредингера в явном виде. Подход применяется для исследования неадиабатической эволюции нейтральной частицы со спином $1/2$, обладающей магнитным моментом, во вращающемся неоднородном магнитном поле.

В качестве применения метода в явном виде представлены выражения для математического ожидания гамильтониана, полной, динамической и неадиабатической геометрической фаз, вычисленные в терминах полученных решений. В частности, конструируется ряд периодически зависящих от времени гамильтонианов, математические ожидания для которых не зависят от времени. Подход открывает возможности для моделирования квантовых динамических систем с предопределенными свойствами, в частности, со свойством локализации частиц. Исследуются квантовые фазы, возникающие при циклической эволюции квантовых систем.

Показано, как полученные точно решаемые нестационарные задачи можно использовать для построения универсального набора вентилей для квантовых компьютеров. Обсуждается способ получения операторов запутывания.

**Благодарности.** Эта работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 06-01-00228. Авторы благодарны профессорам И. В. Пузынину и И. Е. Тралле за полезные обсуждения, связанные с темой данного обзора.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mead C. A., Trular D.* // J. Chem. Phys. 1979. V. 70. P. 2284; *Mead C. A.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. P. 161.
2. *Mead C. A.* // Rev. Mod. Phys. 1992. V. 64. P. 51.
3. *Berry M.* // Proc. Roy. Soc. Lond. A. 1984. V. 392. P. 45.
4. *Aharonov Y., Anandan J.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 1593.
5. *Kuznezov D., Bulgac A.* // Ann. of Phys. 1992. V. 214. P. 180; *Kuznezov D.* // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. P. 1990.
6. *Landau L. D.* // Phys. Z. Sov. 1932. V. 1. P. 88.
7. *Zener C.* // Proc. Roy. Soc. A. 1932. V.137. P. 696.
8. *Paul W., Raether M.* // Z. Phys. 1955. V. 140. P. 262.
9. *Gaponov A. V., Miller M. A.* // J. Eksp. Teor. Fiz. 1958. V. 43. P. 242.
10. *Cook R. et al.* // Phys. Rev. A. 1985. V. 31. P. 564.
11. *Gheorghe V.N., Vedel F.* // Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 4828.
12. *Tralle I. E.* // Phys. Rev. A. 1993. V. 48. P. 443; J. Phys. D. 1993. V. 27. P. 1713; Physica E: Low-Dim. Syst. Nanostr. 2003. V. 9. P. 275.
13. *Кокин А. А.* Твердотельные квантовые компьютеры на ядерных спинах. М.: Ижевск, 2004. 203 с.
14. *Валиев К. А.* Квантовые компьютеры и квантовые вычисления // УФН. 2005. Т. 175, № 1. С. 3–39.
15. *Bryglinski J. L., Bryglinski R.* Universal Quantum Gates in Mathematics of Quantum Computation. Boca Ratton, Florida: Chapman and Hall; CRC Press, 2002.
16. *Kauffman L. H.* Braiding Operators Are Universal Quantum Gates. quant-ph/0401090. 2004.

17. *Radtke T., Fritzshe S.* // Comp. Phys. Commun. 2005. V. 173. P. 91–113.

18. *Radtke T., Fritzshe S.* // Comp. Phys. Commun. 2006. V. 175. P. 145–166.

19. *Zanardi P., Rasetti M.* // Phys. Lett. A. 1999. V. 264. P. 94.

20. *Pachos J., Zanardi P., Rasetti M.* // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. P. 1.

21. *Pachos J., Chountasis S.* // Ibid. V. 62. P. 2318.

22. *Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.

23. *Переломов А. М.* Обобщенные когерентные состояния и их применения. М.: Наука, 1987.

24. *Переломов А. М., Попов В. С.* // ТМФ. 1969. Т. 1. С. 360.

25. *Feinman B. P.* // Phys. Rev. 1951. V. 84. P. 108.

26. *Shwinger J.* // Phys. Rev. 1953. V. 91. P. 728.

27. *Levis H. R.* // J. Math. Phys. 1962. V. 3. P. 806.

28. *Levis H. R., Riesenfeld W. B.* // J. Math. Phys. 1969. V. 10. P. 1458.

29. *Malkin I. A., Man'ko V. I.* Dynamical Symmetries and Coherent States of Quantum Systems. M.: Nauka, 1979.

30. *Lo C. F.* // Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 5262.

31. *Maamache M.* // Phys. Rev. A. 1995. V. 52. P. 936.

32. *Bohm A. et al.* The Geometric Phase in Quantum Systems. Berlin; Heidelberg; N. Y.: Springer-Verlag, 2003. 439 p.

33. *Bay K., Lay W., Akopyan A.* // J. Phys. A: Math Gen. 1997. V. 30. P. 3057.

34. *Barut A. O. et al.* // Phys. Rev. A. 1993. V. 47. P. 2581.

35. *Bozic M., Ljmbard R., Maric Z.* // Z. Phys. D: Atoms, Moleculas and Clusters. 1991. V. 18. P. 311.

36. *Wang Shun-Jin* // Phys. Rev. A. 1990. V. 42. P. 5103; 5107.

37. *Stone M.* // Phys. Rev. D. 1987. V. 33. P. 1191.

38. *Efthimiou C. J., Spector D.* // Phys. Rev. A. 1994. V. 49. P. 2301.

39. *Samsonov B. F.* // J. Phys. A: Math. Gen. 2000. V. 33. P. 591.

40. *Moore D. I., Stedman G. E.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1990. V. 23. P. 2049;
*Moore D. I.* // Ibid. P. L665.

41. *Suzko A. A.* // Phys. Lett. A. 2003. V. 308. P. 267.

42. *Сузько А. А., Величева Е. П.* // ТМФ. 1998. Т. 115. С. 687.

43. *Wu Lian-Ao, Sun J., Zhong Ji-Yu* // Phys. Lett. A. 1993. V. 183. P. 257.

44. *Shi-Min Cui* // Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 5255.

45. *Mostafazadeh Ali* // J. Phys. A: Math. Gen. 1999. V. 32. P. 8157.

46. *Agranovich Z. S., Marchenko V. A.* Inversion Problem of Scattering Theory. N. Y.: Gordon and Breach, 1963.

47. *Левитан Б. М.* Обратные задачи Штурма–Лиувилля. М.: Наука, 1984.

48. *Chadan K., Sabatier P. C.* Inverse Problems in Quantum Scattering Theory. 2nd ed. N. Y.: Springer, 1989.

49. *Matveev V. B., Salle M. A.* Darboux Transformations and Solitons. N. Y.: Springer, 1991.

50. *Matveev V. B., Salle M. A.* // Lett. Matt. Phys. 1979. V. 3. P. 213.

51. *Etingrof P., Gelfand I. M., Retakh V.* Factorization of Differential Operators, Quasideterminants and Nonabelian Toda Field Equation. q-alg9701008. 1997.

52. *Goncharenko V. M., Veselov A. P.* // J. Phys. A. 1998. V. 31. P. 5315.

53. *Andrianov A. A. et al.* // J. Phys. A. 1997. V. 30. P. 5037.

54. *Junker G.* Supersymmetric Method in Quantum and Statistical Physics. Berlin; Heidelberg; N. Y.: Springer-Verlag, 1996.

55. *Zakhariev B. N., Suzko A. A.* Direct and Inverse Problems // Potentials in Quantum Scattering. Berlin; Heidelberg; N. Y.: Springer-Verlag, 1990. 223 p.

56. *Suzko A. A.* // Intern. J. Mod. Phys. A. 1997. V. 12. P. 277–282.

57. *Suzko A. A.* // Physica Scripta. 1986. V. 34. P. 5.

58. *Сузько А. А.* // ЯФ. 1992. Т. 55. С. 2446.

59. *Suzko A. A.* In Quantum Inversion. Theory and Applications // Lectures Notes in Physics / Ed. by H. V. von Geramb. 1994. V. 427. P. 67–106; Intern. J. Mod. Phys. 1997. V. 12, No. 1. P. 277–282.

60. *Nieto L. M., Samsonov B. F., Suzko A. A.* // J. Phys. A. 2003. V. 36. P. 12293.

61. *Suzko A. A.* // Phys. Lett. A. 2005. V. 335. P. 88–102.

62. *Fock V. A.* // Z. Phys. 1928. V. 47. P. 446.

63. *Landau L. D.* // Z. Phys. 1930. V. 64. P. 629.

64. *Johnson M. H., Lippmann B. A.* // Phys. Rev. 1949. V. 76. P. 828.

65. *Suzko A. A., Giorgadze G.* Quantum Computing in Exactly Solvable Models and Geometric Phases // Современная математика и ее приложения. 2007. Т. 44. С. 141–151.

66. *Reinhard H.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. P. 2823.

67. *Margolus N.* Parallel Quantum Computation // Complexity, Entropy, and the Physics of Information. Santa Fe Inst. Studies in the Sci. of Complexity / Ed. W. H. Zurek. Addison-Wesley, 1990. V. VIII. P. 273.