**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки**

**МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМ. В. А. СТЕКЛОВА РАН**

На правах рукописи

Трушечкин Антон Сергеевич

# СВОЙСТВА МОДЕЛЕЙ НЕОБРАТИМОЙ КВАНТОВОЙ ДИНАМИКИ И КВАНТОВОЙ КРИПТОГРАФИИ

01.01.03 — Математическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
член-корреспондент РАН И. В. Волович

**Москва — 2019**

# ОГЛАВЛЕНИЕ

**Введение** 6

**ГЛАВА 1 Функционал производства энтропии для уравнения Горини–Коссаковски–Сударшана–Линдблада** 33

1.1 Основные определения и обозначения . . . . . 33

1.2 Функционал производства энтропии и его неотрицательность . . . . 41

1.3 Адиабатический и неадиабатический вклады в производство энтропии 47

1.4 Примеры функционалов производства энтропии . . . . . 53

1.4.1 Система, взаимодействующая с тепловым резервуаром в режиме слабой связи . . . . . 53

1.4.2 Система, взаимодействующая с тепловым резервуаром в режиме повторяющихся взаимодействий . . . . . 57

1.5 Нахождение стационарных решений уравнения ГКСЛ при помощи функционала производства энтропии . . . . . 59

1.5.1 Система с невырожденным спектром . . . . . 62

1.5.2 Система с вырожденным спектром . . . . . 63

1.5.3 Система, взаимодействующая с двумя резервуарами . . . . . 65

**ГЛАВА 2 Квазиклассическая эволюция на торе за пределами времени Эренфеста и выравнивание плотности** 70

2.1 Предварительные сведения и результаты . . . . . 70

2.1.1 Мотивация и содержание главы . . . . . 70

2.1.2 Свободная квантовая эволюция на плоском торе . . . . . 73

2.1.3 Когерентные состояния . . . . . 74

2.1.4 Распределение Хусими . . . . . 76

2.1.5 Распределение Вигнера . . . . . 78

2.2 Эволюция волновых пакетов на торе в квазиклассическом пределе больших времён . . . . . 83

2.3 Обсуждение . . . . . 93

2.3.1 Три масштаба времени . . . . . 93
2.3.2 Рациональные и иррациональные моменты времени . . . . . 94
2.3.3 Гауссовские когерентные состояния . . . . . 95
2.3.4 Физически малые параметры . . . . . 95
2.3.5 Связь с теоремами о диффузии . . . . . 96

**ГЛАВА 3 Оптимальное приближение к квантовому эффекту Зенона в модели Ландау–Зинера** 98
3.1 Модель Ландау–Зинера . . . . . 98
3.2 Формула Ландау–Зинера . . . . . 101
3.3 Квантовое управление посредством измерений . . . . . 103
3.4 Метод динамического программирования . . . . . 107
3.5 Ультрадиабатический режим . . . . . 108
3.6 Адиабатический режим . . . . . 115
3.6.1 Аналитическое решение . . . . . 115
3.6.2 Взаимосвязь с задачей оптимального управления с варьируемыми наблюдаемыми . . . . . 120
3.6.3 Задача на максимин . . . . . 122
3.7 Приближённое выражение для вероятности перехода в ультрадиабатическом режиме . . . . . 124
3.8 Приближённое выражение для элементов унитарной матрицы в адиабатическом режиме . . . . . 128
3.9 Итог главы . . . . . 130

**ГЛАВА 4 Микроскопические решения кинетического уравнения Больцмана–Энскога** 132
4.1 Уравнение Больцмана–Энскога . . . . . 132
4.2 Микроскопические решения . . . . . 134
4.3 Эвристическое доказательство существования микроскопических решений . . . . . 138

4.4 Микроскопические решения как предел сумм дельта-образных семейств гладких функций . . . . . 146
4.5 Микроскопические решения как мерозначные решения уравнения Больцмана–Энскога . . . . . 156
4.5.1 Деревья истории столкновений . . . . . 157
4.5.2 Поток Больцмана–Энскога . . . . . 159
4.5.3 Мерозначные микроскопические решения . . . . . 160

**ГЛАВА 5 Вычисление квантовых когерентностей в теориях переноса энергии возбуждённого состояния** 164
5.1 Предварительные замечания . . . . . 164
5.2 Теоретические основы . . . . . 166
5.2.1 Гамильтониан . . . . . 166
5.2.2 Общий вид кинетического уравнения . . . . . 171
5.2.3 Теория Фёрстера . . . . . 177
5.2.4 Модифицированная теория Редфилда . . . . . 178
5.2.5 Об области применимости теории возмущений. Связь с концепцией слабого предела . . . . . 179
5.3 Динамика когерентностей . . . . . 181
5.3.1 Случай равновесного начального состояния резервуара . . . . . 181
5.3.2 Случай неравновесного начального состояния резервуара . . . . . 184
5.3.3 Случай начальных когерентностей в системе . . . . . 187
5.4 Вычисления . . . . . 193
5.4.1 Теория Фёрстера . . . . . 195
5.4.2 Модифицированная теория Редфилда . . . . . 199
5.4.3 Динамика на больших временах . . . . . 202
5.4.4 Трёхмерная система . . . . . 203
5.5 Обсуждение . . . . . 206
5.5.1 Свойства динамического отображения . . . . . 206
5.5.2 О взаимосвязи между населённостями и когерентностями в механизме переноса энергии возбуждения . . . . . 210

5.5.3 Аналитические оценки когерентностей и область применимости теории Фёрстера . . . 211
5.6 Итог главы . . . 217

**ГЛАВА 6 Предельная скорость генерации секретного ключа в протоколе квантовой криптографии BB84 при несовпадающих эффективностях детекторов** 219
6.1 Предварительные замечания . . . 219
6.2 Протокол BB84 при несовпадающих эффективностях детекторов . . . 222
6.3 Эквивалентная формулировка протокола BB84 в терминах сцепленных состояний . . . 230
6.4 Скорость генерации секретного ключа . . . 232
6.5 Теорема о предельной скорости генерации секретного ключа . . . 241
6.6 Доказательство теоремы о предельной скорости генерации . . . 247
6.7 Утечка информации при исправлении ошибок в случае различных эффективностей детекторов . . . 254
6.8 Метод обманных состояний при несовпадающих эффективностях детекторов . . . 255
6.8.1 Общее описание метода . . . 255
6.8.2 Получение оценок по методу обманных состояний . . . 260
6.8.3 Достижимая скорость генерации секретного ключа в протоколе с обманными состояниями . . . 264
6.8.4 О предположениях метода обманных состояний . . . 267
6.8.5 Универсальность метода обманных состояний . . . 268
6.8.6 Вычисление скорости генерации для реалистичных значений параметров . . . 271

**Заключение** 275
**Список публикаций автора** . . . 277
**Список литературы** . . . 279

# ВВЕДЕНИЕ

**Актуальность и степень разработанности темы исследования**

1. Изучение необратимой динамики имеет давнюю историю. Одним из простейших и, возможно, исторически первых примеров необратимой динамической системы можно считать уравнение движения Ньютона в присутствии силы трения. Другой пример необратимой динамики предоставляет гидродинамика, а именно, уравнение Навье–Стокса движения вязкой жидкости. В термодинамике представление о необратимых процессах восходит к работам Р. Клаузиуса, который ввёл понятие энтропии для количественной характеристики степени необратимости динамики. Теория необратимых процессов в классической термодинамике и статистической физике получила развитие в работах Дж. Максвелла, Л. Больцмана, Дж. Гиббса, А. Пуанкаре, Л. Онсагера, И.Р. Пригожина, А.Н. Колмогорова, А.Я. Хинчина, Д.Н. Зубарева и других. В частности, для настоящей работы важно упомянуть кинетическое уравнение Больцмана, описывающее необратимое поведение газа в терминах функции плотности распределения частиц в фазовом пространстве.

Исследование необратимых процессов в квантовой механике восходит к работам В. Паули, Л.Д. Ландау, Дж. фон Неймана. Для описания необратимой квантовой динамики часто прибегают к формализму открытых квантовых систем. В соответствии с постулатами квантовой механики динамика изолированной квантовой системы унитарна и, следовательно, обратима. Однако изолированная система является абстракцией: реальные системы всегда взаимодействуют с окружением, или резервуаром. Динамика системы и резервуара вместе, будучи унитарной, также обратима. Однако в определённых предельных случаях удаётся строго вывести необратимые уравнения динамики для состояния системы (оператора плотности, т.е. неотрицательно определённого оператора с единичным следом в соответствующем гильбертовом пространстве) — так называемые квантовые кинетические уравнения (“quantum master equations”). Общий вид генератора так называемой квантовой динамической полугруппы (в конеч-

номерном случае и, более общо, в случае ограниченного генератора) выведен в работах В. Горини (V. Gorini), А. Коссаковски (A. Kossakowski) и Э. Сударшана (E. Sudarshan) [178] и независимо от них — Г. Линдблада (G. Lindblad) [225]. Поэтому квантовое кинетическое уравнение, в правой части которого стоит данный генератор, называется уравнением Горини–Коссаковски–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ). Это уравнение играет фундаментальную роль в теории открытых квантовых систем. Математически строгий вывод уравнения вида ГКСЛ в пределе слабой связи системы с резервуаром осуществлён Э. Дэвисом (E. Davies) [144], в пределе низкой плотности частиц резервуара — Р. Дюмке (R. Dümke) [152]. Также уравнение вида ГКСЛ можно получить в пределе повторяющихся взаимодействий, когда резервуар состоит из бесконечного числа подсистем малой размерности, по очереди взаимодействующих с системой [107, 110, 202, 227]. По крайней мере для некоторых частных случаев этот предел приводит к тому же уравнению, что и предел низкой плотности [285], поэтому, возможно, этот предел есть более простой («полуклассический») вариант последнего.

Позже в работах Л. Аккарди (L. Accardi), И.В. Воловича, С.В. Козырева, Ю.Г. Лю (Y.G. Lu), А.Н. Печеня и других был разработан более общий подход к динамике открытых квантовых систем и, следовательно, к необратимой квантовой динамике — теория стохастического предела квантовой теории [88–91]. Эта теория позволяет в тех же предельных режимах (слабой связи и низкой плотности) вывести квантовые стохастические дифференциальные уравнения. Этот подход является более общим в том смысле, что эти уравнения описывают динамику не только состояния системы, но и некоторых наблюдаемых резервуара и некоторых совместных наблюдаемых системы и резервуара. Кинетическое уравнение вида ГКСЛ для оператора плотности системы выводится из них в качестве следствия.

Обычно факт необратимости динамики, описываемой кинетическим уравнением, выражается в виде той или иной $H$-теоремы, т.е. утверждения о невозрастании некоторого функционала ($H$-функции, в некоторых случаях является функцией Ляпунова). В частности, для упомянутого выше кинетического урав-

нения Больцмана роль $H$-функции играет величина энтропии, взятая со знаком «минус», введённая самим Больцманом [21].

Однако для уравнения ГКСЛ энтропия фон Неймана (энтропия квантовой системы) не является подходящим функционалом, поскольку в общем случае энтропия на решениях уравнения ГКСЛ может и убывать. В общем случае не возрастает так называемая квантовая относительная энтропия между двумя произвольными решениями уравнения ГКСЛ, что было показано Линдбладом [224]. Это считается аналогом $H$-теоремы для уравнения ГКСЛ [95]. В качестве одного из этих двух решений можно взять стационарное состояние. Если оно является гиббсовским, то производная от квантовой относительной энтропии между произвольным состоянием и стационарным гиббсовским состоянием, взятая с обратным знаком, соответствует производству энтропии [290, 292]. Понятие производства энтропии широко используется в неравновесной термодинамике и статистической механике [38, 67]. В данном случае оно представляет собой сумму приращения энтропии системы и потока энтропии из системы в резервуар. Таким образом, энтропия системы в общем случае может убывать за счёт «экспорта» энтропии в резервуар, но производство энтропии неотрицательно.

Работы последнего времени посвящены определению производства энтропии и исследованию его свойств для более общих, неравновесных случаев, когда гиббсовское состояние не является стационарным. В частности, в работах [187, 188] с помощью формализма квантовых стохастических траекторий предлагается общее определение производства энтропии для решений уравнения ГКСЛ определённого класса, а также разложение производства энтропии на адиабатический и неадиабатический вклады. Соответствующее разложение для классических кинетических уравнений с дискретным множеством состояний выполнено в [157]. Замечательное свойство этого разложения заключается в том, что каждое из его слагаемых неотрицательно. В настоящей работе даётся определение производства энтропии открытой квантовой системой, адиабатического и неадиабатического вкладов в него и доказывается неотрицательность всех этих величин без обращения к формализму квантовых стохастических тра-

екторий, для существенно более широкого класса уравнений ГКСЛ.

В работе [160] вводится понятие производства энтропии для неравновесного стационарного состояния. В работе [238] изучаются флуктуации производства энтропии для неравновесного стационарного состояния. В данной работе нас будет интересовать величина производства энтропии, определённая для произвольных состояний, не только стационарных.

Изучение производства энтропии важно для квантовой термодинамики. Но в настоящей работе сделан уклон на математическое значение функционала производства энтропии — нахождение с его помощью стационарных решений уравнения ГКСЛ. Как и для других уравнений движения, нахождение всех стационарных решений (стационарных состояний) — одна из важнейших задач для уравнения ГКСЛ. Известно, что если уравнение ГКСЛ получено в пределе слабой связи, спектр оператора Гамильтона системы дискретен и находится в общем положении (не имеет вырожденных собственных значений и вырожденных разностей собственных значений), то стационарное состояние единственно. Если резервуар находится в тепловом равновесии при некоторой температуре, то стационарное состояние системы также равновесное: гиббсовское с той же самой температурой [88, 89, 292].

Однако системы с вырожденными уровнями энергии (собственными значениями гамильтониана) или их разностями также представляют интерес. В этом случае возникают нетривиальные эффекты, важные в том числе и для практики, такие как, например, «запирание» квантовых когерентностей [87], сверхперенос энергии [6, 31] и другие. Общая структура стационарных решений уравнения ГКСЛ активно изучается на протяжении нескольких десятков лет, с того времени как это уравнение появилось, см., например, [44,86,92,93,99,112,122,165,290]. Однако информация об общей структуре не всегда позволяет найти всё множество стационарных решений для конкретного уравнения.

Также для квантовой термодинамики важны системы, взаимодействующие с несколькими резервуарами, находящимися при различных температурах. В этом случае аналитическое нахождение стационарных состояний даже в простых слу-

чаях и даже когда из общей теории следует, что стационарное состояние единственно, часто представляет трудности. Например, до сих пор не был известен общий аналитический вид стационарного состояния двух взаимодействующих двухуровневых квантовых систем, одна из которых взаимодействует с «горячим» резервуаром, а другая — с «холодным». Известен был лишь ответ для частного случая [237].

Одним из методов нахождения стационарных состояний кинетических уравнений, восходящий к Больцману, является исследование $H$-функции этого уравнения. $H$-функция для уравнения Больцмана позволила последнему доказать сходимость решений этого уравнения к распределению Максвелла. Впрочем, строго этот факт был доказан только сравнительно недавно С. Виллани (C. Villani) [306].

Изучение открытых квантовых систем важно в том числе в связи с развитием квантовых технологий. Наибольший интерес представляет перспектива создания квантового компьютера, который бы позволил эффективно решать некоторые задачи, не решаемые эффективно (за приемлемое время) на обычных (классических) компьютерах [13, 15, 16, 60]. В частности, Нобелевская премия по физике 2012 г. была присуждена С. Арошу (S. Haroche) и Д. Вайнленду (D. Weinland) «за создание прорывных технологий манипулирования квантовыми системами, которые сделали возможными измерение отдельных квантовых систем и управление ими».

2. Квантовая система, взаимодействующая с резервуаром — не единственная модель необратимой квантовой динамики. В настоящее время в работах В.В. Козлова, Д.В. Трещёва, О.Г. Смолянова и других развивается подход (восходящий к Пуанкаре [68]), связанный с так называемым слабым пределом [2, 25, 27, 28, 41, 45–51, 61]. В этом подходе рассматриваются обратимые уравнения динамики для функции плотности вероятности нахождения механической системы в заданной точке фазового пространства. Для классической механики рассматривается уравнение Лиувилля, для квантовой — например, уравнение для функции Вигнера (функция квазираспределения вероятностей координаты и

импульса), которое эквивалентно уравнению Шрёдингера. Поскольку динамика обратима, то энтропия системы не меняется. Поточечного предела при больших временах для рассматриваемых решений не существует вследствие теоремы Пуанкаре о возвращении (рассматриваются системы в ограниченном пространстве) и её обобщению на квантовый случай [120]. Однако удаётся доказать предел в слабом, интегральном смысле. При этом предельное распределение обладает большей энтропией, нежели начальное. Физический смысл слабого предела состоит в том, что разрешающая способность любого прибора конечна, и потому прибор всегда выполняет некоторое усреднение.

Отметим, что для установления вида предельного распределения в работах [2, 25, 27, 28] также используется $H$-функция. А именно, в этих работах в различных постановках были доказаны теоремы следующего вида: среднее по Чезаро решения уравнения движения совпадает с экстремалью Больцмана, т.е. с распределением, максимизирующим $H$-функцию.

К теории слабого предела примыкает также так называемая функциональная механика, предложенная И.В. Воловичем [30, 307], в которой для решения проблемы необратимости (согласование обратимых по времени уравнений микроскопической динамики с необратимой динамикой макросостояния физической системы, состоящей из большого числа частиц) предлагается взять в качестве основного уравнения классической механики не уравнения Ньютона или Гамильтона, а уравнение Лиувилля или Фоккера–Планка–Колмогорова. Тогда слабый предел для решений уравнений Лиувилля и увеличение энтропии предельного распределения некоторым образом примиряет формальную обратимость уравнения Лиувилля с необратимой динамикой макросостояния системы большого числа частиц.

Простейшая модель в этих рассмотрениях — это модель бесстолкновительной сплошной среды в прямоугольном ящике, которая сводится к свободному движению на плоском торе. Если для классической динамики удаётся доказать существование слабого предела (теоремы о диффузии) [45, 46], то непосредственное обобщение этих результатов на квантовый случай наталкивается на

трудности, что отмечается в [47]. Эти трудности связаны с тем, что свободная квантовая динамика в ограниченном пространстве или на компактном многообразии является почти периодической, что связано с интерференцией волн, движущихся с разными скоростями. Указанные интерференции проявляют себя на временах за пределами так называемого времени Эренфеста, когда квантовая динамика волновых функций (квадратично интегрируемых функций на торе), изначально локализованных и в координатном, и в импульсном пространствах (такие волновые функции называются когерентными состояниями), начинает отклоняться от классической.

Квантовая динамика за пределами времени Эренфеста [117,282,283,301,311] представляет интерес сама по себе и активно изучается в настоящее время в математической физике. Один из подходов здесь связан с исследованием квазиклассических мер — квазиклассического предела мер Вигнера или (эквивалентно) мер Хусими [96–98,130,170,199,233,234,239]. Поэтому результаты соответствующей части данной работы интересны не только в связи с исследованиями необратимой динамики и слабого предела, но и в связи с изучением квантовой динамики за пределами времени Эренфеста и с теорией квазиклассических мер. Более подробно обзор состояния этих направлений исследований дан в начале главы 2.

Важно отметить, что концепция слабого предела имеет прямое отношение и к необратимой динамике открытых квантовых систем, хотя эта связь и не отмечалась ранее. Как говорилось выше, в теории открытых квантовых систем совместная динамика системы и резервуара унитарна и, следовательно, обратима. Необратимость при выводе уравнения ГКСЛ из совместной динамики системы и резервуара возникает в специальном пределе, в котором малый параметр (например, сила взаимодействия системы с резервуаром или плотность частиц резервуара) стремится к нулю, а время — к бесконечности. Взаимодействие с системой вызывает отклонение состояния резервуара от равновесия. Однако за бесконечно большое время резервуар необратимо приходит обратно к равновесию, тогда как состояние системы вследствие, например, слабой связи с резервуаром за то

же время почти не меняется. То есть такой предел обеспечивает существование двух масштабов времени: времени релаксации резервуара к равновесию и времени изменения состояния системы. Состояние системы меняется бесконечно медленно по сравнению с релаксацией резервуара. Можно сказать и наоборот: релаксация резервуара бесконечно быстра по сравнению с эволюцией состояния системы. Необратимость в уравнениях появляется именно в тот момент, когда мы считаем, что состояние резервуара стремится к равновесному на больших временах. Поскольку динамика унитарна, указанный предел может иметь место именно в некотором слабом смысле. Это не обсуждалось в работах по открытым квантовым системам, однако такое рассмотрение, по-видимому, необходимо для ответа на вопрос, применима ли та или иная теория (слабой связи, низкой плотности) в конкретной физической ситуации. Поэтому необходимо дальнейшее изучение слабого предела для квантовых систем и его связи с необратимой динамикой открытых квантовых систем.

3. Особым видом квантового необратимого процесса является квантовое измерение. В результате взаимодействия с измерительным прибором система необратимо меняет своё состояние, даже если результат измерения не считывается наблюдателем (такое измерение называется неселективным). В известном курсе теоретической физики Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица выделяется именно роль квантового измерения в появлении необратимости в квантовых явлениях, т.е. различия между прошлым и будущим [52]. С точки зрения теории открытых квантовых систем измерительный прибор представляет собой резервуар особого вида. Теория квантовых измерений восходит к работам фон Неймана [74] и развивалась затем во многих исследованиях.

В настоящее время квантовые измерения рассматриваются как одно из средств управления квантовыми системами, чему и посвящена одна из глав настоящей работы. Метод квантового управления посредством неселективных измерений был предложен и теоретически развит в работах [65, 264, 287, 288]. Поскольку при неселективном измерении не происходит считывания результата наблюдателем, оно не увеличивает его знание о состоянии системы и не ис-

пользуется для корректировки дальнейшего управления (обратной связи), а используется только как заранее заданное воздействие на систему, мгновенный «толчок», разрушающий квантовую когерентность. Квантовое управление с селективными измерениями и обратной связью, т.е. в котором управление зависит от результатов измерений, также изучается [9, 106, 167] и реализовано экспериментально [119].

В настоящей работе рассматривается квантовое управление посредством измерений в системе Ландау–Зинера. Система Ландау–Зинера [215, 235, 294, 322] представляет собой простую (но фундаментальную) модель неадиабатического перехода в двухуровневой системе с переменным гамильтонианом и так называемым квазипересечением уровней энергии. С математической точки зрения речь идёт об определённой системе из двух линейных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами. Эта модель фундаментальна, поскольку является базовой для описания многих явлений в физике, химии и биохимии, см. обзор [66]. Перечислим некоторые её приложения: описание переноса заряда [212, 241] (в том числе в фотосинтетических системах [312], о которых пойдёт речь ниже), химических реакций [252, 326], управления кубитами в процессе квантовых вычислений. Последнее приложение включает использование интерферометрии Ландау–Зинера–Штюкельберга (которое основано на многократном прохождении квазипересечения уровней энергии) [129,259], функциональную вариацию зависимых от времени параметров гамильтониана [8, 111, 128, 184, 263] и подключение системы Ландау–Зинера к внешнему резервуару [151, 297, 309, 314].

Управление в системе Ландау–Зинера посредством неселективных измерений изучалось в работах [264, 288]. А именно, в этих работах изучалась задача выбора оптимальных наблюдаемых. В данной диссертационной работе будет рассмотрена другая задача: задача выбора оптимальных моментов измерений фиксированной наблюдаемой. Эта задача накладывает бóльшие ограничения: как мы выясним, если наблюдаемые выбираются произвольно, то ограничение на моменты времени несущественно. Поэтому можно сказать, что в предыду-

щей постановке задачи можно выбирать произвольно как наблюдаемые, так и моменты измерений, а в постановке, которая будет рассматриваться в данной работе, можно выбирать только моменты измерений. Преимущество этой постановки заключается в простоте её реализации: на практике моменты измерений варьировать проще, чем наблюдаемую.

Бесконечно частые повторения одного и того же измерения над системой приводят, как известно, к так называемому квантовому эффекту Зенона, когда система «замораживается» в своём начальном состоянии и динамики не происходит [76–78, 244]. Для системы Ландау–Зинера это означает, что система остаётся в том же самом так называемом диабатическом состоянии, но переходит (с вероятностью единица) на другой адиабатический уровень энергии.

Однако бесконечно частые измерения — это математическая абстракция, на практике же можно осуществить только конечное число измерений (или же приближаться к квантовому эффекту Зенона иначе, например, путём рассмотрения не мгновенных, а непрерывных измерений [10]). Поэтому возникает естественный вопрос об оптимальном приближении к квантовому эффекту Зенона при конечном числе измерений, т.е. о нахождении оптимальных моментов этих измерений. Приближение к квантовому эффекту Зенона через конечное число измерений рассматривалось в [127, 140, 194, 213, 214], но задача оптимизации моментов времени в них не рассматривалась. В работах [139, 250, 251, 318] показано, что повторяющиеся измерения можно использовать для создания чистых квантовых состояний и сцепленных (“entangled”, другие распространённые переводы на русский язык — «зацепленных», «запутанных») квантовых состояний, играющих важнейшую роль в квантовой информатике.

Отметим, что существует обобщение квантового эффекта Зенона, когда при бесконечно частых измерениях состояние системы проецируется не на начальное состояние, а на многомерное подпространство, включающее начальное состояние. В этом случае динамика происходит в рамках этого подпространства. Такая динамика называется квантовой динамикой Зенона [158, 159].

Квантовое управление посредством измерений является частью ещё одной

активно развивающейся области в современной математической физике — теории оптимального управления квантовыми системами, которую также можно считать и разделом общей математической теории оптимального управления [4]. Квантовая теория управления широко применяется в физике, химии и квантовых технологиях [23, 75, 142, 220, 316]. Много исследований посвящено разработке эффективных методов нахождения оптимальных управлений квантовыми системами [8, 128, 166, 183, 232, 321].

4. Замечательным свойством некоторых классических кинетических уравнений, описывающих необратимую динамику, является то, что для них существуют так называемые микроскопические решения в виде суммы дельта-функций, соответствующие обратимой динамике микроскопических частиц. Точки, входящие в носитель таких сингулярных распределений соответствуют частицам. Термин «микроскопические решения» предложен Н.Н. Боголюбовым. Более распространённое название таких решений — «решения в виде эмпирических мер» [206, 207, 269, 271]. К таким уравнениям относятся уравнение Власова (что показано самим А.А. Власовым [29], см. также [26]), а также, как показано Н.Н. Боголюбовым [17, 19], уравнение Больцмана–Энскога. Последнее представляет собой уточнённую версию уравнения Больцмана для газа из твёрдых шаров.

Таким образом, кинетическое уравнение Больцмана–Энскога, в общем случае описывающие необратимую динамику газа в терминах макроскопической функции распределения, в некотором смысле содержит в себе и обратимую динамику частиц. Также можно сделать вывод о том, что обратимость или необратимость динамики, порождаемой этим уравнением, зависит от рассматриваемого класса решений: динамика необратима, если рассматриваются решения в виде регулярных распределений, и обратима, если рассматриваются решения в виде сингулярных распределений. Аналогичный эффект мы наблюдаем и теории слабого предела, где регулярность начального распределения также важна для получения предельного распределения в слабом смысле при больших временах. К сожалению, доказательство Н.Н. Боголюбова наличия у уравнения Больцмана–Энскога микроскопических решений выполнено лишь на «физическом» уровне строго-

сти. Строгое доказательство наталкивается на трудности ввиду возникновения произведений дельта-функций.

Вывод уравнений типа Больцмана, а также кинетических уравнений более общего вида через рассмотрение предела большого числа частиц и соответствующих эмпирических мер, подчиняющихся (изначально необратимой) стохастической марковской динамике, рассматривался в [206, 207].

5. Выше упоминалось, что математически строгий вывод квантовых кинетических уравнений вида ГКСЛ для открытой квантовой системы осуществлён для пределов слабой связи системы с резервуаром, низкой плотности частиц резервуара и повторяющихся взаимодействий. Однако при изучении открытых квантовых систем интересны и другие предельные режимы. Так, например, в теории переноса энергии возбуждённого состояния в молекулярных системах широко используются теория Фёрстера и модифицированная теория Редфилда.

Можно положить малой силу взаимодействия различных подсистем системы между собой и рассмотреть соответствующую теорию возмущений. Применительно к теории переноса энергии возбуждения это будет означать малость дипольных взаимодействий между молекулами в молекулярной системе. Тогда мы получим теорию Фёрстера переноса энергии [163, 164].

Далее, в отличие от обычного предела слабой связи системы с резервуаром, называемого в физической литературе теорией Редфилда [273], в модифицированной теории Редфилда [319, 323] предполагается, что только внедиагональная часть гамильтониана взаимодействия системы с резервуаром является малым возмущением (а не весь гамильтониан взаимодействия, как в обычном режиме слабой связи). Здесь речь идёт о внедиагональных элементах в базисе из собственных векторов гамильтониана системы. Иными словами, в модифицированной теории Редфилда предполагается, что резервуар слабо воздействует на переходы между собственными состояниями, но скорость декогеренции между различными собственными состояниями, вообще говоря, немала.

Все три теории (Редфилда, Фёрстера и модифицированная теория Редфилда) широко используются для описания переноса энергии возбуждения. В ра-

боте [284] подчёркивается, что, несмотря на разработку более совершенных (но вычислительно более сложных) теоретических методов (например, связанных с включением выделенных вибрационных мод в состав системы [256, 265]) и немарковских квантовых кинетических уравнений, эти три теории в обозримом будущем продолжат играть важную роль в описании переноса энергии возбуждения.

К сожалению, в отличие от стандартной теории Редфилда, теория Фёрстера и модифицированная теория Редфилда в настоящем виде не позволяют получить полный оператор плотности системы, а лишь только его диагональную часть в определённом базисе. В физической литературе диагональные матричные элементы оператора плотности называются «населённостями», потому что соответствуют вероятностям нахождения системы на определённых энергетических уровнях, или, иными словами, населённостям этих уровней. Внедиагональные элементы называются «когерентностями», поскольку отвечают за собственно квантовые эффекты. Внедиагональные элементы оператора плотности — это то, что отличает квантовую вероятностную модель от классической [82].

Невозможность определить внедиагональные элементы оператора плотности (когерентности) — это серьёзное ограничение указанных двух теорий [192, 255, 284, 305, 319]. В известной статье [319] подчёркивается, что динамики диагональных элементов недостаточно для описания оптических экспериментов и что необходимы внедиагональные элементы, т.е. весь оператор плотности.

Определённый прогресс в направлении описания динамики когерентностей в рамках модифицированной теории Редфилда был предложен в [190]. Феноменологический вывод, предложенный в этой работе, приводит к экспоненциальному убыванию когерентностей до нуля. В некоторых случаях этот подход даёт приемлемые результаты. Однако, как уже сказано, он феноменологический. А именно, он пренебрегает «накачкой» когерентностей от населённостей, которая в некоторых случаях существенна. В ряде случаев это приводит к переоценке скорости декогеренции, что отмечено в [253].

Отметим, что в последние годы квантовая теория переноса энергии возбуж-

дения вызывает особый интерес в связи с исследованиями этих процессов в биологических системах. А именно, речь идёт о светособирающих пигмент-белковых комплексах в фотосинтетических системах растений и некоторых бактерий [245]. Эти комплексы отвечают за поглощение света и перенос энергии возбуждения в фотосинтетические реакционные центры. Перенос энергии в светособирающих комплексах протекает очень эффективно: более 95% поглощённых квантов энергии переносятся в реакционные центры. Первые экспериментальные свидетельства возможной роли квантовых эффектов в этом процессе [137, 156] вызвали огромный интерес к этой тематике со стороны и экспериментаторов, и теоретиков, см. обзор [196]. Для математической физики задача заключается в разработке математического описания динамики этих процессов и в исследовании свойств решений соответствующих уравнений. С точки зрения теории открытых квантовых систем электронные степени свободы молекул составляют интересующую нас конечномерную «систему», а колебательные степени свободы ядер составляют «резервуар».

6. Необратимые преобразования квантовых состояний часто рассматриваются в квантовой теории информации (одном из разделов современной математической физики). Так, например, квантовые коды, исправляющие ошибки, призваны обеспечить возможность квантовых вычислений (с физической точки зрения — динамики специального вида), устойчивых к воздействию окружения и, как следствие, необратимому рассеянию квантовой информации. С другим примером необратимого рассеяния квантовой информации в окружение мы сталкиваемся в квантовых коммуникациях и, более конкретно, в квантовой криптографии.

Задачей квантовой криптографии является обеспечение безопасности информации при помощи свойств материи на квантовом уровне [174, 280, 308]. Задача теоретической квантовой криптографии заключается в математическом доказательстве надёжности протоколов (алгоритмов) квантовой криптографии. Теоретическая квантовая криптография — один из разделов квантовой теории информации и, соответственно, современной математической физики [60, 83, 258, 308].

К математической физике она также примыкает и по используемым методам (которые имеют мало общего с обычной, классической криптографией).

Наиболее развитый раздел квантовой криптографии носит название квантового распределения ключей, поэтому эти два понятия часто употребляются как синонимы. Квантовое распределение ключей позволяет двум сторонам, соединённых квантовым каналом, сгенерировать общий секретный ключ, то есть общую строку из двоичных символов (0 и 1), неизвестную никому более. Особенность квантовой криптографии заключается в том, что стойкость обеспечивается даже тогда, когда противник обладает неограниченными вычислительными возможностями.

Концепция квантового распределения ключей была предложена в 1984 г. Ч. Беннеттом (C. Bennett) и Ж. Брассаром (G. Brassard) [116], которые разработали протокол, названный впоследствии BB84. Вскоре после этого последовали первые экспериментальные реализации этого протокола. В настоящее время реализованы коммерческие системы квантовой криптографии на основе протокола BB84. Разработки систем квантовой криптографии проводятся во многих странах (в том числе и в России), а также целым рядом крупных корпораций. Несмотря на то что предложено множество протоколов квантового распределения ключей, BB84 остаётся наиболее распространённым.

Первое полное математическое доказательство стойкости протокола BB84 было получено в работе Д. Майерса (D. Mayers) в 1996 г. [242] (журнальная версия работы вышла в 2001 г., но препринт был опубликован в 1996 г.). Далее последовали другие доказательства, например, [286]. Общая математическая теория квантового распределения ключей, основанная на теории информации и энтропийных характеристиках, построена Р. Реннером (R. Renner) [274] и затем развита в последующих работах, среди которых выделим [299, 300].

Упомянутые доказательства стойкости протоколов квантовой криптографии предполагают идеальную физическую аппаратуру. Одна из задач, стоящих перед теоретической квантовой криптографией сегодня, — это доказательство стойкости протоколов квантовой криптографии при неидеальной аппаратуре и полу-

чение соответствующих оценок достижимых скоростей генерации секретного ключа. Один из примеров такой неидеальности — это несовпадение квантовых эффективностей однофотонных детекторов, т.е. вероятностей регистрации фотона. Упомянутые выше доказательства неприменимы в этом случае. В работе [168] впервые доказана стойкость BB84 при различных эффективностях детекторов, но полученные оценки достижимых скоростей достаточно грубы, т.е. существенно ниже предельной скорости генерации, что отмечают и сами авторы работы. В работе [317] предложен численный подход к определению предельно достижимой скорости генерации ключа и, среди прочего, рассмотрен случай различных эффективностей детекторов. Однако аналитическая формула предельной скорости генерации секретного ключа для этого случая неизвестна.

Мы начали с того, что система квантовой криптографии может быть представлена как своеобразная открытая квантовая система, взаимодействующая с окружением. Роль системы здесь исполняет квантовый носитель информации, пересылаемый по каналу связи. Роль окружения играет противник, который взаимодействует с этим носителем, пытаясь считать эту информацию. С точки зрения «легитимных» отправителя и получателя этот процесс выглядит как необратимая динамика пересылаемого квантового состояния, необратимое рассеяние квантовой информации в окружение.

Тематику квантовой криптографии с тематикой производства энтропии в открытых квантовых системах объединяет и то, что и в том, и в другом случае одну из ключевых ролей играет минимизация квантовой относительной энтропии. В открытых квантовых системах упоминавшийся выше неадиабатический вклад в производство энтропии выражается в монотонном невозрастании квантовой относительной энтропии между состоянием, зависящим от времени, и стационарным состоянием. При больших временах эта величина принимает минимально возможное значение при фиксированных линейных ограничениях (законах сохранения). В квантовой криптографии решается задача минимизации квантовой относительной энтропии между квантовым состоянием, возникающим в ходе протокола квантовой криптографии, и результатом действия на это состояние

неселективного измерения одного из регистров, также при линейных ограничениях.

Задача, решаемая в квантовом распределении ключей, также близка к задаче квантовой томографии, которая заключается в восстановлении неизвестного квантового состояния по наблюдаемым данным. Томография двухкубитных (четырёхмерных) квантовых систем (с которыми мы имеем дело при анализе протокола BB84) рассматривалась, например, в [14, 121]. Отличие задачи, возникающей в квантовом распределении ключей, заключается в том, что в ней не требуется полностью восстановить состояние, а требуется только найти минимальное значение определённой информационной характеристики (в нашем случае — квантовой относительной энтропии когерентности) на множестве состояний, не противоречащих наблюдаемым данным.

7. Необходимо упомянуть о некоторых других изучаемых в настоящее время моделях возникновения необратимости и статистического описания в квантовой динамике, которых мы не касаемся в данной работе. Множество исследований посвящено гипотезе о термализации собственных состояний [143, 149, 176, 191, 246, 293], согласно которой стремление состояния квантовой системы с большим числом частиц к равновесному объясняется свойствами собственных векторов (собственных состояний) гамильтониана. Другое важное направление исследований связано с получением оценок на среднее отклонение динамики открытой квантовой системы, взаимодействующей с резервуаром с большим, но конечным числом степеней свободы, от равновесного состояния [118]. Наконец, в работах [32, 69, 70, 279] описывается возникновение необратимой квантовой динамики (в частности, переход чистых состояний в смешанные, с большей энтропией) в системах с симметричными гамильтонианами, не имеющими самосопряжённых расширений. Динамика в этом случае определяется через введение регуляризации и переход к пределу, для состояний на $C^*$-алгебре.

8. В заключение этого обзора коротко скажем про опубликованные результаты автора данной диссертационной работы, не вошедшие в неё. В работе [302] выводятся поправки произвольных порядков (по константе взаимодействия си-

стемы с резервуаром) к квантовому кинетическому уравнению вида ГКСЛ для режима слабой связи, когда спектральная плотность имеет специальный вид (Друде–Лоренца). Это позволяет воспользоваться точной цепочкой уравнений движения (“hierarchical equations of motion — HEOM”) [193] для получения поправок произвольных порядков.

Работы [73, 304] посвящены изучению возможностей использования псевдослучайных последовательностей в квантовой криптографии. В частности, в [304] предлагается протокол квантовой криптографии, стойкость которого основана, помимо квантового принципа дополнительности, на известном в теории чисел свойстве, что распределение комбинаций квадратичных вычетов и невычетов в натуральном ряде близко к равномерному [3, 57, 58].

В работе [303] выводятся статистические оценки в рамках так называемого метода обманных состояний (состояний-ловушек) в квантовой криптографии (о котором будет рассказано в главе 6), учитывающие статистические флуктуации, на основе центральной предельной теоремы, обосновывается способ учёта доверительной вероятности в общем параметре степени секретности генерируемого ключа. Формулы, выведенные в этой работе, воплощены на практике в установках квантового распределения ключей Российского квантового центра [43, 278], в том числе в квантовой линии связи, соединившей два офиса Сбербанка [153].

Наконец, в статье [55] предлагается квантовый аналог метода ветвей и границ (известного метода решения задач комбинаторной оптимизации) и исследуются его возможности на примере задачи коммивояжёра.

**Цели и задачи.** Цель работы состоит в углублении понимания необратимой динамики квантовых систем и её соотношения с обратимой динамикой. Для осуществления этой цели ниже сформулированы задачи, связанные с различными моделями необратимой динамики: с динамикой открытых квантовых систем, слабым пределом и квазиклассическими мерами, необратимой динамикой под воздействием квантовых измерений, существованием обратимых микроскопических решений кинетических уравнений и, наконец, с необратимой динамикой квантовой информации на примере квантовой криптографии.

1. Построить функционал производства энтропии, являющийся неотрицательным для как можно более широкого класса уравнений ГКСЛ, а также его разложение на слагаемые, неотрицательные по отдельности, соответствующие адиабатическому и неадиабатическому вкладам. При помощи введённого функционала разработать метод нахождения стационарных решений уравнения ГКСЛ.

2. Описать квазиклассические меры, соответствующие свободной квантовой динамике когерентных состояний на торе на различных масштабах времени. Показать, что усреднение по времени приводит к выравниванию пространственной плотности, что соответствует обобщению результатов теории слабого предела на случай квантовой динамики на торе.

3. Осуществить оптимальное приближение к квантовому эффекту Зенона для модели Ландау–Зинера посредством конечного числа повторений неселективного измерения фиксированной наблюдаемой.

4. Доказать существование микроскопических решений (решений в виде сумм дельта-функций и соответствующих микроскопической динамике частиц) кинетического уравнения Больцмана–Энскога.

5. Вывести формулы для внедиагональных элементов матрицы плотности в рамках двух теорий возмущений для динамики открытых квантовых систем: теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда, что позволит рассчитывать необратимую динамику всей матрицы плотности, а не только её диагональной части.

6. Получить выражение для предельной скорости генерации секретного ключа в протоколе квантовой криптографии BB84 в зависимости от наблюдаемых данных при детекторах с несовпадающими эффективностями.

**Научная новизна.** Ранее были известны некоторые определения функционала производства энтропии в открытых квантовых системах, динамика которых описывается уравнением ГКСЛ. Но обобщающий эти определения функционал, представленный в данной работе, определённый на языке операторов, без обращения к концепции квантовых стохастических траекторий, построен впервые.

Адиабатический и неадиабатический вклады в производство энтропии также впервые определены для квантового случая на языке операторов, без обращения к концепции квантовых стохастических траекторий. Использование этой концепции ограничивало общность определений. Впервые доказано, что адиабатический вклад в производство энтропии неотрицателен в малой окрестности стационарного состояния при тех же предположениях, при которых неотрицательно производство энтропии в целом.

Впервые показано, как функционал производства энтропии можно использовать для нахождения стационарных решений уравнения ГКСЛ для систем, взаимодействующих с несколькими резервуарами с разными температурами, т.е. для неравновесных систем.

Впервые построено полное семейство квазиклассических мер, соответствующих эволюции когерентных состояний на торе, без сглаживания по времени.

Впервые рассмотрена и решена задача оптимального приближения к квантовому эффекту Зенона в модели Ландау–Зинера посредством конечного числа неселективных измерений фиксированной наблюдаемой.

Впервые строго доказано существование микроскопических решений (имеющих вид сумм дельта-функций и соответствующих микроскопической динамике частиц) у кинетического уравнения Больцмана–Энскога.

Выражения для внедиагональных элементов матрицы плотности в теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда впервые получены в рамках строгого метода. До этого были известны только эвристические выражения для внедиагональных элементов матрицы плотности в модифицированной теории Редфилда, которые не учитывают важные эффекты и потому в некоторых случаях приводят к большим погрешностям.

Впервые доказана теорема о предельной скорости генерации секретного ключа в протоколе квантовой криптографии BB84 при детекторах с несовпадающими эффективностями. Для этого было использовано известное сведение задачи вывода формулы предельной скорости генерации к задаче минимизации квантовой относительной энтропии (выпуклой функции) при линейных ограничени-

ях. До этого данная задача минимизации решалась только численно. В данной работе впервые продемонстрировано аналитическое решение этой задачи. Это позволяет говорить о новом методе вывода формул предельных и достижимых скоростей генерации секретного ключа в квантовой криптографии.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Работа носит теоретический характер. Один из основных результатов, связанный с доказательством теоремы о предельной скорости генерации секретного ключа в системах квантовой криптографии при детекторах с несовпадающими эффективностями, имеет и практическую ценность, поскольку соответствующая формула может быть использована в практических системах квантового распределения ключей.

Результаты, связанные с построением и исследованием функционала производства энтропии для решений уравнения ГКСЛ, могут быть использованы в квантовой термодинамике при анализе эффективности квантовых тепловых машин. Разработанный метод нахождения стационарных решений уравнения ГКСЛ может быть использован при анализе так называемых подпространств, свободных от декогеренции, изучаемых в теории помехоустойчивых квантовых вычислений.

Исследование квазиклассических мер квантовой динамики, доказательство выравнивания пространственной плотности при сглаживании по времени важно как для теории квазиклассических мер, так и для теории слабого предела, который, в свою очередь, является одним из современных направлений исследований фундаментальной проблемы необратимости. Эта проблема заключается в согласовании обратимых по времени уравнений микроскопической динамики с необратимой динамикой макросостояния физической системы, состоящей из большого числа частиц.

Решение задачи выбора оптимальных моментов измерений (воздействия специального вида) на систему Ландау–Зинера можно использовать для управления квантовыми системами, что важно, в частности, для создания квантовых компьютеров.

Доказательство существования микроскопических решений уравнения

Больцмана–Энскога, т.е. доказательство того факта, что кинетическое уравнение, описывающее необратимую динамику и рост энтропии, содержит в себе также и обратимые решения, соответствующие микроскопической динамике частиц, также важно для углубления нашего понимания соотношения между обратимой и необратимой динамикой, возникновением необратимости при описании макроскопических систем.

Получение выражений для внедиагональных элементов матрицы плотности в теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда важно для более широкого применения этих теорий и более детального исследования роли квантовых эффектов в переносе энергии возбуждения в биологических системах.

**Методология и методы исследования.** Неотрицательность функционала производства энтропии, адиабатического и неадиабатического вкладов в производство энтропии доказана с помощью свойств выпуклости функций, входящих в определения этих функционалов. С помощью этих функционалов разработан метод нахождения стационарных решений уравнения ГКСЛ.

Для нахождения квазиклассических мер на торе использовались распределения Хусими (один из способов сопоставления квантовому состоянию классического распределения вероятностей на фазовом пространстве) и разложение функций Хусими в ряд Фурье по координатам и в интеграл Фурье по импульсам с последующим вычислением гауссовых интегралов.

Для решения задачи оптимального приближения к квантовому эффекту Зенона в модели Ландау–Зинера, т.е. подбора оптимальных моментов неселективных измерений, использовался метод динамического программирования и приближённые выражения для функций параболического цилиндра в различных предельных случаях.

Для доказательства существования микроскопических решений уравнения Больцмана–Энскога использовались методы теории обобщённых функций, а также регуляризации дельта-функций и интеграла столкновений.

Для вывода выражений для внедиагональных элементов матрицы плотности в теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда использовался метод

проекционных операторов Цванцига.

Для доказательства теоремы о предельной скорости генерации секретного ключа при детекторах с разными эффективностями было использовано сведение задачи нахождения предельной скорости к задаче выпуклой оптимизации — минимизации квантовой энтропии когерентности с линейными ограничениями — и аналитическое решение этой задачи. Поскольку аналитическое решение этой задачи продемонстрировано впервые, можно говорить о том, что предложен новый метод вывода формул предельных и достижимых скоростей генерации секретного ключа в квантовой криптографии.

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Для широкого класса уравнений Горини–Коссаковски–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) построен функционал производства энтропии и доказана его неотрицательность. Доказана также неотрицательность по отдельности адиабатического и неадиабатического вкладов в производство энтропии в окрестности стационарного состояния и, при определённых предположениях, для произвольных квантовых состояний.

2. Предложен метод поиска стационарных решений уравнения ГКСЛ в теории открытых квантовых систем, основанный на свойствах функционала производства энтропии. С помощью этого метода найден общий вид стационарных решений для нескольких моделей, для которых до этого общий вид стационарных решений в аналитическом виде известен не был.

3. Доказано существование обратимых по времени микроскопических решений нелинейного интегро-дифференциального кинетического уравнения Больцмана–Энскога для газа из твёрдых шаров, открытых Н.Н. Боголюбовым на физическом уровне строгости.

4. Полностью описаны квазиклассические меры, соответствующие свободной квантовой динамике когерентных состояний на торе на различных масштабах времени. Показано, что сглаживание по времени приводит к выравниванию плотности пространственного распределения.

5. Выведены формулы для внедиагональных элементов матрицы плотности

в рамках двух теорий возмущений для динамики открытых квантовых систем: теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда. Это позволяет рассчитывать динамику всей матрицы плотности, а не только её диагональной части, и потому устраняет существенное ограничение этих теорий, широко используемых в теории переноса энергии в молекулярных системах.

6. Решена задача оптимального приближения к квантовому эффекту Зенона для модели Ландау–Зинера, то есть задача выбора оптимальных моментов неселективных измерений определённой наблюдаемой при фиксированном их числе.

7. Доказана теорема о предельной скорости генерации секретного ключа в протоколе квантовой криптографии BB84 при несовпадающих эффективностях однофотонных детекторов. Предложен новый метод доказательства подобных теорем на основе аналитической минимизации квантовой относительной энтропии когерентности.

**Степень достоверности и апробация результатов.** Достоверность результатов глав 1–4 и 6 обеспечивается их строгими математическими доказательствами. Результаты главы 5 получены на «физическом» уровне строгости, их достоверность обеспечивается следованием систематическому методу (методу проекционных операторов Цванцига) и сравнением расчётов по выведенным формулам с расчётами по точному (но алгоритмически затратному и потому непригодному для больших систем) методу.

Результаты диссертации докладывались на общеинститутском семинаре «Математика и её приложения» МИАН им. В.А. Стеклова, семинаре отдела математической физики и семинаре «Квантовая вероятность, статистика и информация» МИАН им. В.А. Стеклова, семинаре «Асимптотические методы в математической физике» ИПМех им. А.Ю. Ишлинского РАН, семинаре «Дифференциальные операторы на сингулярных пространствах, алгебраически интегрируемые системы и квантование» механико-математического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, семинаре «Квантовая физика и квантовая информация» МФТИ, на Международном конгрессе по математической физике (Ольборг, Дания, 2012), на следующих международных научных конференциях: QBIC V

(международная конференция по квантовой биоинформатике и квантовым вычислениям, Токио, Япония, 2011), ICSSUR 2013 (международная конференция по сжатым состояниям и соотношениям неопределённостей, Нюрнберг, Германия, 2013), Statphys 25 (25-я международная конференция по статистической физике, Сеул, Корея, 2013), «Математическая статистическая физика» (Киото, Япония, 2013), QP 34 (международная конференция по квантовой вероятности и смежным вопросам, Москва, 2013), «Геометрия и управление» (Москва, 2014), «Случайная геометрия и физика» (Москва, 2014), «Квантовые эффекты в биологических системах» (Сингапур, 2014; Иерусалим, Израиль, 2017; Вильнюс, Литва, 2018), «Международная конференция по математической теории управления и механике» (Суздаль, 2015), ICQT 2015 (международная конференция по квантовым технологиям, Москва, 2015), «Новые направления в математической и теоретической физике» (Москва, 2016), «Декабрьские чтения» (Новосибирск, 2017), «Квантовая информация, статистика, вероятность» (Москва, 2018), «Современная математическая физика. Владимиров-95» (Москва, 2018), «Бесконечномерный анализ и математическая физика» (Москва, 2019), «Математическая физика, динамические системы, бесконечномерный анализ» (Москва, 2019), ICQT 2019 (Москва, 2019). Часть результатов была прочитана на лекции в рамках Первой научно-образовательной школы по квантовым коммуникациям (Сочи, 2019).

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 15 печатных работах в рецензируемых научных изданиях, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования Web of Science, Scopus, MathSciNet, zbMATH. В публикациях, в которых имеются соавторы, вклад автора данной диссертации — определяющий.

**Личный вклад автора.** Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены её автором лично.

**Структура, объём и содержание диссертационной работы.** Диссертация состоит из данного введения, шести глав, заключения, списка публикаций автора и списка литературы.

Глава 1 посвящена исследованию необратимой динамики открытых квантовых систем, подчиняющихся уравнению ГКСЛ. Вводится функционал производства энтропии и доказывается его положительность. Доказывается также положительность адиабатического и неадиабатического вкладов в производство энтропии в окрестности стационарного состояния и, при определённых предположениях, для произвольных квантовых состояний. Показывается, как при помощи исследования функционала производства энтропии можно находить стационарные решения уравнения ГКСЛ. Также в разделе 1.1 этой главы вводятся основные определения и обозначения для всей работы.

В главе 2 строится полное семейство квазиклассических мер, соответствующих эволюции квантовых когерентных состояний на торе на всех масштабах времени (классическое движение, расплывание пространственной плотности вероятности, дробные и полные возрождения исходного состояния). Показано, как при усреднении по времени возникает равномерное пространственное распределение.

Глава 3 посвящена оптимальному приближению к квантовому эффекту Зенона в системе Ландау–Зинера посредством неселективных измерений, т.е. задаче выбора оптимальных моментов времени неселективных измерений фиксированной наблюдаемой.

В главе 4 доказывается существование обратимых микроскопических решений уравнения Больцмана–Энскога для газа из твёрдых шаров.

Глава 5 посвящена выводу формул для внедиагональных элементов матрицы плотности в рамках двух теорий возмущений для динамики открытых квантовых систем: теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда. Вывод осуществляется на основе метода проекционных операторов Цванцига, который широко используется для вывода квантовых кинетических уравнений.

В главе 6 решается задача минимизации квантовой относительной энтропии когерентности при линейных ограничениях и тем самым доказывается теорема о предельной скорости генерации секретного ключа в протоколе квантовой криптографии BB84 при несовпадающих эффективностях детекторов. Минимизация

квантовой относительной энтропии объединяет эту главу с главой 1, где неадиабатический вклад в производство энтропии также заключается в монотонном уменьшении относительной энтропии между состоянием, зависящим от времени, и стационарным состоянием. Последний раздел главы 6 посвящён адаптации метода обманных состояний к случаю детекторов с несовпадающими эффективностями, что обобщает формулу для предельной скорости генерации на более практический случай бесконечномерного пространства передаваемых квантовых состояний.

В заключении ещё раз перечислены основные результаты диссертации, т.е. положения, выносимые на защиту, и указаны дальнейшие перспективы разработки темы. Список публикаций автора содержит 15 публикаций автора, в которых опубликованы основные результаты диссертации. Список литературы содержит 328 наименований.

**Благодарности.** Автор считает своим приятным долгом выразить глубочайшую признательность и благодарность своему учителю, члену-корреспонденту РАН, доктору физико-математических наук Игорю Васильевичу Воловичу за постоянное внимание к работе и поддержку, а также всем сотрудникам отдела математической физики МИАН им. В. А. Стеклова и участникам спецсеминара «Квантовая математическая физика», действующего в рамках Научно-образовательного центра при МИАН, за поддержку и полезные обсуждения.

# ГЛАВА 1
# ФУНКЦИОНАЛ ПРОИЗВОДСТВА ЭНТРОПИИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ГОРИНИ–КОССАКОВСКИ–СУДАРШАНА–ЛИНДБЛАДА

## 1.1 Основные определения и обозначения

Согласно постулатам квантовой механики [74, 82, 258] *квантовой системе* ставится в соответствие некоторое сепарабельное комплексное гильбертово пространство $\mathscr{H}$. Наряду с обычными математическими обозначениями элементов гильбертова пространства $\psi$, $\varphi$ и т.д. мы будем пользоваться обозначениями Дирака и обозначать векторы гильбертова пространства как $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$, $|0\rangle$, $|+\rangle$ и т.д. Скалярное произведение будем обозначать как $\langle\psi|\varphi\rangle$.

По теореме Рисса гильбертово пространство изоморфно своему двойственному пространству $\mathscr{H}^*$, т.е. пространству непрерывных линейных функционалов над $\mathscr{H}$. Через $\langle\psi|$, $\langle\varphi|$, $\langle 0|$, $\langle +|$ и т.д. будем обозначать элементы двойственного пространства $\mathscr{H}^*$, действующие по правилу

$$\langle\psi| : |\varphi\rangle \mapsto \langle\psi|\varphi\rangle$$

для любого вектора $\varphi$. Соответственно, $|\varphi\rangle\langle\psi|$ — линейный оператор, действующий по правилу

$$|\varphi\rangle\langle\psi| : \chi \mapsto |\varphi\rangle\langle\psi|\chi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle \cdot |\varphi\rangle$$

для любого вектора $\chi$. В конечномерном случае можно считать векторы $|\psi\rangle, |0\rangle \in \mathscr{H}$ векторами-столбцами, а векторы $\langle\psi|, \langle 0| \in \mathscr{H}^*$ — эрмитово сопряжёнными им векторами-строками. Если $A$ — линейный оператор, то сопряжённый оператор будем обозначать $A^\dagger$. Комплексное сопряжение числа $z \in \mathbb{C}$ будем обозначать $z^*$ или $\overline{z}$.

Квантовая система, которой соответствует двухмерное пространство $\mathbb{C}^2$, в квантовой информатике называется *квантовым битом*, или *кубитом*. Так назы-

ваемый стандартный базис в этом пространстве:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

базис Адамара: $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, $|-\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$. Состояние $|0\rangle$ может соответствовать нижнему энергетическому уровню двухуровневой системы, $|1\rangle$ — верхнему. Другая физическая реализация, которую мы будем подразумевать в главе 6 — это поляризация фотона.

Если даны две квантовые системы, которым соответствуют гильбертовы пространства $\mathscr{H}_A$ и $\mathscr{H}_B$, то составной системе соответствует тензорное произведение гильбертовых пространств $\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B$. При обозначении элементов тензорного произведения мы будем писать $|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ (где $|\psi\rangle \in \mathscr{H}_A$, $|\varphi\rangle \in \mathscr{H}_B$) или $|\psi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$, т.е. с указаниями подсистем, которым принадлежат векторы, в нижних индексах при дираковских скобках.

Для случая пары кубитов будем вместо $|0\rangle \otimes |0\rangle, |+\rangle \otimes |+\rangle \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ и т.д. иногда употреблять сокращённые обозначения $|00\rangle$, $|{+}{+}\rangle$ и т.д. Поскольку $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ изоморфно $\mathbb{C}^4$, то базис $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ можно считать и базисом $\mathbb{C}^4$.

Пространство линейных операторов над $\mathscr{H}_A$ будем обозначать $\mathscr{L}(\mathscr{H}_A)$, пространство ограниченных операторов — $\mathfrak{B}(\mathscr{H}_A)$, пространство ядерных операторов — $\mathfrak{T}(\mathscr{H}_A)$. Тождественный оператор будем обозначать $I$. Часто, чтобы обозначить, в каком именно пространстве действует этот оператор, будем добавлять нижний индекс в виде буквенного индекса пространства (например, $I_A$ для пространства $\mathscr{H}_A$) или, в конечномерном случае, размерности пространства ($I_n$ для пространства $\mathbb{C}^n$). Тождественное отображение в пространстве операторов в $\mathscr{H}_A$ будем обозначать $\mathrm{Id}_A$ или, соответственно, $\mathrm{Id}_n$. Т.е. $I_A \colon \mathscr{H}_A \to \mathscr{H}_A$, $\mathrm{Id}_A \colon \mathscr{L}(\mathscr{H}_A) \to \mathscr{L}(\mathscr{H}_A)$.

*Состояние* квантовой системы задаётся ядерным самосопряжённым оператором $\rho$ в соответствующем гильбертовом пространстве, который удовлетворяет следующим свойствам: $\rho \geqslant 0$ в смысле $\langle\psi|\rho|\psi\rangle \geqslant 0$ для любого вектора $\psi$ и $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$, где $\mathrm{Tr}$ — след оператора. Первое свойство в квантовой математиче-

ской физике принято называть положительностью, хотя в общепринятой математической терминологии это свойство правильнее назвать неотрицательностью или неотрицательной определённостью. Этот оператор также называется *оператором плотности* или, когда подразумевается матричное представление этого оператора в каком-либо базисе, *матрицей плотности*. Множество операторов плотности в гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$ будем обозначать $\mathfrak{S}(\mathscr{H})$.

Если $\rho$ — проектор на некоторый единичный вектор $|\psi\rangle$, то есть $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, то состояние $\rho$ называется *чистым*, в противном случае — *смешанным*. Иногда говорят о чистых состояниях как о векторах: «состояние $|\psi\rangle$».

Отметим, что операцию взятия следа $\mathrm{Tr}$ (а также частичного следа) мы будем трактовать как линейный оператор, т.е. $\mathrm{Tr}\colon \mathfrak{T}(\mathscr{H}) \to \mathbb{C}$. Поэтому по общим правилам интерпретации выражений с линейными операторами запись вида $\mathrm{Tr}\, AB$, где $A$ и $B$ — некоторые операторы, означает взятие следа от произведения операторов $A$ и $B$, т.е. эквивалентно $\mathrm{Tr}(AB)$. Иными словами, примем соглашение, что операция взятия следа распространяется на всё, что стоит справа от символа $\mathrm{Tr}$. Это позволит уменьшить количество скобок во многих выражениях и тем самым упростить их запись.

Если $\rho_{AB} \in \mathfrak{S}(\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B)$ — состояние составной системы, то состояние подсистемы получается взятием частичного следа по другой подсистеме:

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_{\mathscr{H}_B} \rho_{AB} \equiv \mathrm{Tr}_B \rho_{AB}.$$

Операция частичного следа определяется следующим образом:

$$\mathrm{Tr}[(\mathrm{Tr}_B \rho_{AB})X] = \mathrm{Tr}[\rho_{AB}(X \otimes I_B)]$$

для всех $X \in \mathfrak{B}(\mathscr{H}_A)$. Также частичный след можно выразить по следующей формуле:

$$\mathrm{Tr}_B \rho_{AB} = \sum_k \langle e_k|\rho_{AB}|e_k\rangle\,, \tag{1.1}$$

где $\{e_k\}$ — произвольный ортонормированный базис в $\mathscr{H}_B$ (выражение не зависит от выбора базиса). Частичный след соответствует переходу от совместного

распределения к частичному распределению в (классической) теории вероятностей.

В выражении (1.1) мы воспользовались следующим соглашением, которым будем пользоваться и далее: если $A$ — линейный оператор в тензорном произведении $\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B$, а $|\psi\rangle$ и $|\psi'\rangle$ — векторы из $\mathscr{H}_B$, то $\langle\psi|A|\psi'\rangle$ — это линейный оператор в пространстве $\mathscr{H}_A$ с матричными элементами

$$\langle\varphi|\Big(\,\langle\psi|A|\psi'\rangle\,\Big)\,|\varphi'\rangle = \big(\,\langle\varphi|\otimes\langle\psi|\,\big)\,A\,\big(\,|\psi'\rangle\otimes|\varphi'\rangle\,\big). \tag{1.2}$$

для любых $|\varphi\rangle\,, |\varphi'\rangle \in \mathscr{H}_A$.

*Квантовым каналом* [82, 84] называется линейное, вполне положительное, сохраняющее след отображение $\Phi\colon \mathfrak{T}(\mathscr{H}_A) \to \mathfrak{T}(\mathscr{H}_B)$. Благодаря свойствам положительности (т.е. $\Phi(\rho) \geqslant 0$ для любого $\rho \geqslant 0$) и сохранения следа $\Phi$ переводит состояния в состояния. Полная положительность означает, что отображение $\Phi\otimes\mathrm{Id}_m\colon \mathfrak{T}(\mathscr{H}_A\otimes\mathbb{C}^m) \to \mathfrak{T}(\mathscr{H}_B\otimes\mathbb{C}^m)$ для любого натурального $m$ положительно.

Иногда, чтобы подчеркнуть, что канал переводит состояния в состояния, мы будем писать $\Phi\colon \mathfrak{S}(\mathscr{H}_A) \to \mathfrak{S}(\mathscr{H}_B)$. Произвольное аффинное вполне положительное отображение из пространства состояний в пространство состояний однозначно продолжается до линейного, вполне положительного, сохраняющего след отображения, действующего на пространстве ядерных операторов, т.е. до квантового канала в приведённом выше смысле.

Отображение $\Phi$ вполне положительно тогда и только тогда, когда оно может быть представлено в виде (называемом представлением Крауса)

$$\Phi(\rho) = \sum_j V_j \rho V_j^\dagger, \tag{1.3}$$

где $V_j : \mathscr{H}_A \to \mathscr{H}_B$ — линейные операторы. $\Phi$ сохраняет след тогда и только тогда, когда эти операторы удовлетворяют свойству $\sum_j V_j^\dagger V_j = I_A$, где сходимость имеет место в сильной операторной топологии [84]. Представление Крауса для заданного вполне положительного и сохраняющего след отображения $\Phi$ неединственно. Если $\mathscr{H}_A = \mathscr{H}_B = \mathbb{C}^n$, то всегда существует представление Крауса с количеством слагаемых, не превышающем $n^2$.

Сопряжённое линейное отображение $\Phi^* : \mathfrak{B}(\mathscr{H}_B) \to \mathfrak{B}(\mathscr{H}_A)$ определяется равенством

$$\operatorname{Tr} X\Phi(\rho) = \operatorname{Tr} \Phi^*(X)\rho \tag{1.4}$$

для любых $\rho \in \mathfrak{T}(\mathscr{H}_A)$ и $X \in \mathfrak{B}(\mathscr{H}_B)$. Если отображение $\Phi$ — квантовый канал, то оно также называется каналом в картине Шрёдингера, или каналом в пространстве состояний, а $\Phi^*$ — каналом в картине Гейзенберга, или каналом в пространстве наблюдаемых [79, 82]. Если представление Крауса (1.3) задаёт канал в пространстве состояний, то сопряжённый канал в пространстве наблюдаемых можно представить в виде

$$\Phi^*(X) = \sum_j V_j^\dagger \rho V_j. \tag{1.5}$$

Если $\mathscr{H}_A = \mathscr{H}_B$, то квантовый канал также называется *квантовым динамическим отображением* [84].

*Квантовая наблюдаемая* в общем случае задаётся вероятностной операторнозначной мерой (в английском языке общепринятый термин — POVM, “positive (или probabilistic) operator-valued measure”) [80, 82, 258]. В данной работе (за исключением замечания 2.1 в главе 2, которое не будет иметь дальнейших следствий) мы будем рассматривать квантовые наблюдаемые только в виде вероятностных проекторнозначных мер [258] с дискретным множеством исходов, т.е. стандартных наблюдаемых фон Неймана. Итак, в данной работе наблюдаемая — это семейство ортогональных проекторов $\{P_j\}$ (т.е. $P_j P_k = \delta_{jk} P_j$, здесь и далее $\delta_{jk}$ — символ Кронекера), удовлетворяющее свойству $\sum_j P_j = I$, сходимость — в сильной операторной топологии. Индекс $j$ обозначает результат измерения. Если квантовая система пребывает в состоянии $\rho$, то результат $j$ возникает с вероятностью $p_j = \operatorname{Tr} P_j \rho$, а новое состояние после измерения имеет вид

$$\rho'_j = \frac{P_j \rho P_j}{\operatorname{Tr} P_j \rho}.$$

Если при измерении не происходит считывания результата измерения наблюдателем, то новое состояние имеет вид

$$\rho' = \sum_j p_j \rho'_j = \sum_j P_j \rho P_j. \tag{1.6}$$

Измерение со считыванием результата измерения наблюдателем называется *селективным*, без считывания результата — *неселективным*.

Нам также потребуется более подробная модель измерений, явным образом включающая в себя регистр (формально — дополнительную квантовую подсистему), в которую записывается результат измерения. А именно, для заданной вероятностной проекторнозначной меры с конечным числом проекторов (нам понадобится только этот случай) $\{P_j\}_{j=1}^m$ можно задать изометрическое отображение $K : \mathscr{H} \to \mathscr{H} \otimes \mathbb{C}^m$ по формуле

$$K = \sum_{j=1}^{m} P_j \otimes |j\rangle\,, \tag{1.7}$$

где $\{|j\rangle\}_{j=1}^m$ — фиксированный ортонормированный базис в $\mathbb{C}^m$. Для любого $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$

$$K\,|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{m} P_j\,|\psi\rangle \otimes |j\rangle\,.$$

Тогда произвольное состояние $\rho$ в $\mathscr{H}$ при соответствующем измерении меняется на

$$\rho \mapsto K\rho K^\dagger = \sum_{j=1}^{m} P_j \rho P_j \otimes |j\rangle\,\langle j|\,. \tag{1.8}$$

Очевидно,

$$\mathrm{Tr}_{\mathbb{C}^m}(K\rho K^\dagger) = \sum_{j=1}^{m} P_j \rho P_j, \tag{1.9}$$

т.е. формула (1.8) задаёт представление Стайнспринга [82] для квантового канала (1.6), соответствующего неселективному квантовому измерению.

*Энтропия фон Неймана* квантового состояния выражается формулой

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr}\rho\ln\rho = -\sum_j p_j \ln p_j, \tag{1.10}$$

где $\{p_j\}$ — собственные значения оператора $\rho$ (с учётом кратностей). Принимается соглашение $0\ln 0 = 0$. Если ряд (1.10) расходится, то энтропии приписывается значение $+\infty$.

В конечномерном случае энтропия достигает своего максимума, равного $\ln n$, в единственной точке $\rho = I_n/n$, где $n$ — размерность пространства. Это состояние называется хаотическим, или полностью смешанным. Энтропия равна нулю тогда и только тогда, когда $\rho$ — чистое состояние.

Пусть даны два квантовых состояния $\rho$ и $\sigma$. Обозначим $\operatorname{supp}\rho$ и $\operatorname{supp}\sigma$ их носители, т.е. замыкания ортогональных дополнений ядер этих операторов. Пусть $\operatorname{supp}\sigma \subset \operatorname{supp}\rho$. Тогда можно ввести понятие *квантовой относительной энтропии*:

$$D(\rho\|\sigma) = \operatorname{Tr}\rho\ln\rho - \operatorname{Tr}\rho\ln\sigma, \tag{1.11}$$

Если условие $\operatorname{supp}\sigma \subset \operatorname{supp}\rho$ не выполнено, то значение относительной энтропии принимается равным $+\infty$. Если $\rho$ и $\sigma$ диагонализуемы в одном и том же базисе, $\{p_j\}$ и $\{q_j\}$ — собственные значения этих операторов, то мы получаем выражение для относительной энтропии, известное в классической теории информации:

$$D(\rho\|\sigma) = \sum_j p_j \ln\frac{p_j}{q_j}.$$

Квантовая относительная энтропия — это одна из мер различия двух квантовых состояний. Однако это не метрика, потому что, например, не выполнено свойство симметричности: $D(\rho\|\sigma) \neq D(\sigma\|\rho)$.

Энтропию фон Неймана можно выразить через относительную энтропию следующим образом:

$$S(\rho) = -D(\rho\|I). \tag{1.12}$$

Квантовая относительная энтропия монотонна при действии на оба аргумента квантового канала [224] (см. также [82]):

$$D\big(\Phi(\rho)\|\Phi(\sigma)\big) \leqslant D(\rho\|\sigma) \tag{1.13}$$

для любых состояний $\rho$ и $\sigma$. Недавно [249] свойство монотонности (1.13) было доказано и для случая, когда $\Phi$ — положительное, но не вполне положительное отображение.

Квантовая относительная энтропия совместно выпукла по своим аргументам [223]:

$$D\big(p\rho_1 + (1-p)\rho_2 \| p\sigma_1 + (1-p)\sigma_2\big) \leqslant pD(\rho_1\|\sigma_1) + (1-p)D(\rho_2\|\sigma_2), \quad (1.14)$$

для любых состояний $\rho_{1,2}$, $\sigma_{1,2}$ и $0 \leqslant p \leqslant 1$. Отметим также очевидное свойство, которым иногда будем пользоваться:

$$D(c\rho\|c\sigma) = cD(\rho\|\sigma)$$

для любого $c > 0$.

Генератор Горини–Коссаковски–Сударшана–Линдблада нам потребуется только для конечномерного случая, поэтому в оставшейся части этого раздела (как и всей главы) будем работать в пространстве $\mathbb{C}^n$. Пусть дано однопараметрическое семейство квантовых динамических отображений:

$$\Lambda_t\colon \rho \mapsto \Lambda_t(\rho),$$

$t \geqslant 0$ (время). Если выполнено полугрупповое свойство $\Lambda_{t+s} = \Lambda_t \circ \Lambda_s$, то семейство $\{\Lambda_t\}$ называется *квантовой динамической полугруппой* [22]. Генератор квантовой динамической полугруппы имеет следующий общий вид [22,133,178,225]:

$$\mathcal{L}(\rho) = -i[H,\rho] + \sum_{k=1}^{K}\left(L_k\rho L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \rho\}\right), \quad (1.15)$$

где $H$ и $L_k$ — линейные операторы в $\mathbb{C}^n$, причём оператор $H$ — самосопряжённый (называется оператором Гамильтона или гамильтонианом), $[A,B] = AB - BA$, $\{A,B\} = AB + BA$, $K$ — некоторое натуральное число. Можно выбрать операторы $H$ и $L_k$ таким образом, чтобы $K \leqslant n^2 - 1$. Соответственно, $\rho(t)$ удовлетворяет следующему уравнению, которое называется *уравнением Горини–Коссаковски–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ)*:

$$\dot\rho(t) = \mathcal{L}(\rho) = -i[H,\rho(t)] + \sum_{k=1}^{K}\left(L_k\rho(t)L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \rho(t)\}\right). \quad (1.16)$$

Точкой над буквой в этой работе будет обозначаться производная по времени.

Полугрупповое свойство отражает свойство марковости уравнения ГКСЛ: для предсказания эволюции состояния системы достаточно знать только состояние в текущий момент времени.

С точки зрения физики уравнение ГКСЛ описывает динамику квантового состояния открытой системы, то есть системы, взаимодействующей с окружением (резервуаром). Изолированной системе соответствует уравнение только с гамильтоновой частью (уравнение фон Неймана, квантовое уравнение Лиувилля):

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

Поэтому второе слагаемое в (1.16) (сумма по $k$) называется также диссипатором. Однако следующий факт показывает, что разделение генератора ГКСЛ на гамильтоновую и диссипативную части весьма условно. Операторы $H$ и $L_k$ в генераторе ГКСЛ определены неоднозначно. А именно, уравнение ГКСЛ инвариантно относительно следующих преобразований [22]:

1) унитарных преобразований $L_k \to L'_k = \sum_{j=1}^{K} u_{kj} L_j$, где $\{u_{kj}\}$ — произвольная унитарная матрица размерности $K \times K$;

2) неоднородных преобразований

$$L_k \to L'_k = L_k + a_k,$$
$$H \to H' = H + \frac{1}{2i} \sum_{k=1}^{K} (a_k^* L_k - a_k L_k^\dagger) + b,$$

где $a_k$ — произвольные комплексные числа, а $b$ —произвольное вещественное число.

## 1.2 Функционал производства энтропии и его неотрицательность

Рассмотрим решение уравнения ГКСЛ (1.16) $\rho(t)$ в пространстве $\mathbb{C}^n$ и рассмотрим поведение энтропии во времени $S(\rho(t))$. Зададимся вопросом, при ка-

ких условиях энтропия монотонно не убывает при всех $\rho(t)$, или, формально,

$$\frac{d}{dt}S\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\right)\Big|_{t=0} \geqslant 0 \tag{1.17}$$

для всех $\rho$. В этой главе $\rho(t)$ будет обозначать решение уравнения ГКСЛ, а $\rho$ — абстрактный аргумент линейных функционалов и отображений, действующих в пространстве операторов.

Известный результат, являющийся простым следствием монотонности квантовой относительной энтропии, гласит, что условие (1.17) выполнено для всех $\rho$ тогда и только тогда, когда $I_n$ — стационарное решение уравнения ГКСЛ, т.е. $\mathcal{L}(I_n) = 0$. В самом деле, поскольку энтропия максимальна в состоянии $I_n/n$ и только в нём, это состояние должно быть стационарным, иначе (1.17) будет нарушено как раз при $\rho = I_n/n$. Обратно, если выполнено условие стационарности $I_n$, то

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}S\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\right)\Big|_{t=0} &= -\frac{d}{dt}D\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\|I_n\right)\Big|_{t=0} = \\ &= -\frac{d}{dt}D\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\|e^{t\mathcal{L}}I_n\right)\Big|_{t=0} \geqslant 0,\end{aligned} \tag{1.18}$$

где мы воспользовались (1.12) и (1.13).

Отметим, что $I_n/n$ может быть неединственным стационарным состоянием уравнения Линдбада. Иными словами, $\rho(t)$ при $t \to \infty$ не обязательно стремится к $I_n/n$. Также отметим, что с физической точки зрения условие стационарности $I_n$ может означать бесконечно большую температуру резервуара, с которым взаимодействует система.

Итак, если условие стационарности $I_n$ не выполнено, то энтропия может и убывать. Нашей задачей является построение более общего функционала от $\rho$ (нежели производная от энтропии (1.17)), который будет неотрицательным при более широких предположениях.

Очевидное обобщение (1.17) и (1.18), предложенное в [290], — это функционал

$$\Pi_{\mathrm{na}}(\rho) = -\frac{d}{dt}D\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\|\rho^{\mathrm{st}}\right)\Big|_{t=0} \geqslant 0,$$

где $\rho^{\mathrm{st}}$ — произвольное стационарное решение уравнения ГКСЛ, т.е. $\mathcal{L}(\rho^{\mathrm{st}}) = 0$. Уравнение ГКСЛ имеет по крайней мере одно стационарное состояние [112]. Этот функционал мы будем использовать (индекс na тоже будет объяснён), но его недостаток заключается в необходимости знания по меньшей мере одного стационарного состояния. Первый результат диссертационной работы, к изложению которого мы приступаем, состоит в построении функционала, не требующего знания стационарного состояния.

Второй закон термодинамики гласит, что энтропия в изолированной системе не может убывать. С точки зрения физики убывание энтропии в нашем случае объясняется тем, что система не является замкнутой, а взаимодействует с окружением. Например, энтропия в системе может убывать за счёт увеличения энтропии резервуара. Поэтому следует ожидать, что неотрицательным является производство энтропии [38, 67], т.е. функционал, являющийся суммой приращения энтропии системы (1.17) и дополнительного слагаемого $J(\rho)$, которое описывало бы поток энтропии из системы в резервуар:

$$\Pi(\rho) = \frac{d}{dt} S\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\right)\Big|_{t=0} + J(\rho). \tag{1.19}$$

Зададим теперь этот функционал $J$. Будем предполагать, что существуют такие вещественные числа $\Delta s_k$, $k = 1, \ldots, K$, и отображение $k \mapsto \tilde{k}$, являющееся инволюцией (т.е. $\tilde{\tilde{k}} = k$), для которых выполнены равенства:

$$\begin{aligned} \Delta s_{\tilde{k}} &= -\Delta s_k, \\ L_{\tilde{k}} &= L_k^\dagger e^{-\Delta s_k/2}. \end{aligned} \tag{1.20}$$

Физически это условие (существование чисел $\Delta s_k$ и инволюции, удовлетворяющих (1.20)) говорит о том, что если в системе возможен переход $k$ (за которое отвечает соответствующее слагаемое в генераторе ГКСЛ), то возможен и обратный переход $\tilde{k}$. Второе равенство в (1.20) связывает интенсивности прямого и обратного переходов. Таким образом, это условие говорит о том, что слагаемые входят в генератор ГКСЛ парами (так что общее число слагаемых $K$ чётно), поскольку для каждого перехода существует переход в обратную сторону. Для

уравнений ГКСЛ, описывающих физические системы, это условие выполнено. Важный особый случай — это резервуар при нулевой температуре (хоть это и абстракция, соответствующие модели используются), когда переход с высшего энергетического уровня на низший возможен, а обратный — нет. Этот случай соответствует $\Delta s_k = +\infty$ и, согласно (1.20), $L_{\tilde{k}} = 0$. Т.е. и в этом случае можно себе представить, что парное слагаемое, соответствующее обратному переходу, в уравнении ГКСЛ присутствует, но перед ним стоит множитель, равный нулю.

Как мы увидим ниже (см. раздел 1.4), коэффициент $\Delta s_k$ имеет смысл приращения энтропии резервуара при квантовом переходе $L_k$ в системе. Тогда определим

$$J(\rho) = \sum_{k=1}^{K} \mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho) \Delta s_k, \tag{1.21}$$

что, вместе с (1.19) определяет функционал производства энтропии $\Pi$. Величина $\mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho)$ имеет смысл интенсивности переходов $k$ в системе. Таким образом, каждое слагаемое в выражении (1.21) для потока энтропии из системы в резервуар представляет собой произведение приращения энтропии резервуара при данном переходе $k$ на интенсивность этого перехода. В статье [5, в списке публикаций автора] дано эвристическое обоснование формулы производства энтропии (1.19), (1.21) при помощи концепции комплементарного квантового канала [81, 82, 148], который в некотором смысле описывает процессы в резервуаре.

В случае резервуара нулевой температуры некоторые $\Delta s_k = +\infty$ и, следовательно, $J(\rho) = +\infty$, если $\mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho) \neq 0$. Это соответствует физическому смыслу: по формуле Клаузиуса приращение энтропии резервуара равно переданному теплу, делённому на температуру резервуара, поэтому передача тепла в резервуар нулевой температуры соответствует бесконечному приращению его энтропии.

Если $\rho(t)$ — решение уравнения ГКСЛ, то

$$\Pi(\rho(t)) = \frac{d}{dt} S(\rho(t)) + \sum_{k=1}^{K} \mathrm{Tr}[L_k^\dagger L_k \rho(t)] \Delta s_k.$$

Нетрудно показать (например, воспользовавшись выражением энтропии через собственные числа оператора $\rho$ (1.10) и равенством $\operatorname{Tr}\rho = 1$), что

$$\frac{d}{dt} S\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\right)\Big|_{t=0} = -\operatorname{Tr}\mathcal{L}(\rho)\ln\rho.$$

Тогда функционал $\Pi$ записывается в виде

$$\Pi(\rho) = -\operatorname{Tr}\mathcal{L}(\rho)\ln\rho + \sum_{k=1}^{K}\operatorname{Tr}(L_k^\dagger L_k\rho)\Delta s_k \tag{1.22}$$

Условия (1.20) введены в работе [188]. В работах [187, 188] для определения производства энтропии используется концепция квантовых стохастических траекторий. Неотрицательность производства энтропии тогда является следствием флуктуационных теорем [181]. Формулировка функционала производства энтропии непосредственно на языке операторов, на наш взгляд, более проста и естественна. Также удаётся более простым образом доказать неотрицательность производства энтропии. Далее мы увидим, что при исследовании адиабатического и неадиабатического вкладов в производство энтропии использование квантовых стохастических траекторий существенно ограничивает класс рассматриваемых уравнений.

**Теорема 1.1.** *При выполнении условий (1.20) функционал (1.22) неотрицателен.*

*Доказательство.* Подстановка (1.16) в (1.22) дает

$$\begin{aligned}\Pi(\rho) &= -\operatorname{Tr}\mathcal{L}(\rho)\ln\rho + \sum_{k}\operatorname{Tr}L_k^\dagger L_k\rho\Delta s_k = \\ &= \sum_{k=1}^{K}\operatorname{Tr}\left(-L_k\rho L_k^\dagger\ln\rho + L_k^\dagger L_k\rho\ln\rho + L_k^\dagger L_k\rho\Delta s_k\right) = \\ &= \sum_{k=1}^{K}\operatorname{Tr}L_k\rho\left(L_k^\dagger\Delta s_k - [L_k^\dagger,\ln\rho]\right),\end{aligned}$$

где мы несколько раз воспользовались циклической перестановкой под знаком следа. Пусть спектральное разложение $\rho$ имеет вид

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} p_i\left|e_i\right\rangle\left\langle e_i\right|, \tag{1.23}$$

где $\{|e_i\rangle\}$ — ортонормированный базис $\mathbb{C}^n$. Обозначим матричные элементы $\langle e_i|L_k|e_j\rangle = L_k^{ij}$. Тогда, представляя след в виде $\operatorname{Tr} A = \sum_i \langle e_i|A|e_i\rangle$, получаем

$$\begin{aligned}
\Pi(\rho) &= \sum_k \sum_{ij} |L_k^{ij}|^2 p_j \left(\ln\frac{p_j}{p_i} + \Delta s_k\right) = \\
&= \frac{1}{2}\sum_k \sum_{ij} \left[|L_k^{ij}|^2 p_j \left(\ln\frac{p_j}{p_i} + \Delta s_k\right) + |L_{\tilde{k}}^{ji}|^2 p_i \left(\ln\frac{p_i}{p_j} + \Delta s_{\tilde{k}}\right)\right] = \\
&= \frac{1}{2}\sum_k \sum_{ij} |L_k^{ij}|^2 \left[p_j \left(\ln\frac{p_j}{p_i} + \Delta s_k\right) + p_i e^{-\Delta s_k}\left(\ln\frac{p_i}{p_j} - \Delta s_k\right)\right] = \\
&= \frac{1}{2}\sum_k \sum_{ij} |L_k^{ij}|^2 p_j \left(\frac{p_i}{p_j}e^{-\Delta s_k} - 1\right)\ln\left(\frac{p_i}{p_j}e^{-\Delta s_k}\right).
\end{aligned}$$

Неотрицательность этого выражения следует из неравенства $(x-1)\ln x \geqslant 0$. □

**Замечание 1.1.** Необходимо отметить, что функционал (1.22) не всегда соответствует физическому производству энтропии. Функционал (1.22) и теорему 1.1 можно воспринимать двояко. С одной стороны, при подходящем (соответствующем физике процесса) выборе чисел $\Delta s_k$ и инволюции $k \mapsto \tilde{k}$ функционал (1.22) можно воспринимать с физической точки зрения как выражение для производства энтропии, а теорему 1.1 — как утверждение о неотрицательности производства энтропии, т.е. обобщение второго начала термодинамики на квантовый случай. С другой стороны, теорему 1.1 можно воспринимать и как чисто математическую теорему, обобщающую утверждение о неубывании энтропии при известных условиях, не зависящую от физического смысла.

Функционал (1.22) определён неоднозначно. Во-первых, неоднозначность имеет место в силу упоминавшегося в конце подраздела 1.1 произвола в выборе операторов $H$ и $L_k$ в уравнении ГКСЛ (1.16). Но даже при фиксированных операторах возможна ситуация, когда числа $\Delta s_k$ и инволюцию $k \mapsto \tilde{k}$ можно задать по-разному. В разделе 1.5.3 мы определяем функционал (1.22) двумя разными способами: один способ соответствует термодинамическому производству энтропии, второй — более удобен математически для нахождения стационарных состояний.

По этой причине более правильно называть функционал (1.22), например, П-

функционалом, как сделано в [3, в списке публикаций автора], но мы всё-таки будем также его условно называть и функционалом производства энтропии.

## 1.3 Адиабатический и неадиабатический вклады в производство энтропии

Итак, функционал производства энтропии (1.19) состоит из двух слагаемых, каждое из которых по отдельности может быть отрицательным. Стоит вопрос, можно ли разбить этот функционал на слагаемые таким образом, чтобы каждое слагаемое по отдельности было неотрицательным. В классической термодинамике ответ на этот вопрос положительный. Речь идёт о разбиении производства энтропии на адиабатический и неадиабатический вклады. Предложим следующий аналог этого разбиения для квантового случая, несколько обобщая определения в [187, 188]:

$$\begin{aligned}
\Pi(\rho) &= \frac{d}{dt} S\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\right)\Big|_{t=0} + J(\rho) = \Pi_{\mathrm{a}}(\rho) + \Pi_{\mathrm{na}}(\rho), \\
\Pi_{\mathrm{na}}(\rho) &= -\frac{d}{dt} D\left(e^{t\mathcal{L}}\rho \| \rho^{\mathrm{st}}\right)\Big|_{t=0} = \\
&= \frac{d}{dt} S\left(e^{t\mathcal{L}}\rho\right)\Big|_{t=0} + J_{\mathrm{ex}}(\rho), \quad J_{\mathrm{ex}}(\rho) = \operatorname{Tr} \mathcal{L}(\rho) \ln \rho^{\mathrm{st}}, \\
\Pi_{\mathrm{a}}(\rho) &= J(\rho) - J_{\mathrm{ex}}(\rho) \equiv J_{\mathrm{hk}}(\rho).
\end{aligned} \tag{1.24}$$

Величины $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho)$ и $\Pi_{\mathrm{na}}(\rho)$ суть соответственно адиабатический и неадиабатический вклады в производство энтропии, $\rho^{\mathrm{st}}$ — некоторое стационарное решение уравнения ГКСЛ, т.е. $\mathcal{L}(\rho^{\mathrm{st}}) = 0$.

Адиабатический вклад представляет собой минимальное производство энтропии, необходимое для поддержания системы в неравновесном стационарном состоянии. В англоязычной литературе этот вклад также называется “housekeeping heat” [157, 182, 262], с чем связан нижний индекс “hk” в последней формуле в (1.24). Разность между полным потоком энтропии $J$ и частью потока $J_{\mathrm{hk}}$, необходимым для поддержания неравновесного стационарного состоя-

ния, называется избыточным потоком энтропии и обозначается $J_{\mathrm{ex}}$ (от “excess” – «избыточный»). Неадиабатический вклад, напротив, связан с собственно динамикой, с отклонением от стационарного состояния.

**Замечание 1.2.** Эти названия более понятны, если рассмотреть уравнения ГКСЛ с операторами $H(\lambda)$ и $L_k(\lambda)$, зависящими от числовых параметров $\lambda$ (т.е. $\lambda$ — конечномерный вещественный вектор). Тогда и стационарное состояние зависит от этих параметров: $\rho_\lambda^{\mathrm{st}}$. Предположим, что при фиксированных параметрах стационарное состояние $\rho_\lambda^{\mathrm{st}}$ единственно и решение уравнения при любом начальном условии сходится к нему. Будем теперь изменять эти параметры во времени: $\lambda = \lambda(t)$. Такая постановка задачи используется в квантовой термодинамике, $\lambda$ — это внешние управляющие параметры. Изменяя их во времени, мы можем переводить квантовую систему из одного состояния в другое подобно тому, как мы это делаем в классической термодинамике (например, двигая поршень, изменяя объём сосуда, в который заключён газ). Важную роль здесь играет скорость изменения параметров во времени. Введём параметр «скорости» $\varepsilon$ и пусть $\lambda = \lambda(\varepsilon t)$. Адиабатический предел заключается в бесконечно медленном изменении операторов, формально [42] — в одновременном устремлении $\varepsilon \to 0$ и $t \to \infty$, так что $\varepsilon t = \tau = const$. Тогда можно доказать, что в этом пределе $\rho(\tau) = \rho_{\lambda(\tau)}^{\mathrm{st}}$ для всех $\tau > 0$, то есть система всегда пребывает в мгновенном стационарном состоянии. В этом случае неадиабатический вклад равен нулю, тогда как адиабатический, вообще говоря, ненулевой. Иными словами, величина неадиабатического вклада в производство энтропии отражает степень отклонения от адиабатического предела.

В термодинамике разделение производства энтропии на адиабатическую и неадиабатическую части важно при изучении перевода системы из одного неравновесного стационарного состояния в другое: поскольку для поддержания неравновесного стационарного состояния системы требуется определённый постоянный поток энтропии из системы в окружение, то выделение неадиабатического вклада в производство энтропии более точно характеризует термодинамическую цену внешнего управления системой.

Отметим, что здесь мы также можем включить в наше рассмотрение зависимость генератора ГКСЛ от управляющих параметров $\lambda$, зависящих от времени (как мы сделали в [5, в списке работ автора]). В самом деле, все величины, которые мы рассматриваем (производная энтропии, потоки) — «мгновенные», то есть относятся к фиксированному моменту времени, так что вид генератора в другие моменты времени не играет роли. По этой причине включение зависимости от $\lambda$ не повлияет на справедливость утверждений этого раздела, но усложнит запись формул. Поэтому для простоты мы рассматриваем генератор, не зависящий от параметров. Квантовую систему с гамильтонианом, зависящим от времени, и соответствующий адиабатический режим мы рассмотрим в главе 3.

В классической термодинамике доказывается, что не только полное производство энтропии, но и по отдельности адиабатический и неадиабатический вклады в него неотрицательны [157]. В квантовом случае неотрицательность неадиабатического производства энтропии гарантируется свойством монотонности относительной энтропии (1.13). Что же касается адиабатического вклада, то в квантовом случае, как выясняется, он может принимать и отрицательные значения. А именно, для системы, которую мы рассмотрим в разделе 1.4.2, численные расчёты показывают, что адиабатический вклад в производство энтропии может быть и отрицательным.

В работах [187, 188] даётся другое определение адиабатического и неадиабатического вкладов: на основе квантовых стохастических траекторий [22]. Положительность обоих вкладов тогда следует из флуктуационных теорем [181]. Но такой подход требует наложения дополнительных ограничений (1.25). Они выполнены не для всех физически интересных систем. В частности, они не выполнены для модели, которую мы рассмотрим в разделе 1.4.2 (в которой и обнаружены отрицательные значения адиабатического вклада).

Однако из замечания 1.2 следует, что физический смысл адиабатический и неадиабатический вклады имеют только в малой окрестности стационарного состояния: при малых скоростях (в адиабатическом режиме) состояние системы находится близко к мгновенному стационарному состоянию. Докажем сначала,

что в малой окрестности стационарного состояния адиабатический вклад в производство энтропии неотрицателен. После этого мы передокажем теорему, доказанную в [187, 188], о том, что при дополнительном ограничении (1.25) адиабатический вклад в производство энтропии неотрицателен для всех состояний (не только в малой окрестности стационарного состояния). Наше доказательство, в отличие от [187, 188], не будет опираться на флуктуационную теорему, а будет основано только на свойствах выпуклых функций.

**Теорема 1.2.** *Пусть выполнены условия (1.20),* $\rho^{\mathrm{st}}$ *— некоторое стационарное состояние и* $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho^{\mathrm{st}}) = 0$*. Тогда* $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho) \geqslant 0$ *при всех* $\rho$*.*

*Доказательство.* Докажем утверждение от противного. Пусть $\Pi_{\mathrm{a}}(\bar{\rho}) < 0$ для некоторого $\bar{\rho}$. Введём тогда семейство состояний

$$\rho_\varepsilon = (1-\varepsilon)\rho^{\mathrm{st}} + \varepsilon\bar{\rho},$$

$0 \leqslant \varepsilon \leqslant 1$. Тогда

$$\Pi_{\mathrm{na}}(\rho_\varepsilon) = \mathrm{Tr}\{\mathcal{L}(\rho_\varepsilon)(\ln\rho_\varepsilon - \ln\rho^{\mathrm{st}})\} = \varepsilon\,\mathrm{Tr}\{\mathcal{L}(\bar{\rho})[\ln\big(\rho^{\mathrm{st}} + \varepsilon(\bar{\rho}-\rho^{\mathrm{st}})\big) - \ln\rho^{\mathrm{st}}]\} = O(\varepsilon^2)$$

при $\varepsilon \to 0$. В то же время, пользуясь линейностью $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho)$ по $\rho$, имеем $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho_\varepsilon) = \varepsilon\Pi_{\mathrm{a}}(\bar{\rho})$. Поэтому при достаточно малых $\varepsilon > 0$ имеем

$$\Pi(\rho_\varepsilon) = \varepsilon\Pi_{\mathrm{a}}(\bar{\rho}) + O(\varepsilon^2) < 0,$$

что противоречит теореме 1.1 о неотрицательности полного производства энтропии при выполнении условий (1.20). □

**Следствие 1.1.** *Пусть выполнены условия (1.20). Существует такая окрестность стационарного состояния* $\rho^{\mathrm{st}}$ *(метрика может задаваться, например, следовой нормой* $\|\rho\|_1 = \mathrm{Tr}\sqrt{\rho\rho^\dagger}$*), что* $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho) \geqslant 0$*, если* $\rho$ *принадлежит этой окрестности.*

*Доказательство.* Если $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho^{\mathrm{st}}) > 0$, то утверждение следует из непрерывной зависимости $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho)$ от $\rho$. Если $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho^{\mathrm{st}}) = 0$, то утверждение следует из теоремы 1.2. Случай $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho^{\mathrm{st}}) < 0$ невозможен, поскольку $\Pi_{\mathrm{na}}(\rho^{\mathrm{st}}) = 0$, а $\Pi(\rho^{\mathrm{st}}) \geqslant 0$ по теореме 1.1. □

Наложим теперь дополнительные условия. Пусть ядро стационарного оператора $\rho^{\mathrm{st}}$ тривиально и существует такое спектральное разложение этого оператора

$$\rho^{\mathrm{st}} = \sum_{i=1}^{n} p_i |e_i\rangle\langle e_i|,$$

что выполнены следующие равенства:

$$\begin{aligned} \rho^{\mathrm{st}} L_k &= \varpi_k L_k \rho^{\mathrm{st}}, \\ [H, \rho^{\mathrm{st}}] &= 0. \end{aligned} \tag{1.25}$$

Здесь $\varpi_k = p_i/p_j$ для всех $|e_i\rangle$ и $|e_j\rangle$, соединяемых оператором $L_k$ (т.е. $\langle e_i|L_k|e_j\rangle \neq 0$). В частности, это означает, что каждый оператор $L_k$ соединяет только те пары собственных векторов $\rho^{\mathrm{st}}$, которые отвечают собственным значениям с одним и тем же отношением $\varpi_k$. Из первого условия также следует

$$[L_k^\dagger L_k, \rho^{\mathrm{st}}] = 0$$

для всех $k$.

Отметим, что под эти условия попадает и классический случай, описанный в [157], поэтому следующая теорема о неотрицательности адиабатического вклада обобщает соответствующий результат классической термодинамики. Далее будет рассмотрен случай, когда уравнение ГКСЛ сводится к уравнениям классической кинетики для диагональных элементов оператора плотности в некотором базисе, см. уравнения (1.32)–(1.33).

**Теорема 1.3.** *Пусть выполнены условия (1.20) и (1.25) и ядро оператора $\rho^{\mathrm{st}}$ тривиально. Тогда $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho) \geqslant 0$ для всех операторов плотности $\rho$.*

*Доказательство.* Первое условие в (1.25) можно переписать в виде

$$[\ln \rho^{\mathrm{st}}, L_k] = (\ln \varpi_k) L_k.$$

Пользуясь этим, нетрудно выразить $J_{\mathrm{ex}}(\rho)$ как

$$J_{\mathrm{ex}}(\rho) = \sum_k \mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho) \ln \varpi_k.$$

Тогда

$$\Pi_{\mathrm{a}}(\rho) = \sum_k \mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho) \ln \frac{e^{\Delta s_k}}{\varpi_k}. \tag{1.26}$$

Поскольку $\rho^{\mathrm{st}}$ — стационарное состояние, то

$$-i[H, \rho^{\mathrm{st}}] + \sum_k \left( L_k \rho^{\mathrm{st}} L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{\rho^{\mathrm{st}}, L_k^\dagger L_k\} \right) = 0.$$

Пользуясь (1.25), можно переписать это равенство как

$$\sum_k (\varpi_k^{-1} L_k L_k^\dagger - L_k^\dagger L_k)\rho^{\mathrm{st}} = 0,$$

или

$$\sum_k (\varpi_k^{-1} L_k L_k^\dagger - L_k^\dagger L_k) \sum_i p_i \left|e_i\right\rangle \left\langle e_i\right| = 0.$$

Умножая обе части этого равенства справа на $|e_i\rangle$ при фиксированном $i$ и пользуясь тем, что $p_i \neq 0$, получаем

$$\sum_k (\varpi_k^{-1} L_k L_k^\dagger - L_k^\dagger L_k) \left|e_i\right\rangle = 0$$

при всех $i$, что означает

$$\sum_k \varpi_k^{-1} L_k L_k^\dagger = \sum_k L_k^\dagger L_k.$$

Следовательно,

$$\sum_k \varpi_k^{-1} \mathrm{Tr}(L_k L_k^\dagger \rho) = \sum_k \mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho)$$

для произвольного оператора плотности $\rho$. Воспользуемся теперь условиями (1.20):

$$\sum_k \varpi_k^{-1} \mathrm{Tr}(L_k L_k^\dagger \rho) = \sum_k \varpi_{\tilde{k}}^{-1} \mathrm{Tr}(L_{\tilde{k}} L_{\tilde{k}}^\dagger \rho) = \sum_k \varpi_k e^{-\Delta s_k} \mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho).$$

Поэтому

$$\sum_k \varpi_k e^{-\Delta s_k} \mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho) = \sum_k \mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho).$$

Обозначая $\alpha_k = \mathrm{Tr}(L_k^\dagger L_k \rho) / \sum_j \mathrm{Tr}(L_j^\dagger L_j \rho)$, получаем равенство

$$\sum_k \alpha_k \varpi_k e^{-\Delta s_k} = 1,$$

тогда как доказываемое утверждение $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho) \geqslant 0$ в силу (1.26) принимает вид

$$\sum_k \alpha_k \ln(\varpi_k e^{-\Delta s_k}) \leqslant 0,$$

Так как $\sum_k \alpha_k = 1$, то вследствие вогнутости логарифма (применяя неравенство Иенсена) получаем, что в самом деле

$$\sum_k \alpha_k \ln(\varpi_k e^{-\Delta s_k}) \leqslant \ln\left(\sum_k \alpha_k \varpi_k e^{-\Delta s_k}\right) = 0.$$

□

## 1.4 Примеры функционалов производства энтропии

### 1.4.1 Система, взаимодействующая с тепловым резервуаром в режиме слабой связи

В этом разделе мы приведём примеры выражений производства энтропии для различных систем. Важный класс уравнений ГКСЛ составляют уравнения, получаемые в пределе слабой связи системы с тепловым резервуаром. Опишем свойства уравнения ГКСЛ этого класса, которые мы будем использовать, см. [22, 88,89,144]. Пусть $H_S$ — гамильтониан системы, т.е. некоторый самосопряжённый оператор в пространстве $\mathscr{H}$. Обозначим $\operatorname{spec} H_S$ спектр оператора $H_S$ (уровни энергии системы), $P_\varepsilon$ — проектор на собственное подпространство, отвечающее собственному значению $\varepsilon \in \operatorname{spec} H_S$, и

$$\Omega = \{\varepsilon' - \varepsilon |\, \varepsilon, \varepsilon' \in \operatorname{spec} H_S,\, \varepsilon \neq \varepsilon'\}$$

— совокупность разностей между уровнями энергии, которые также называются боровскими частотами переходов между уровнями.

Тогда операторы $L_k$ и $H$ в уравнении ГКСЛ (1.16) рассматриваемого класса имеют следующий вид: каждому $k$ соответствует некоторая боровская частота

$\omega_k \in \Omega$ и вещественное число $h_k$, при которых

$$\begin{aligned} L_k &= \sum_{\varepsilon,\varepsilon' \in \operatorname{spec} H_S \colon \varepsilon' - \varepsilon = \omega_k} P_\varepsilon L_k P_{\varepsilon'}, \\ H &= \sum_k h_k L_k^\dagger L_k, \end{aligned} \tag{1.27}$$

Более того, для каждого такого $k$ найдётся другой такой индекс $\tilde{k}$, что соотношения (1.20) выполнены с

$$\Delta s_k = \beta \omega_k, \tag{1.28}$$

где $\beta = 1/(k_{\mathrm{B}} T)$, где $k_{\mathrm{B}}$ — постоянная Больцмана, $T$ — температура резервуара. Величина $\Delta s_k$ представляет собой приращение энтропии резервуара при переходе квантовой системы между уровнями энергии с разностью $\omega_k$. Пусть, например, $\omega_k > 0$. Тогда $L_k$ соответствует переходу системы с верхнего энергетического уровня на нижний. Такой переход сопровождается испусканием кванта поля резервуара (например, фотона, если резервуар — электромагнитное поле) с энергией $\omega_k$ (постоянная Планка здесь равна единице). Тогда по формуле Клаузиуса из термодинамики (1.28) — не что иное, как приращение энтропии резервуара: переданная ему теплота (энергия), делённая на температуру (с точностью до постоянной Больцмана, которую для простоты можно положить равной единице). Как мы говорили выше, нулевая температура соответствует бесконечному приращению энтропии.

Выполнение условий (1.20) с (1.28) гарантирует то, что гиббсовское состояние

$$\rho_\beta^{\mathrm{Gibbs}} = \frac{e^{-\beta H_S}}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H_S}} \tag{1.29}$$

является стационарным. Также из (1.27) и (1.28) следует, что

$$\rho_\beta^{\mathrm{Gibbs}} L_k = L_k \rho_\beta^{\mathrm{Gibbs}} e^{\Delta s_k}, \qquad [\ln \rho_\beta^{\mathrm{Gibbs}}, L_k] = L_k \Delta s_k,$$

поэтому поток энтропии из системы в резервуар (1.21) представляется в виде

$$J(\rho) = \operatorname{Tr} \mathcal{L}(\rho) \ln \rho_\beta^{\mathrm{Gibbs}}.$$

Следовательно,

$$\Pi(\rho) = -\frac{d}{dt} D\left(e^{t\mathcal{L}} \rho \| \rho_\beta^{\mathrm{Gibbs}}\right)\Big|_{t=0} = \Pi_{\mathrm{na}}(\rho), \tag{1.30}$$

и $\Pi_{\mathrm{a}}(\rho) = 0$. Функционал (1.30) как производство энтропии впервые был введён в [290].

Теперь рассмотрим случай, когда система взаимодействует с $m$ тепловыми резервуарами, находящимися при разных температурах. В этом случае генератор ГКСЛ представляет собой сумму генераторов, отвечающих взаимодействию с каждым резервуаром $r$:

$$\mathcal{L} = \sum_{r=1}^{m} \mathcal{L}_r,$$

где

$$\mathcal{L}_r(\rho) = -i[H_r, \rho] + \sum_{k=1}^{K_r} \left( L_{rk}\rho L_{rk}^\dagger - \frac{1}{2}\{L_{rk}^\dagger L_{rk}, \rho\} \right).$$

Каждый генератор $\mathcal{L}_r$ удовлетворяет свойствам (1.27)–(1.28) с собственной обратной температурой $\beta_r$. Соответственно, для каждой пары индексов $(r, k)$ существуют число $\Delta s_{rk}$ и индекс $\tilde{k}$, для которых выполняются условия (1.20) с $\Delta s_{rk} = \beta_r \omega_{rk}$. Тогда справедливо $\mathcal{L}_r(\rho_{\beta_r}^{\mathrm{Gibbs}}) = 0$, т.е. гиббсовские состояния с различными температурами стационарны для соответствующих генераторов. Обобщая результаты для случая одного резервуара, имеем

$$J(\rho) = \sum_{r=0}^{m} \operatorname{Tr} \mathcal{L}_r(\rho) \ln \rho_{\beta_r}^{\mathrm{Gibbs}},$$

$$\Pi(\rho) = -\frac{d}{dt} \sum_{r=1}^{m} D\left(e^{t\mathcal{L}_r}\rho \| \rho_{\beta_r}^{\mathrm{Gibbs}}\right)\Big|_{t=0}. \tag{1.31}$$

В данном случае, вообще говоря, адиабатический вклад в производство энтропии нулю не равен.

Рассмотрим случай, когда все собственные значения и все боровские частоты $H_S$ невырожденны. Невырожденность боровских частот означает, что для каждой боровской частоты $\omega \in \Omega$ существует единственная пара собственных значений $\varepsilon_\omega$ и $\varepsilon'_\omega$, такая что $\varepsilon'_\omega - \varepsilon_\omega = \omega$, т.е. каждой боровской частоте отвечает ровно один переход между уровнями энергии. Соответствующие собственные векторы обозначим $|\varepsilon_\omega\rangle$ и $|\varepsilon'_\omega\rangle$.

Тогда в силу (1.27) каждый генератор $\mathcal{L}_r$ приобретает вид:

$$\mathcal{L}_r(\rho) = -i[H_r, \rho] + \sum_{\omega\in\Omega}\left(L_{r\omega}\rho L_{r\omega}^\dagger - \frac{1}{2}\{L_{r\omega}^\dagger L_{r\omega}, \rho\}\right),$$

где

$$L_{r\omega} = l_{r\omega}\left|\varepsilon_\omega\right\rangle\left\langle\varepsilon'_\omega\right|,$$

где $l_{r\omega}$ — некоторые комплексные числа. Соответственно, уравнение ГКСЛ принимает вид

$$\dot\rho(t) = -i[H, \rho(t)] + \sum_{\omega\in\Omega}\left(L_\omega\rho(t)L_\omega^\dagger - \frac{1}{2}\{L_\omega^\dagger L_\omega, \rho(t)\}\right), \tag{1.32}$$

где

$$H = \sum_{r=1}^m H_r, \quad L_\omega = l_\omega\left|\varepsilon_\omega\right\rangle\left\langle\varepsilon'_\omega\right|, \quad l_\omega = \sqrt{\sum_{r=1}^m l_{r\omega}^2}.$$

Если обозначить через $\rho_{\varepsilon'\varepsilon}(t) = \langle\varepsilon'|\rho(t)|\varepsilon\rangle$ матричные элементы $\rho(t)$, то уравнение ГКСЛ сведётся к следующей системе:

$$\begin{aligned}
\dot\rho_{\varepsilon\varepsilon}(t) &= \sum_{\varepsilon'\neq\varepsilon}[c_{\varepsilon\varepsilon'}\rho_{\varepsilon'\varepsilon'}(t) - c_{\varepsilon'\varepsilon}\rho_{\varepsilon\varepsilon}(t)],\\
\dot\rho_{\varepsilon'\varepsilon}(t) &= i(h_\varepsilon - h_{\varepsilon'})\rho_{\varepsilon'\varepsilon}(t) - \frac{1}{2}(c_{\varepsilon\varepsilon'} + c_{\varepsilon'\varepsilon})\rho_{\varepsilon'\varepsilon}(t), \quad \varepsilon\neq\varepsilon',
\end{aligned} \tag{1.33}$$

где $c_{\varepsilon\varepsilon'} = |l_{\varepsilon'-\varepsilon}|^2$, $H\left|\varepsilon\right\rangle = h_\varepsilon\left|\varepsilon\right\rangle$. Мы видим, что диагональные и внедиагональные элементы эволюционируют независимо. При этом система уравнений для диагональных элементов — это система классических линейных кинетических уравнений [185, 281], в контексте открытых квантовых систем они называются кинетическими уравнениями Паули. По свойствам этих уравнений обязательно существует по крайней мере одно стационарное решение. Пусть также выполнено следующее условие: если $c_{\varepsilon'\varepsilon}\neq 0$, то и $c_{\varepsilon\varepsilon'}\neq 0$. Это условие выполнено, если все резервуары имеют ненулевую температуру. Тогда существует стационарное состояние, в котором все диагональные элементы $\rho^{\mathrm{st}}_{\varepsilon\varepsilon}$ положительны. Для внедиагональных элементов существует по крайней мере одно стационарное решение — тривиальное (если все $c_{\varepsilon\varepsilon'}\neq 0$, то оно, очевидно, и единственно). Итак, мы получили стационарное решение уравнения ГКСЛ $\rho^{\mathrm{st}}$ — диагональную матрицу

с положительными элементами на диагонали. Для этого состояния выполнены условия теоремы 1.3, следовательно, адиабатический вклад в производство энтропии неотрицателен.

Если некоторые резервуары имеют нулевую температуру, то можно вместо них рассмотреть резервуары с положительной температурой, которую затем устремить к нулю. Действуя таким образом, мы получим, что и в этом случае адиабатический вклад в производство энтропии неотрицателен.

### 1.4.2 Система, взаимодействующая с тепловым резервуаром в режиме повторяющихся взаимодействий

Рассмотрим два взаимодействующих кубита, т.е. квантовую систему в пространстве $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$, с гамильтонианом

$$H_S = H_0 + \nu V = E_A a^\dagger a + E_B b^\dagger b + \nu(a^\dagger b + a b^\dagger), \tag{1.34}$$

где $\nu > 0$ — константа взаимодействия двухуровневых систем, $a = |0\rangle_A \langle 1| \otimes I_2$, $b = I_2 \otimes |0\rangle_B \langle 1|$.

Пусть подсистема A связана с «тёплым» резервуаром с обратной температурой $\beta_h$, а подсистема B — с «холодным» резервуаром с обратной температурой $\beta_c > \beta_h$. В работе [110] рассмотрена следующая модель резервуара. Пусть тёплый резервуар состоит из бесконечного числа копий двухуровневой системы с гамильтонианом $H_h = E_A |1\rangle_h \langle 1|$, начальное состояние каждой копии — гиббсовское: $\exp(-\beta_h H_h)/\operatorname{Tr}\exp(-\beta_h H_h)$. Каждая из этих копий взаимодействует с подсистемой A на протяжении промежутка времени $\tau$ в соответствии с определённым гамильтонианом взаимодействия $H_{Ah}$, после чего заменяется следующей копией. Аналогично холодный резервуар также состоит из бесконечного числа копий двухуровневой системы с гамильтонианом $H_c = E_B |1\rangle_c \langle 1|$, начальное состояние каждой копии — также гиббсовское: $\exp(-\beta_c H_c)/\operatorname{Tr}\exp(-\beta_c H_c)$. Взаимодействие каждой копии с подсистемой B на протяжении промежутка времени $\tau$ определяется гамильтонианом взаимодействия $H_{Bc}$. Гамильтонианы вза-

имодействия имеют вид

$$H_{Ah} = \lambda(a_h a^\dagger + a_h^\dagger a), \quad H_{Bc} = \lambda(b_c b^\dagger + b_c^\dagger b),$$

где $a_h^\dagger = |0\rangle_h \langle 1|$, $b_c^\dagger = |0\rangle_c \langle 1|$ — операторы в двухуровневых подсистемах тёплого и холодного резервуаров. В пределе $\tau \to 0$, $\lambda \to \infty$, $\lambda^2\tau = const$ (такой предел называется в [187] моделью непрерывных измерений, в [107, 202] — моделью повторяющихся взаимодействий, в [227] — стробоскопическим пределом) динамика оператора плотности системы описывается уравнением ГКСЛ

$$\dot\rho(t) = -i[H_S, \rho(t)] + \mathcal{D}_h(\rho(t)) + \mathcal{D}_c(\rho(t)), \tag{1.35}$$

где $\mathcal{D}_h$ и $\mathcal{D}_c$ — диссипаторы, связанные с взаимодействием с тёплым и холодным резервуаром соответственно:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_h(\rho) &= \gamma_h \left( a\rho a^\dagger - \frac{1}{2}\{a^\dagger a, \rho\} + e^{-\beta_h E_A} \left( a^\dagger \rho a - \frac{1}{2}\{aa^\dagger, \rho\} \right) \right), \\
\mathcal{D}_c(\rho) &= \gamma_c \left( b\rho b^\dagger - \frac{1}{2}\{b^\dagger b, \rho\} + e^{-\beta_h E_B} \left( b^\dagger \rho b - \frac{1}{2}\{bb^\dagger, \rho\} \right) \right),
\end{aligned} \tag{1.36}$$

где $\gamma_h, \gamma_c > 0$ — некоторые константы (пропорциональные $\lambda^2$). В данном случае поток тепла в тёплый (холодный) резервуар связан с переходом не между уровнями энергии всей системы, а с переходом между уровнями энергии подсистемы A (B). Например, переход из возбуждённого состояние в основное в подсистеме A отвечает переходу из основного состояния в возбуждённое в двухуровневой системе, относящейся к тёплому резервуару, т.е. приращению $E_A$ энергии резервуара и, соответственно, приращению $\Delta s_{Ah} = \beta_h E_A$ энтропии резервуара. В соответствии с этим определим

$$\begin{aligned}
L_1 &= \sqrt{\gamma_h}\, a, \quad & L_{\tilde 1} = L_3 &= e^{-\beta_h E_A/2} \sqrt{\gamma_h}\, a^\dagger, \\
L_2 &= \sqrt{\gamma_c}\, b, \quad & L_{\tilde 2} = L_4 &= e^{-\beta_c E_B/2} \sqrt{\gamma_c}\, b^\dagger,
\end{aligned}$$

$\Delta s_1 = \beta_h E_A$ и $\Delta s_2 = \beta_c E_B$. Тогда условия (1.20) выполнены и

$$J(\rho) = \beta_h E_A \gamma_h [\mathrm{Tr}(a^\dagger a \rho) - e^{-\beta_h E_A} \mathrm{Tr}(aa^\dagger \rho)] + \beta_c E_B \gamma_c [\mathrm{Tr}(b^\dagger b \rho) - e^{-\beta_c E_B} \mathrm{Tr}(bb^\dagger \rho)].$$

Данное выражение для потока энтропии из системы в резервуар рассматривалось в [110], здесь мы его привели как пример применения предложенных общих формул (1.21) и (1.22).

Что же касается адиабатического и неадиабатического вкладов, то численные расчёты показывают, что в данном случае адиабатический вклад в производство энтропии может быть отрицательным.

**Замечание 1.3.** Уравнение (1.35) с диссипаторами (1.36) возникает также и в режиме слабой связи, но в так называемом локальном подходе к построению уравнения ГКСЛ. Локальный подход может быть обоснован строго при малых $\nu$ в рамках теории возмущений по этому параметру [6, в списке публикаций автора]. Локальный подход соответствует нулевому порядку теории возмущений. Для определения производства энтропии в рамках локального подхода можно воспользоваться формулой (1.31), которая верна для режима слабой связи, однако первый нетривиальный член разложения этого выражения по $\nu$ имеет порядок $\nu^2$. Следовательно, для получения корректного нетривиального выражения для производства энтропии необходимо выписать поправки к локальным диссипаторам (1.36) до членов порядка $\nu^2$. Эти поправки и выражение для производства энтропии получены в [6, в списке публикаций автора] и будут рассмотрены в самом конце этой главы, см. формулу (1.49).

## 1.5 Нахождение стационарных решений уравнения ГКСЛ при помощи функционала производства энтропии

Как и для других автономных обыкновенных дифференциальных уравнений, одной из важнейших задач для уравнения ГКСЛ является поиск стационарных решений. Уравнение ГКСЛ линейно, поэтому поиск стационарных решений сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. Тем не менее, аналитическое нахождение стационарных решений даже для низкоразмерных систем (например, мы будем рассматривать размерность $n = 4$) представляет существенные трудности: решение системы линейных уравнений «в лоб» при-

водит к чрезвычайно громоздким выражениям, с которыми практически невозможно работать.

В этом разделе будет продемонстрировано, как функционал $\Pi$ можно использовать для нахождения стационарных решений. Причём, если в разделе 1.4 мы приводили примеры функционалов $\Pi$, которые действительно соответствуют производству энтропии с физической точки зрения, то в этом разделе нас интересует этот функционал лишь как математический инструмент. В одном из примеров этого раздела мы введём функционал $\Pi$, который не соответствует физическому производству энтропии, но который позволит найти стационарные решения для простой квантовой термодинамической системы, для которой стационарные решения не были известны ранее.

Результаты этого раздела основываются на следующих двух следствиях из теоремы 1.1:

**Следствие 1.2.** *Пусть (1.23) — спектральное разложение произвольного оператора плотности $\rho$. Равенство*

$$p_i e^{-\Delta s_k} = p_j \tag{1.37}$$

*для всех троек $(i, j, k)$, для которых $L_k^{ij} \equiv \langle e_i|L_k|e_j\rangle \neq 0$, или, эквивалентно,*

$$L_k\rho = \rho L_k e^{-\Delta s_k} \tag{1.38}$$

*для всех $k$ есть необходимое и достаточное условие обращения функционала $\Pi$ в нуль.*

Следствие непосредственно вытекает из последнего выражения в доказательстве теоремы 1.1. Из условия (1.38) также следует

$$[L_k^\dagger L_k, \rho] = [L_k L_k^\dagger, \rho] = 0 \tag{1.39}$$

для всех $k$.

Как нетрудно видеть, условие (1.38) в совокупности с (1.20) означает, что диссипативная (негамильтонова) часть уравнения ГКСЛ (1.16) обращается в нуль. Если из условия (1.38) также следует $[H, \rho] = 0$, то функционал $\Pi$ обращается в нуль только на стационарных состояниях. Обратное, вообще говоря,

неверно: могут быть стационарные состояния, для которых функционал $\Pi$ в нуль не обращается.

**Теорема 1.4.** *Пусть*

*а) выполнены условия (1.20),*

*б) операторы $L_k$ и $H$ в уравнении ГКСЛ таковы, что из равенства (1.38) для всех $k$ следует $[H, \rho] = 0$,*

*в) адиабатический вклад в производство энтропии равен нулю, то есть функционал $\Pi$ можно представить в виде*

$$\Pi(\rho) = -\frac{d}{dt} D\left(e^{t\mathcal{L}}\rho \| \rho^{\mathrm{st}}\right)\Big|_{t=0} = -\operatorname{Tr} \mathcal{L}(\rho)[\ln\rho - \ln\rho^{\mathrm{st}}], \tag{1.40}$$

*где $\rho^{\mathrm{st}}$ — некоторое стационарное решение уравнения ГКСЛ. Тогда оператор плотности $\rho$ — стационарное решение (не обязательно совпадающее с $\rho^{\mathrm{st}}$) тогда и только тогда, когда он удовлетворяет уравнениям (1.38) для всех $k$.*

*Доказательство.* По следствию 1.2 уравнение (1.38) для всех $k$ можно заменить на уравнение $\Pi(\rho) = 0$. Прямое утверждение теоремы ($\Pi(\rho) = 0$ только тогда, когда $\rho$ — стационарное состояние) уже доказано выше. Обратное утверждение непосредственно следует из (1.40): при $\mathcal{L}(\rho) = 0$ функционал $\Pi$ обращается в нуль. □

Теорема 1.4 обобщает результат Г. Шпона (H. Spohn) [290], сформулированный только для уравнений ГКСЛ, получаемых в пределе слабой связи системы с резервуаром, и только для случая, когда гиббсовское состояние с некоторой температурой является стационарным, т.е. система взаимодействует с одним резервуаром или с несколькими, но с одинаковой температурой.

Далее в этом разделе будут приведены примеры использования теоремы 1.4 для нахождения стационарных решений уравнений ГКСЛ. Все примеры будут связаны с уравнениями, получаемыми в пределе слабой связи системы с резервуаром. Данный класс уравнений ГКСЛ был описан в разделе 1.4.1. Для данного класса, как следствие (1.27), имеет место $[H, L_k^\dagger L_k] = 0$ для всех $k$. Также, если выполнено (1.38) и, следовательно, (1.39), то $[H, \rho] = 0$. Таким образом, условия а) и б) теоремы 1.4 выполнены. Поэтому, если выполнено и условие в),

то нахождение стационарных решений сводится к решению системы уравнений (1.38) или, эквивалентно, (1.37).

Условие в) является существенным ограничением метода, но всё же метод позволяет получить стационарные решения для ряда интересных случаев, для которых до этого общий вид стационарных решений в аналитическом виде известен не был. Более того, в примере подраздела 1.5.3 нам удастся с помощью этого метода и дополнительного приёма найти (единственное) стационарное решение уравнения, для которого условие в) не выполнено.

### 1.5.1 Система с невырожденным спектром

Пусть все собственные значения и все боровские частоты $H_S$ невырожденны и система взаимодействует с тепловым резервуаром с обратной температурой $\beta$. Тогда динамика состояния системы удовлетворяет уравнению (1.32). Предположим также, что для каждого собственного значения $\varepsilon$ по крайней мере одно из чисел в множестве $\{c_{\varepsilon'\varepsilon}, c_{\varepsilon\varepsilon'}\}_{\varepsilon'\in\operatorname{spec} H_S}$ отлично от нуля. Мы говорили о том, что гиббсовское состояние (1.29) — стационарное. Докажем с помощью теоремы 1.4, что при этих условиях это единственное стационарное состояние. Это известный результат [22, 88, 89, 290, 292], так что цель этого подраздела — продемонстрировать метод в простейшем, хорошо известном случае. Производство энтропии имеет вид (1.30), так что все условия теоремы 1.4 выполнены и стационарность произвольного оператора плотности $\rho$ эквивалентна уравнениям (1.37) для спектрального разложения (1.23) этого оператора.

Равенство (1.37) переписывается в виде $p_j/p_i = e^{-\beta\omega}$, если $L_\omega^{ij} \neq 0$. Докажем, что собственные векторы $\rho$ совпадают с собственными векторами $H_S$. В самом деле, допустим, для некоторого собственного вектора $|e_i\rangle$ оператора $\rho$ выполнено $\langle e_i|\varepsilon\rangle \neq 0$ и $\langle e_i|\varepsilon'\rangle \neq 0$ для двух различных собственных значений $\varepsilon, \varepsilon' \in \operatorname{spec} H_S$. Пусть также $\langle e_j|\varepsilon''\rangle \neq 0$ для некоторых $\varepsilon'' \in \operatorname{spec} H_S$ и $j$. Тогда

$$\frac{p_j}{p_i} = e^{-\beta(\varepsilon''-\varepsilon)} = e^{-\beta(\varepsilon'-\varepsilon)},$$

что невозможно ввиду того, что все разности уровней энергии попарно различ-

ны. Поэтому собственные вектора $\rho$ совпадают с собственными векторами $H_S$. Если $|e_i\rangle = |\varepsilon\rangle$, то $p_i$ пропорционально $e^{-\beta\varepsilon}$. Таким образом, единственное стационарное состояние уравнения ГКСЛ — состояние Гиббса. Как мы сказали выше, этот результат хорошо известен. В следующих двух примерах мы рассматриваем более сложные случаи.

### 1.5.2 Система с вырожденным спектром

Рассмотрим систему со следующим гамильтонианом в пространстве $\mathbb{C}^4$:

$$H_S = \varepsilon(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) + \varepsilon'(|3\rangle\langle 3| + |4\rangle\langle 4|),$$

где $|1\rangle, \ldots, |4\rangle$ — некоторый ортонормированный базис $\mathbb{C}^4$, $\varepsilon' > \varepsilon$. Таким образом, мы имеем систему из двух двукратно вырожденных уровней энергии. Гамильтониан взаимодействия с некоторым резервуаром (вообще говоря, неравновесным) пусть имеет вид

$$H_I = (|1\rangle\langle 3| + |2\rangle\langle 4| + |3\rangle\langle 1| + |4\rangle\langle 2|) \otimes R,$$

где $R$ — некоторый оператор в пространстве резервуара. Мы не описываем гильбертово пространство резервуара, равно как и гамильтониан свободной динамики резервуара, поскольку формулы для $H_S$ и $H_I$ — это лишь некоторое пояснение к тому, в каких случаях возникает уравнение вида ГКСЛ, которое будет рассматриваться. Фактически мы рассматриваем именно уравнение ГКСЛ как данное, задача же заключается в нахождении его стационарных решений. Модель, которую мы сейчас рассматриваем, возникает при исследовании динамики открытых квантовых систем с вырожденным энергетическим спектром, и, в частности, явлений «запирания» квантовых когерентностей [87] и сверхпереноса энергии [6, 31], возникающих вследствие этой вырожденности.

Итак, в описываемом случае уравнение ГКСЛ принимает вид (здесь $\rho = \rho(t)$ для сокращения записи)

$$\dot\rho = -i[H,\rho] + \gamma^-\left(L\rho L^\dagger - \frac{1}{2}\{L^\dagger L, \rho\}\right) + \gamma^+\left(L^\dagger\rho L + \frac{1}{2}\{LL^\dagger, \rho\}\right),$$

где $\gamma^- > \gamma^+ > 0$ (точные выражения этих констант зависят от гамильтониана свободной динамики резервуара и от $R$) и

$$L = |1\rangle\langle 3| + |2\rangle\langle 4|\,.$$

Обозначим $\gamma^+/\gamma^- = \varpi$. Очевидное стационарное состояние —

$$\rho^{\mathrm{st}} = \frac{P_\varepsilon + \varpi P_{\varepsilon'}}{2(1+\varpi)}. \tag{1.41}$$

Функционал $\Pi$ можно записать в виде (1.40) со стационарным состоянием (1.41). Поэтому все условия теоремы 1.4 выполнены. В данном случае функционал $\Pi$ соответствует термодинамическому производству энтропии, если $\varpi = e^{-\beta(\varepsilon'-\varepsilon)}$, что соответствует равновесному резервуару с обратной температурой $\beta$.

Найдём полное семейство стационарных состояний. Вследствие (1.39), каждый собственный вектор является суперпозицией либо $|1\rangle$ и $|2\rangle$, либо суперпозицией $|3\rangle$ и $|4\rangle$. В свою очередь, произвольный единичный вектор в двухмерном комплексном пространстве представляется в виде (с точностью до несущественного фазового множителя)

$$|\theta,\varphi\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi} \end{pmatrix},$$

где $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$, $0 \leqslant \varphi < 2\pi$. Ортогональный ему единичный вектор есть $|\pi-\theta,\varphi+\pi\rangle$. Поэтому все стационарные состояния $\rho$ представляются в виде

$$\rho = p_1 P^{(1,2)}_{\theta,\varphi} + p_2 P^{(1,2)}_{\pi-\theta,\varphi+\pi} + p_3 P^{(3,4)}_{\theta',\varphi'} + p_4 P^{(3,4)}_{\pi-\theta',\varphi'+\pi},$$

где $P^{(a,b)}_{\theta,\varphi}$ — проектор на вектор $|\theta,\varphi\rangle_{a,b} = \cos\frac{\theta}{2}\,|a\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,e^{i\varphi}\,|b\rangle$, числовые неотрицательные коэффициенты $p_j$ в сумме дают единицу. Применим условие (1.37). Поскольку $P_{\varepsilon'}L = LP_\varepsilon = 0$, то из матричных элементов $L$ в базисе из собственных векторов $\rho$ ненулевыми могут быть только

$$\begin{aligned} &{}_{1,2}\langle\theta,\varphi|L|\theta',\varphi'\rangle_{3,4}, && {}_{1,2}\langle\pi-\theta,\varphi+\pi|L|\theta',\varphi'\rangle_{3,4}, \\ &{}_{1,2}\langle\theta,\varphi|L|\pi-\theta',\varphi'+\pi\rangle_{3,4}, && {}_{1,2}\langle\pi-\theta,\varphi+\pi|L|\pi-\theta',\varphi'+\pi\rangle_{3,4}. \end{aligned} \tag{1.42}$$

Если хотя бы три из этих матричных элементов отличны от нуля, то из (1.37) непосредственно следует, что $p_3 = p_4 = p_1\varpi = p_2\varpi$, т.е. снова получаем состояние (1.41). Чтобы получить другое стационарное состояние, надо приравнять два матричных элемента к нулю:

$$
\begin{aligned}
{}_{1,2}\langle\theta,\varphi|L|\theta',\varphi'\rangle_{3,4} &= \cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}e^{i(\varphi'-\varphi)} = 0,\\
{}_{1,2}\langle\pi-\theta,\varphi+\pi|L|\pi-\theta',\varphi'+\pi\rangle_{3,4} &= \sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2} + \cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2}e^{i(\varphi'-\varphi)} = 0,
\end{aligned}
$$

откуда получаем $\theta' = \pi - \theta$, $\varphi' = \varphi + \pi$ (формально при $\theta = 0, \theta' = \pi$ или $\theta = \pi, \theta' = 0$ углы $\varphi, \varphi'$ могут быть произвольным, но в этом случае выбор этих углов соответствует умножению вектора состояния на несущественный фазовый множитель). Из (1.37) получаем $p_4/p_1 = p_3/p_2 = \varpi$. Итого получаем полное семейство стационарных состояний уравнения ГКСЛ:

$$
\rho_{p,\theta,\varphi} = \frac{p}{1+\varpi}(P^{(1,2)}_{\theta,\varphi} + \varpi P^{(3,4)}_{\theta,\varphi}) + \frac{1-p}{1+\varpi}(P^{(1,2)}_{\pi-\theta,\varphi+\pi} + \varpi P^{(3,4)}_{\pi-\theta,\varphi+\pi}), \tag{1.43}
$$

$0 \leqslant p \leqslant 1$, $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$, $0 \leqslant \varphi < 2\pi$. При $p = 1/2$ получаем как частный случай состояние (1.41). Приравнивание к нулю других пар матричных элементов (1.42) не приводит к получению стационарных решений, не входящих в класс (1.43).

### 1.5.3 Система, взаимодействующая с двумя резервуарами

Рассмотрим два взаимодействующих кубита, т.е. квантовую систему в пространстве $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ с гамильтонианом $H_S$ (1.34), но (в отличие от раздела 1.4.2) взаимодействующую с резервуарами в режиме слабой связи. Собственные значения и собственные векторы этого гамильтониана имеют вид

$$
\begin{aligned}
&\varepsilon_{00} = 0, \quad |e_{00}\rangle = |0\rangle\otimes|0\rangle,\\
&\varepsilon_{01} = \frac{1}{2}\left(E_A + E_B - \sqrt{\Delta E + 4\nu^2}\right), \quad |e_{01}\rangle = \cos\alpha\,|0\rangle\otimes|1\rangle - \sin\alpha\,|1\rangle\otimes|0\rangle,\\
&\varepsilon_{10} = \frac{1}{2}\left(E_A + E_B + \sqrt{\Delta E + 4\nu^2}\right), \quad |e_{10}\rangle = \cos\alpha\,|1\rangle\otimes|0\rangle + \sin\alpha\,|0\rangle\otimes|1\rangle,\\
&\varepsilon_{11} = E_A + E_B, \quad |e_{11}\rangle = |1\rangle\otimes|1\rangle,
\end{aligned}
$$

где $\Delta E = E_A - E_B$, $\alpha = \operatorname{arctg}\frac{2\nu}{\Delta E}$. Соответственно, боровские частоты:

$$\omega_a = \varepsilon_{11} - \varepsilon_{01} = \varepsilon_{10} - \varepsilon_{00} = \frac{1}{2}\left(E_A + E_B + \sqrt{\Delta E + 4\nu^2}\right),$$
$$\omega_b = \varepsilon_{11} - \varepsilon_{10} = \varepsilon_{01} - \varepsilon_{00} = \frac{1}{2}\left(E_A + E_B - \sqrt{\Delta E + 4\nu^2}\right),$$

а также $-\omega_a$ и $-\omega_b$. Т.е. спектр $H_S$ невырожден, но двукратно вырожденны боровские частоты.

Пусть каждый кубит взаимодействует со своим тепловым резервуаром с обратными температурами $\beta_A$ и $\beta_B$, причём гамильтониан взаимодействия каждого кубита со своим резервуаром имеет вид

$$H_I^A = (a + a^\dagger) \otimes R_A, \quad H_I^B = (b + b^\dagger) \otimes R_B,$$

где $R_A$ и $R_B$ — операторы в пространстве соответствующего резервуара. Тогда уравнение ГКСЛ принимает вид

$$\dot\rho(t) = -i[H, \rho(t)] + \sum_{R=A,B}\sum_{f=a,b} \gamma_{Rf}\mathcal{D}_{Rf}(\rho(t)) \equiv \mathcal{L}(\rho(t)), \tag{1.44}$$

где $\gamma_{Rf} > 0$, $H$ диагонален в базисе $\{|e_{00}\rangle, |e_{01}\rangle, |e_{10}\rangle, |e_{11}\rangle\}$,

$$\mathcal{D}_{Rf}(\rho) = L_{Rf}\rho L_{Rf}^\dagger - \frac{1}{2}\{L_{Rf}^\dagger L_{Rf}, \rho\} + e^{-\beta_R\omega_f}\left(L_{Rf}^\dagger \rho L_{Rf} - \frac{1}{2}\{L_{Rf}L_{Rf}^\dagger, \rho\}\right),$$

$$\begin{aligned}
L_{Aa} &= |e_{01}\rangle\langle e_{01}|(a + a^\dagger)|e_{11}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{00}|(a + a^\dagger)|e_{10}\rangle\langle e_{10}| \\
&= \cos\alpha(|e_{01}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{10}|), \\
L_{Ab} &= |e_{10}\rangle\langle e_{10}|(a + a^\dagger)|e_{11}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{00}|(a + a^\dagger)|e_{01}\rangle\langle e_{01}| \\
&= \sin\alpha(|e_{10}\rangle\langle e_{11}| - |e_{00}\rangle\langle e_{01}|), \\
L_{Ba} &= |e_{01}\rangle\langle e_{01}|(b + b^\dagger)|e_{11}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{00}|(b + b^\dagger)|e_{10}\rangle\langle e_{10}| \\
&= \sin\alpha(-|e_{01}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{10}|), \\
L_{Bb} &= |e_{10}\rangle\langle e_{10}|(b + b^\dagger)|e_{11}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{00}|(b + b^\dagger)|e_{01}\rangle\langle e_{01}| \\
&= \cos\alpha(|e_{10}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{01}|).
\end{aligned}$$

Это уравнение рассматривалось, например, в работах [221,237], но стационарное решение в аналитическом виде не было найдено. Восполним этот пробел.

Если сопоставить данное уравнение с общим видом уравнения (1.16), то (мульти)индекс $k = (R, f, q)$ здесь задаётся индексом резервуара $R = A, B$, взаимодействию с которым соответствует данное слагаемое в уравнении ГКСЛ, индексом абсолютной величины боровской частоты $f = a, b$ (соответствуют $\omega_a$ и $\omega_b$) и знаком $q = \pm$ боровской частоты: $L_{(R,f,-)} = \sqrt{\gamma_{Rf}} L_{Rf}$, $L_{(R,f,+)} = \sqrt{\gamma_{Rf}} e^{-\beta_R \omega_f/2} L_{Rf}^\dagger$. Условия (1.20) удовлетворяются с $\tilde{k} = (R, f, -q)$ и $\Delta s_k = -q\beta_R\omega_f$. Тогда функционал $\Pi$ соответствует производству энтропии в термодинамике. Однако его нельзя представить в виде (1.40), и в стационарном состоянии производство энтропии оказывается отличным от нуля: стационарное состояние неравновесно. Поэтому непосредственно применить теорему 1.4 для нахождения стационарного состояния мы не можем. Однако эту трудность можно обойти.

Будем рассматривать матричные элементы операторов в базисе из собственных векторов $H_S$. Как нетрудно увидеть, внедиагональные матричные элементы правой части уравнения ГКСЛ $\langle e_{xy}|\mathcal{L}(\rho(t))|e_{x'y'}\rangle$, $(x', y') \neq (x, y)$, не зависят от диагональных элементов оператора плотности $\rho(t)$. Это означает, что динамика внедиагональных элементов оператора плотности не зависит от диагональных элементов. Можно убедиться, что, как и в уравнении (1.33), внедиагональные элементы экспоненциально стремятся к нулю, хотя и более сложным образом из-за вырожденности боровских частот. Следовательно, при нахождении стационарных состояний уравнения ГКСЛ (1.44) внедиагональные элементы оператора плотности можно считать нулевыми. Рассмотрим тогда следующее уравнение ГКСЛ:

$$\dot{\rho}(t) = \sum_{f=a,b} \mathcal{D}_f(\rho(t)), \tag{1.45}$$

$$\mathcal{D}_f(\rho) = \gamma_f^- \left( L_f \rho L_f^\dagger - \frac{1}{2}\{L_f^\dagger L_f, \rho\} \right) + \gamma_f^+ \left( L_f^\dagger \rho L_f - \frac{1}{2}\{L_f L_f^\dagger, \rho\} \right),$$

$$L_a = |e_{01}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{10}|, \quad L_b = |e_{10}\rangle\langle e_{11}| + |e_{00}\rangle\langle e_{01}|,$$

$$\gamma_a^- = \gamma_{Aa}\cos^2\alpha + \gamma_{Ba}\sin^2\alpha, \quad \gamma_a^+ = \gamma_{Aa}e^{-\beta_A\omega_a}\cos^2\alpha + \gamma_{Ba}e^{-\beta_B\omega_a}\sin^2\alpha,$$
$$\gamma_b^- = \gamma_{Bb}\cos^2\alpha + \gamma_{Ab}\sin^2\alpha, \quad \gamma_b^+ = \gamma_{Bb}e^{-\beta_B\omega_b}\cos^2\alpha + \gamma_{Ab}e^{-\beta_A\omega_b}\sin^2\alpha.$$

Как и для уравнения (1.44), динамика внедиагональных элементов оператора плотности для уравнения (1.45) не зависит от диагональных элементов, внедиагональные элементы оператора плотности экспоненциально стремятся к нулю. Если положить внедиагональную часть матрицы плотности $\rho(t)$ равной нулю, то правая часть уравнения (1.45) совпадёт с правой частью уравнения (1.44). Поэтому совпадают и стационарные состояния этих уравнений. К уравнению (1.45) мы и применим теорему 1.4.

Если сопоставить уравнение (1.45) с общим видом уравнения (1.16), то мультииндекс $k = (f, q)$ здесь задаётся индексом абсолютной величины боровской частоты $f = a, b$ и знаком $q = \pm$ боровской частоты: $L_{(f,-)} = \sqrt{\gamma_f^-} L_f$, $L_{(f,+)} = \sqrt{\gamma_f^+} L_f^\dagger$. Условия (1.20) здесь выполнены с $\tilde{k} = (f, -q)$ и $\Delta s_k = \ln(\gamma_f^q / \gamma_f^{-q})$. Произвольное состояние, диагональное в базисе из собственных векторов $H_S$, имеет вид

$$\rho = p_{00} P_{00} + p_{01} P_{01} + p_{10} P_{10} + p_{11} P_{11}, \tag{1.46}$$

где $P_{xy}$ — проектор на $|e_{xy}\rangle$, неотрицательные коэффициенты $p_{xy}$ в сумме дают единицу. Из условия (1.37) получаем соотношения

$$\begin{aligned} p_{11}/p_{01} = p_{10}/p_{00} = \gamma_a^+/\gamma_a^- \equiv \pi_a, \\ p_{11}/p_{10} = p_{01}/p_{00} = \gamma_b^+/\gamma_b^- \equiv \pi_b. \end{aligned} \tag{1.47}$$

Непосредственной подстановкой в (1.45) убеждаемся, что состояние (1.46) с условиями (1.47) — действительно стационарное решение уравнения (1.45) и, следовательно, (1.44). Находя $p_{00}, \ldots, p_{11}$ в явном виде, получаем стационарное решение

$$\rho^{\mathrm{st}} = Z^{-1}(P_{00} + \pi_b P_{01} + \pi_a P_{10} + \pi_a \pi_b P_{11}), \tag{1.48}$$

где $Z = (1 + \pi_a + \pi_b + \pi_a \pi_b)$. Тогда, как нетрудно видеть, функционал $\Pi$ с отображением $k \mapsto \tilde{k}$ и числами $\Delta s_k$, указанными выше, можно представить в виде (1.40). Поэтому условия теоремы 1.4 выполнены и, ввиду того что (1.48) — единственное решение, удовлетворяющее необходимым соотношениям (1.47) (вместе с условием единичности следа $\rho$), найденное стационарное решение единственно.

**Замечание 1.4.** Представляет интерес величина потока энергии из резервуара $A$ в резервуар $B$ в стационарном состоянии:

$$\begin{aligned} J^{\mathrm{st}}_{A\to B} &= \mathrm{Tr}\{H_S(\mathcal{D}_{Aa}+\mathcal{D}_{Ab})(\rho^{\mathrm{st}})\} = -\,\mathrm{Tr}\{H_S(\mathcal{D}_{Ba}+\mathcal{D}_{Bb})(\rho^{\mathrm{st}})\} = \\ &= Z^{-1}[\gamma_{Aa}\omega_a(1+\pi_b)(e^{-\beta_A\omega_a}-\pi_a^{-1})\cos^2\alpha + \\ &+ \gamma_{Ab}\omega_b(1+\pi_a)(e^{-\beta_A\omega_b}-\pi_b^{-1})\sin^2\alpha]. \end{aligned}$$

Знак $J^{\mathrm{st}}_{A\to B}$ совпадает со знаком $\Delta\beta = \beta_B - \beta_A$, что находится в согласии со вторым началом термодинамики: при различии температур тепло течёт из горячего резервуара в холодный.

В пределе малой константы связи между кубитами $\nu$ получаем формулу, выведенную в [6, в списке публикаций автора]:

$$J^{\mathrm{st}}_{A\to B} = \nu^2\left(\gamma_{Ba}\varepsilon_a\frac{1-e^{-E_A\Delta\beta}}{1+e^{E_A\beta_A}} + \gamma_{Ab}\varepsilon_b\frac{e^{-E_B\Delta\beta}-1}{e^{E_B\beta_B}+1}\right) + o(\nu^2). \tag{1.49}$$

# ГЛАВА 2
# КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ ЭВОЛЮЦИЯ НА ТОРЕ ЗА ПРЕДЕЛАМИ ВРЕМЕНИ ЭРЕНФЕСТА И ВЫРАВНИВАНИЕ ПЛОТНОСТИ

## 2.1 Предварительные сведения и результаты

### 2.1.1 Мотивация и содержание главы

В этой главе мы рассматриваем формально обратимую (унитарную) квантовую динамику, а именно квантовую динамику на торе, и показываем, в каком смысле, несмотря на обратимость динамики, можно говорить об установлении равновесных распределений на больших временах. Мы будем рассматривать динамику когерентных состояний, или квантовых волновых пакетов. Неформально говоря, это квадратично интегрируемые функции, которые существенно отличаются от нуля лишь на ограниченном множестве, то же верно и для их преобразований Фурье. То есть это функции, локализованные как в конфигурационном пространстве, так и в импульсном.

Динамика такого локализованного волнового пакета на коротких временах отражает динамику соответствующей классической частицы: центр волнового пакета движется вдоль классической траектории, при этом сам пакет постепенно расплывается. Характерный масштаб времени, на котором классическое описание динамики волнового пакета перестаёт работать, называется временем Эренфеста. Время Эренфеста оценивается как $O(\hbar^{-\gamma})$, где $\hbar$ — постоянная Планка, $0 < \gamma < 1$, для интегрируемых систем и $O(\ln \hbar^{-1})$ — для хаотических, см. строгие результаты в [109, 124, 138, 179, 180, 282]. Описание квазиклассической эволюции квантовых волновых пакетов на временах порядка времени Эренфеста и за пределами времени Эренфеста привлекает большое внимание исследователей [96–98, 117, 233, 234, 282, 283, 301, 311]. Квазиклассическая эволюция на

таких временах может быть получена при помощи одновременного предела постоянной Планка к нулю, а времени — к бесконечности. Такой предел иногда называют квазиклассическим пределом больших времён [117].

Один из подходов к исследованию квазиклассического предела больших времён связан с квазиклассическими мерами — квазиклассическим пределом мер Вигнера или, эквивалентно, Хусими на фазовом пространстве [130,170,199,239]. В работах [96–98, 233, 234] доказан целый ряд свойств квазиклассических мер, связанных с квантовой динамикой за пределами времени Эренфеста. Представляет интерес и явное вычисление квазиклассических мер для частных случаев. Например, в работах [233, 234] вычислены квазиклассические меры для так называемых состояний ВКБ (Вентцеля–Краммерса–Бриллюэна), а в работах [96, 234] — для когерентных состояний. В обоих случаях рассматривалась динамика на плоском торе $\mathbb{T}^d = \mathbb{R}^d/(2\pi\mathbb{Z}^d)$, а также на некоторых других компактных многообразиях.

В этой главе мы получим явные выражения для квазиклассических мер, связанных со свободной квантовой динамикой на плоском торе для всех масштабов времени. В отличие от вышеупомянутых результатов других работ, мы сначала не будем использовать сглаживание по времени. Это позволит лучше различить все этапы эволюции квантовых волновых пакетов и переходы между ними. В частности, наш метод позволит увидеть структуру так называемых полных и дробных квантовых возрождений.

Квантовая динамика систем с дискретным спектром обладает свойством почти периодичности, что можно считать квантовым аналогом теоремы Пуанкаре о возвращении [120]. Поэтому установления предельных распределений при больших временах в обычном смысле не происходит. Но результаты вышеупомянутых работ показывают установление предельного пространственного распределения на больших временах (в случае общего положения) вследствие дополнительного сглаживания по времени.

Для того чтобы установить связь между выравниванием пространственного распределения и сглаживанием по времени, в этой главе мы получим квазиклас-

сические меры сначала без сглаживании по времени, что само по себе будет новым результатом в этой области, и лишь затем введём сглаживание по времени, воспроизводя результаты указанных выше работ.

Одним из наиболее широко распространённых инструментов построения квазиклассических (коротковолновых, быстроосциллирующих) асимптотических решений квантовой (и классической волновой) механики является метод канонического оператора Маслова [56], активно развиваемый в настоящее время [35, 37]. Отдельно следует отметить недавние результаты о том, что локализованный волновой пакет можно также выразить через канонический оператор Маслова [36, 59], что означает, что решение задачи Коши для уравнения Шрёдингера с начальным локализованным волновым пакетом в квазиклассическом приближении можно построить при помощи этого метода. В частности, построены соответствующие решения для динамики на геометрическом графе и на графе, в котором вершины заменены на маломерные римановы многообразия [72, 85, 132]. Здесь мы не обращаемся к этому методу, а используем технику непосредственного анализа рядов Фурье (в которые раскладываются волновые функции на торе). Известны и другие работы, посвящённые анализу квантовой динамики через исследование рядов Фурье методами теории чисел [62, 63, 201].

Последующий текст этой главы организован следующим образом. В разделе 2.1.2 определяется основной объект изучения — свободная динамика квантовой частицы на плоском торе. Далее нам необходимо ввести понятие квазиклассической меры. Для этого необходимо ввести понятие когерентных состояний (раздел 2.1.3) и распределения Хусими (раздел 2.1.4), после чего в конце раздела 2.1.4 вводится понятие квазиклассической меры. После этого в разделе 2.1.5 вводится понятие распределения Вигнера и доказывается первый новый результат этой главы. Он заключается в эквивалентности определений квазиклассической меры через распределение Хусими и распределение Вигнера для динамики на торе. Для динамики в неограниченном пространстве это известный результат. Основные результаты главы (теоремы 2.1–2.3) доказываются в разделе 2.2. Основной является теорема 2.1, тогда как теоремы 2.2 и 2.3 — её следствия. Далее в

разделе 2.3 обсуждаются полученные результаты. В частности, в последнем подразделе 2.3.5 обсуждается связь полученных результатов с теоремами Козлова о диффузии и, следовательно, с основной тематикой диссертации.

### 2.1.2 Свободная квантовая эволюция на плоском торе

Свободная квантовая эволюция на плоском торе $\mathbb{T}^d = \mathbb{R}^d/(2\pi\mathbb{Z}^d)$ задаётся гамильтонианом (самосопряжённым оператором) $H = -\hbar^2\Delta$ с областью определения $W_2^2(\mathbb{T}^d)$ (пространство Соболева). Здесь $\Delta$ — оператор Лапласа, $\hbar > 0$ — постоянная Планка (в данной главе — не столько физическая константа, сколько формальный математический параметр).

В этой главе мы будем работать только с чистыми состояниями и поэтому под состоянием будем понимать вектор из $L^2(\mathbb{T}^d)$. Если $\psi(x)$ — функция из $L^2(\mathbb{T}^d)$, то мы будем писать как $\psi$, так и $|\psi\rangle$.

Пусть дано произвольное начальное состояние $\psi_0 \in L^2(\mathbb{T}^d)$, разложим его в ряд Фурье:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} c_k^{(0)} e^{ikx}.$$

Унитарная группа, порождаемая генератором $-iH/\hbar$, действует на $\psi_0$ следующим образом:

$$\psi_t(x) = e^{i\hbar t\Delta}\psi_0(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} c_k^{(0)} e^{ikx - i\hbar t k^2}, \tag{2.1}$$

$t \in \mathbb{R}$. Эволюция, задаваемая этой формулой, и будет изучаться в этой главе.

Если обе части первого равенства в (2.1) формально продифференцировать по времени, то мы получим уравнение Шрёдингера на плоском торе:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_t}{\partial t} = -\hbar^2\Delta\psi_t. \tag{2.2}$$

Однако формула (2.1) более общая, поскольку определена для произвольного начального состояния $\psi_0 \in L^2(\mathbb{T}^d)$, тогда как правая часть уравнения Шрёдингера определена, строго говоря, только для функций из области определения гамильтониана.

Из формулы (2.1) непосредственно следует, что всякое решение (2.2) периодично с периодом

$$T_\hbar = \frac{2\pi}{\hbar}, \tag{2.3}$$

т.е. $\psi_{t+T_\hbar} = \psi_t$. Время $T_\hbar$ называется *временем возрождения*. Эта периодичность — следствие интерференции и имеет чисто волновую природу. При $\hbar \to 0$ время возрождения стремится к бесконечности.

### 2.1.3 Когерентные состояния

Рассмотрим гладкую быстро убывающую функцию $\varphi(x)$, $x \in \mathbb{R}^d$, с единичной $L^2(\mathbb{R}^d)$-нормой и семейство функций из $L^2(\mathbb{R}^d)$ вида

$$\eta_{qp}^{(\hbar)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_\hbar^d}} \varphi\left(\frac{x-q}{\alpha_\hbar}\right) \exp\left\{\frac{ip(x-q)}{\hbar}\right\}, \tag{2.4}$$

где $(q,p) \in \mathbb{R}^{2d}$ и $\alpha_\hbar > 0$ — такая константа, зависящая от $\hbar$, что $\alpha_\hbar \to 0$ и $\hbar/\alpha_\hbar \to 0$ при $\hbar \to 0$ (например, $\alpha_\hbar = \sqrt{\hbar}$). Эти функции удовлетворяют общему определению когерентных состояний в $L^2(\mathbb{R}^d)$, данному в [204]: семейство функций, непрерывно зависящее от своих параметров $(q,p)$ и образующих непрерывное разложение единицы

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} |\eta_{qp}^{(\hbar)}\rangle \langle \eta_{qp}^{(\hbar)}| \, dqdp = 1. \tag{2.5}$$

Здесь равенство понимается в слабом смысле:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} \langle \psi | \eta_{qp}^{(\hbar)}\rangle \langle \eta_{qp}^{(\hbar)} | \chi\rangle \, dqdp = \langle \psi | \chi \rangle$$

для любых $\psi, \chi \in L^2(\mathbb{R}^d)$. В некотором смысле когерентное состояние $\eta_{qp}^{(\hbar)}$ — это квантовый объект, наиболее близкий к понятию классической частицы в точке фазового пространства $(q,p)$. А именно, так называемая квазиклассическая мера, о которых пойдёт речь далее, для состояний $\eta_{q_0p_0}^{(\hbar)}$, соответствуют ($2d$-мерной) дельта-функции $\delta(q-q_0)\delta(p-p_0)$. Эволюция этой квазиклассической меры на

коротких временах также, как можно показать, соответствует классической фазовой траектории. Мы докажем эти утверждения для случая конфигурационного пространства $\mathbb{T}^d$.

Частным случаем когерентных состояний являются гауссовы когерентные состояния, которые соответствуют следующему выбору функции $\varphi$:

$$\varphi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{4}}} e^{-x^2/4}. \tag{2.6}$$

В этом случае $\alpha_\hbar$ и $\hbar/(2\alpha_\hbar)$ — это среднеквадратичные отклонения координаты и импульса соответственно. Их произведение даёт $\hbar/2$, т.е. гауссовы когерентные состояния минимизируют соотношения неопределённостей. Квазиклассическая динамика этих неопределённостей в случае ограниченного одномерного движения изучалась в работе [272].

Функции вида (2.4) также называют *квантовыми волновыми пакетами*, потому что они представляют собой суперпозиции монохроматических волн $\exp(ipx/\hbar)$ и они локализованны как в координатном, так и в импульсном пространствах.

На основе когерентных состояний вида (2.4) на $\mathbb{R}^d$ могут быть построены когерентные состояния на торе $\mathbb{T}^d$ следующего вида [145, 177, 208–210, 243] (будем отождествлять функции на $\mathbb{T}^d$ с $(2\pi\mathbb{Z}^d)$-периодическими функциями на $\mathbb{R}^d$):

$$\upsilon_{qp}^{(\hbar)}(x) = \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} \eta_{qp}^{(\hbar)}(x - 2\pi n), \tag{2.7}$$

где $(q, p) \in \Omega = \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$. Они также образуют непрерывное разложение единицы [11, 243]:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int\limits_\Omega |\upsilon_{qp}^{(\hbar)}\rangle \langle \upsilon_{qp}^{(\hbar)}| \, dqdp = 1. \tag{2.8}$$

Отметим, что функции $\upsilon_{qp}^{(\hbar)}$ как элементы $L^2(\mathbb{T}^d)$ не нормированы на единицу.

Однако их нормы стремятся к единице при $\hbar \to 0$. В самом деле,

$$\begin{aligned}
\|\upsilon_{qp}^{(\hbar)}\|^2 &= \int\limits_{\mathbb{T}^d} \overline{\upsilon_{qp}^{(\hbar)}(x)}\upsilon_{qp}^{(\hbar)}(x)\,dx = \sum_{n\in\mathbb{Z}^d}\int\limits_{\mathbb{T}^d} \overline{\eta_{qp}^{(\hbar)}(x-2\pi n)}\upsilon_{qp}^{(\hbar)}(x)\,dx = \\
&= \int\limits_{\mathbb{R}^d} \overline{\eta_{qp}^{(\hbar)}(x)}\upsilon_{qp}^{(\hbar)}(x)\,dx = \sum_{m\in\mathbb{Z}^d}\int\limits_{\mathbb{R}^d} \overline{\eta_{qp}^{(\hbar)}(x)}\eta_{qp}^{(\hbar)}(x-2\pi m)\,dx = \\
&= 1 + \sum_{m\in\mathbb{Z}^d\setminus\{0\}}\int\limits_{\mathbb{R}^d} \overline{\eta_{qp}^{(\hbar)}(x)}\eta_{qp}^{(\hbar)}(x-2\pi m)\,dx.
\end{aligned}$$

Мы воспользовались тем, что нормы функций $\eta_{qp}^{(\hbar)}(x) \in L^2(\mathbb{R}^d)$ равны единице. Поскольку функция $\varphi$ быстро убывает, последнее выражение стремится к единице.

Мы упомянули, что гауссовы когерентные состояния на $\mathbb{R}^d$ минимизируют соотношения неопределённостей. Соотношения неопределённостей требуют модификаций для компактных многообразий (например, тора) и ограниченных областей (например, бесконечно глубокой потенциальной ямы). Предложен ряд аналогов соотношений неопределённостей для этих случаев. Гауссовы когерентные состояния на торе минимизируют один из вариантов соотношений неопределённостей для тора [208, 209, 211]. Некоторые оценки среднеквадратичных отклонений координат и импульсов для этих состояний получены в [33].

### 2.1.4 Распределение Хусими

Для заданной функции $\psi \in L^2(\mathbb{T}^d)$ с единичной нормой определим следующее распределение вероятностей на фазовом пространстве $\Omega$:

$$H_\psi(q,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d}|\langle \upsilon_{qp}|\psi\rangle|^2.$$

Оно называется *распределением Хусими* (или *функцией Хусими*), связанным с $\psi$ [186, 189, 320]. Соответствующая мера является вероятностной: условие нормировки

$$\int\limits_\Omega H_\psi(q,p)\,dqdp = 1 \tag{2.9}$$

удовлетворяется вследствие разложения единицы когерентными состояниями (2.8). Однако частичные распределения координаты и импульса, т.е. $\int_{\mathbb{R}^d} H_\psi(q,p)dp$ и $\int_{\mathbb{T}^d} H_\psi(q,p)dq$ не совпадают с исходными квантовомеханическими распределениями.

**Замечание 2.1.** Тем не менее, распределение Хусими имеет физический смысл. Рассмотрим вероятностную операторнозначную меру $M$ вида

$$M(B) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int\limits_B |\upsilon_{qp}^{(\hbar)}\rangle \langle \upsilon_{qp}^{(\hbar)}| \, dqdp, \tag{2.10}$$

где $B \subset \Omega$ — произвольное борелевское множество в фазовом пространстве. Каждому борелевскому множеству отображение $M$ ставит в соответствие положительный оператор, причём $M(\Omega)$ есть тождественный оператор, также $M$ удовлетворяет свойству сигма-аддитивности. Такие объекты и называются вероятностными операторнозначными мерами [80,258]. В соответствии с формализмом квантовой механики вероятностную операторнозначную меру (2.10) можно интерпретировать как наблюдаемую, соответствующую одновременному приближённому измерению координаты и импульса. Наблюдаемые такого вида были впервые введены фон Нейманом [74]. Его мотивация была следующей: в классической механике одновременное измерение координаты и импульса возможно, следовательно, по принципу соответствия приблизительное одновременное измерение координаты и импульса должно быть возможно и в квантовой механике, причём ошибки измерений должны стремиться к нулю при $\hbar \to 0$. Если мы выберем гауссову функцию $\varphi(x)$ (2.6), то произведение ошибок измерений координаты и импульса равно $\hbar/2$, что минимизирует соотношения неопределённостей. Вероятность того, что результат такого совместного измерения принадлежит $B$, равна $\langle\psi|M(B)|\psi\rangle$, где $\psi$ — состояние. Это означает, что распределение Хусими есть не что иное, как распределение вероятностей результатов этого измерения.

Рассмотрим равномерно ограниченное семейство функций $\{\psi_\hbar\}_{0<\hbar\leqslant\hbar_0} \subset L^2(\mathbb{T}^d)$ и обозначим соответствующие распределения Хусими через $H_{\psi_\hbar}$. В силу (2.9) распределения $H_{\psi_\hbar}$ также равномерно ограниченны. Следовательно (можно применить стандартные рассуждения из функционального анализа, см., например, [328, теорема 5.2]), существует бесконечно

малая последовательность $\{\hbar_n\}$, для которой последовательность мер $H_{\psi_{\hbar_n}} dqdp$ сходится, т.е. выполнено

$$\lim_{n\to\infty} \int\limits_{\Omega} H_{\psi_{\hbar_n}}(q,p) a(q,p)\, dqdp = \int\limits_{\Omega} a(q,p)\mu(dqdp) \tag{2.11}$$

для всех функций $a \in C_0^\infty(\Omega)$ (бесконечно дифференцируемых функций с компактным носителем) и некоторой меры Радона $\mu$. Меры $\mu$, которые могут быть получены таким образом, называются *квазиклассическими* [98, 170, 171, 233, 240, 328].

**Замечание 2.2.** Постоянная Планка $\hbar$ — это фундаментальная физическая константа размерности действия. Поэтому, строго говоря, она не может стремиться к нулю. Этот формальный математический предел означает, что постоянная Планка много меньше других величин размерности действия, возникающих в конкретной задаче. В разделе 2.3.4 будет дано более «физическое» описание различных предельных случаев.

### 2.1.5 Распределение Вигнера

Следуя [171] и [240], мы определили квазиклассические меры через распределение Хусими. В эквивалентном подходе, использованном, например, в [98, 170, 233, 328], квазиклассические меры определяются через распределение Вигнера. В этом разделе мы докажем эквивалентность этих подходов для случая конфигурационного пространства $\mathbb{T}^d$.

Для произвольной функции $\psi \in L^2(\mathbb{T}^d)$ распределение Вигнера в фазовом пространстве $\Omega$ можно определить следующим образом [186, 320]:

$$\begin{aligned} W_\psi(q,p) &= \frac{1}{(\pi\hbar)^d} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(q+x)}\psi(q-x) \exp\left(\frac{2ipx}{\hbar}\right) dx = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{j,k\in\mathbb{Z}^d} \overline{c_j} c_k e^{i(k-j)q}\, \delta\left(p - \frac{\hbar}{2}(k+j)\right), \end{aligned} \tag{2.12}$$

где $c_k$ — коэффициенты Фурье функции $\psi(x) = (2\pi)^{-d/2} \sum_k c_k e^{ikx}$, $\delta(\cdot)$ — дельта-функция Дирака и $(q,p) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$. Важное свойство распределения Вигнера

заключается в том, что, в отличие от распределения Хусими, частичные распределения по $q$ и по $p$ совпадают с соответствующими квантовомеханическими распределениями вероятностей:

$$\int\limits_{\mathbb{R}^d} W_\psi(q,p)\,dp = |\psi(q)|^2, \qquad \int\limits_{\mathbb{T}^d} W_\psi(q,p)\,dq = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} |c_k|^2 \delta(p-\hbar k).$$

Однако распределение Вигнера в общем случае не обладает свойством неотрицательности. По этой причине его иногда называют квазивероятностным распределением.

**Замечание 2.3.** Итак, каждое из двух рассмотренных классических распределений, сопоставляемых квантовому состоянию, имеют определённые недостатки. Недостатком распределения Хусими является то, что частичные распределения положения и импульса по отдельности не совпадают с квантовомеханическими распределениями. Недостатком распределения Вигнера является нарушение свойства неотрицательности. Есть и другие варианты сопоставления квантовому состоянию классического распределения [186].

Для того чтобы преодолеть недостатки различных распределений в фазовом пространстве, получаемых из стандартного квантовомеханического описания, в работах [7, 236] предложено томографическое представление квантовой механики. В этом представлении квантовому состоянию сопоставляется не одно распределение, а их непрерывное семейство. Взаимосвязь между томографическим представлением и распределением Хусими обсуждается в [5].

Но здесь нам интересна не сама по себе формулировка квантовой механики на языке классических распределений, а квазиклассический предел и, более конкретно, изучение квазиклассических мер. С этой точки зрения, как мы это покажем для случая тора (для случая неограниченного пространства это известно), подходы на основе распределений Вигнера и Хусими эквивалентны. В квазиклассическом пределе указанные недостатки этих распределений исчезают: распределение Вигнера стремится к неотрицательному распределению, а пределы частичных распределений положения и импульса для распределения Хусими совпадают с пределами соответствующих квантовомеханических распре-

делений. Также, как мы указали выше в замечании 2.1, распределение Хусими имеет физический смысл.

Снова рассмотрим равномерно ограниченное семейство функций $\{\psi_\hbar\}_{0<\hbar\leqslant\hbar_0} \subset L^2(\mathbb{T}^d)$ и обозначим соответствующие распределения Вигнера через $W_{\psi_\hbar}$. Выполнено следующее неравенство, которое мы будем использовать [171]:

$$\left|\int\limits_\Omega W_{\psi_\hbar}(q,p)a(q,p)\,dqdp\right| \leqslant C_d\|a\|_{C^{d+1}(\Omega)}, \tag{2.13}$$

где константа $C_d$ не зависит от $\hbar$.

Рассмотрим некоторую бесконечно малую последовательность $\{\hbar_n\}$ и предел

$$\lim_{n\to\infty}\int\limits_\Omega W_{\psi_{\hbar_n}}(q,p)a(q,p)\,dqdp. \tag{2.14}$$

Оказывается, что этот предел (если он существует) совпадает с (2.11). Обратное утверждение также верно. Для случая конфигурационного пространства $\mathbb{R}^d$ это утверждение доказано, например, в [171,240]. Докажем эквивалентность определений (2.11) и (2.14) для случая тора и для произвольных когерентных состояний вида (2.7), (2.4). Нам потребуется дополнительное свойство.

**Лемма 2.1.** *Распределение Хусими произвольной функции $\psi \in L^2(\mathbb{T}^d)$ можно выразить в виде*

$$H_\psi(q,p) = \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} W^{(\hbar)}_{0,0}(q'-q,p'-p)W_\psi(q',p')\,dq'dp', \tag{2.15}$$

*где $W^{(\hbar)}_{q,p}$ и $W_\psi$ обозначают распределения Вигнера когерентного состояния $\eta^{(\hbar)}_{qp} \in L^2(\mathbb{R}^d)$ (также определяется формулой (2.12)) и функции $\psi \in L^2(\mathbb{T}^d)$ соответственно.*

Если $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$, то это известное соотношение между функциями Вигнера и Хусими [186, 243]. Докажем его для $\mathbb{T}^d$. Прежде всего заметим, что распределение Вигнера $W^{(\hbar)}_{q,p}$ когерентного состояния — это гладкая функция (регулярная обобщённая функция), поэтому выражение (2.15) определено корректно (как действие обобщённой функции $W_\psi$ на основную функцию $W^{(\hbar)}_{q,p}$).

*Доказательство.* Имеем

$$
\begin{aligned}
H_\psi(q,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar\alpha_\hbar)^d} \sum_{n,m\in\mathbb{Z}^d} \int\limits_{\mathbb{T}^{2d}} dxdy\, \overline{\psi(x)}\psi(y)\times \\
\times \varphi\left(\frac{x-2\pi n-q}{\alpha_\hbar}\right) \overline{\varphi\left(\frac{y-2\pi m-q}{\alpha_\hbar}\right)}\times \\
\times \exp\left\{\frac{ip[(x-2\pi n)-(y-2\pi m)]}{\hbar}\right\} = \\
= \frac{1}{(2\pi\hbar\alpha_\hbar)^d} \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dxdy\, \overline{\psi(x)}\psi(y)\varphi\left(\frac{x-q}{\alpha_\hbar}\right) \overline{\varphi\left(\frac{y-q}{\alpha_\hbar}\right)} \exp\left[\frac{ip(x-y)}{\hbar}\right] = \\
= \frac{1}{(\pi\hbar\alpha_\hbar)^d} \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dq'dx\, \overline{\psi(q'+x)}\psi(q'-x)\times \\
\times \varphi\left(\frac{q'-q+x}{\alpha_\hbar}\right) \overline{\varphi\left(\frac{q'-q-x}{\alpha_\hbar}\right)} \exp\left[\frac{2ipx}{\hbar}\right] = \\
= \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dq'dp' \int\limits_{\mathbb{R}^d} \frac{dx}{(\pi\hbar)^d} \overline{\psi(q'+x)}\psi(q'-x) \exp\left[\frac{2ip'x}{\hbar}\right] \times \\
\times \int\limits_{\mathbb{R}^d} \frac{dy}{(\pi\hbar\alpha_\hbar)^d} \varphi\left(\frac{q'-q-y}{\alpha_\hbar}\right) \overline{\varphi\left(\frac{q'-q+y}{\alpha_\hbar}\right)} \exp\left[\frac{2i(p'-p)y}{\hbar}\right] = \\
= \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} W_\psi(q',p') W_{0,0}^{(\hbar)}(q'-q,p'-p)\, dq'dp',
\end{aligned}
$$

что и требовалось доказать. □

Обозначим

$$
W_{q_0,p_0}^{(\hbar)} = \frac{1}{(\pi\hbar)^d} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \overline{\eta_{q_0p_0}^{(\hbar)}(q+x)} \eta_{q_0p_0}^{(\hbar)}(q-x) \exp\left(\frac{2ipx}{\hbar}\right) dx
$$

распределение Вигнера, соответствующее волновой функции $\eta_{q_0p_0}^{(\hbar)}$. Его можно выразить в виде

$$
W_{q_0,p_0}^{(\hbar)}(q,p) = \left(\frac{\alpha_\hbar}{\hbar}\right)^d \left(\frac{1}{\alpha_\hbar}\right)^d f\left(\frac{q-q_0}{\alpha_\hbar}, \frac{\alpha_\hbar}{\hbar}(p-p_0)\right), \tag{2.16}
$$

где

$$
f(q,p) = \frac{1}{\pi^d} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \overline{\varphi(q+x)}\varphi(q-x) e^{2ipx}\, dx.
$$

Заметим, хоть формально нам это не понадобится, что, поскольку $\int\limits_{\mathbb{R}^d} f(q,p)dqdp = 1$, из выражения (2.16) следует хорошо известное свойство когерентных состояний:

$$\lim_{\hbar\to 0} W^{(\hbar)}_{q_0,p_0}(q,p) = \delta(q-q_0)\delta(p-p_0),$$

т.е., квазиклассическая мера семейства функций $\eta^{(\hbar)}_{q_0p_0}$ — это мера Дирака в точке $(q_0,p_0)$. Это соответствует классической частице в точке фазового пространства $(q_0,p_0)$.

Мы готовы к доказательству основного утверждения этого подраздела.

**Утверждение 2.1.** *Существование предела (2.11) эквивалентно существования предела (2.14) и оба предела (в случае своего существования) совпадают.*

*Доказательство.* Имеем

$$\begin{aligned}
&\int\limits_{\Omega} H_{\psi_\hbar}(q,p)a(q,p)\,dqdp = \\
&= \int\limits_{\Omega} dqdp\,a(q,p) \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} W^{(\hbar)}_{0,0}(q'-q,p'-p)W_{\psi_\hbar}(q',p')\,dq'dp' = \\
&= \int\limits_{\Omega} dqdp\,a(q,p) \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} W^{(\hbar)}_{0,0}(q',p')W_{\psi_\hbar}(q'+q,p'+p)\,dq'dp' = \\
&= \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dq'dp'\,W^{(\hbar)}_{0,0}(q',p') \int\limits_{\Omega} W_{\psi_\hbar}(q,p)a(q-q',p-p').
\end{aligned}$$

Благодаря (2.16) мы можем переписать это как

$$\begin{aligned}
&\int\limits_{\Omega} H_{\psi_\hbar}(q,p)a(q,p)\,dqdp = \\
&\qquad = \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dq'dp' f(q',p') \int\limits_{\Omega} W_{\psi_\hbar}(q,p)a\left(q-\alpha_\hbar q', p-\frac{\hbar}{\alpha_\hbar}p'\right)dqdp.
\end{aligned}$$

Теперь, используя (2.13) и формулу Тейлора, получаем

$$\left|\int\limits_{\Omega} H_{\psi_\hbar}(q,p)a(q,p)\,dqdp - \int\limits_{\Omega} W_{\psi_\hbar}(q,p)a(q,p)\,dqdp\right| =$$

$$= \left|\int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dq'dp' f(q',p') \int\limits_{\Omega} W_{\psi_\hbar}(q,p)\left[a\left(q-\alpha_\hbar q', p-\frac{\hbar}{\alpha_\hbar}p'\right) - a(q,p)\right] dqdp\right| \leqslant$$

$$\leqslant \alpha_\hbar C_d \|q'\nabla_q a\|_{C^{d+1}(\Omega)} + \frac{\hbar}{\alpha_\hbar} C_d \|p'\nabla_p a\|_{C^{d+1}(\Omega)} \to 0$$

при $\hbar \to 0$, что и доказывает утверждение. □

## 2.2 Эволюция волновых пакетов на торе в квазиклассическом пределе больших времён

Определим волновой пакет, проэволюционировавший во времени до момента $t \in \mathbb{R}$:

$$\upsilon^{(\hbar)}_{q_0p_0,t} = e^{i\hbar t\Delta}\upsilon^{(\hbar)}_{q_0p_0}$$

и соответствующее распределение Хусими

$$H_{q_0,p_0,t}(q,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} |\,\langle \upsilon_{qp} | \upsilon_{q_0p_0,t}\rangle\,|^2.$$

Напомним также, что $T_\hbar$ обозначает время возрождения (2.3).

Мы будем рассматривать непрерывную, зависимую от $\hbar$ функцию $t_\hbar$ с различными вариантами асимптотического поведения. Сформулируем здесь общее условие, на которое часто будем ссылаться:

$$\hbar(t_\hbar - AT_\hbar) \to 0, \quad \frac{\hbar}{\alpha_\hbar}(t_\hbar - AT_\hbar) \to B \tag{2.17}$$

для некоторых $A \in \mathbb{R}$ и $B \in [-\infty, +\infty]$.

**Теорема 2.1.** *1. Пусть $t_\hbar$ удовлетворяет одному из следующих условий: а) (2.17) с иррациональным $A$ и произвольным $B$, б) (2.17) с $B = \infty$ и произвольным $A$, или в) $\hbar t_\hbar \to +\infty$. Тогда*

$$\lim_{\hbar\to 0} H_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p) = \frac{1}{(2\pi)^d}\,\delta(p-p_0). \tag{2.18}$$

*2. Пусть $t_\hbar$ удовлетворяет (2.17) с $|B| < \infty$ и рациональным $A$, которое выражается в виде несократимой дроби как $A = M/N$ (если $A = 0$, то полагаем по определению $M = 0$ и $N = 1$). Тогда*

$$\lim_{\hbar\to 0}\{H_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p) - \frac{1}{N'}\sum_{k\in[N']^d}\delta_B\left(q - q_0 - 2p_0(t_\hbar - AT_\hbar) - \Delta q_0 + \frac{2\pi k}{N'}\right)\delta(p-p_0)\} = 0. \tag{2.19}$$

*Здесь*

$$\delta_B(q) = \frac{1}{(2\pi)^d}\sum_{j\in\mathbb{Z}^d}\sigma_{Bj}e^{ijq},$$

$$\sigma_R = \int\limits_{\mathbb{R}^d}\varphi(x)\overline{\varphi(x-2R)}\,dx,$$

$[N'] = \{0,1,2,\ldots,N'-1\}$,

$$N' = \begin{cases} N & \text{для чётных } N,\\ \frac{N}{2} & \text{для нечётных } N,\end{cases} \qquad \Delta q_0 = \begin{cases} \frac{2\pi}{N}I, & N \equiv 2 \pmod 4,\\ 0, & \text{в противном случае},\end{cases}$$

*где* $I = (1,1,\ldots,1) \in \mathbb{Z}^d$.

**Замечание 2.4.** Если $B = 0$, то

$$\delta_B(q) = \delta_0(q) = \frac{1}{(2\pi)^d}\sum_{j\in\mathbb{Z}^d}\sigma_0 e^{ijq}.$$

В силу $\sigma_0 = \int|\varphi(x)|^2dx = 1$ имеем

$$\delta_0(q) = \frac{1}{(2\pi)^d}\sum_{j\in\mathbb{Z}^d}e^{ijq} = \sum_{j\in\mathbb{Z}^d}\delta(q-2\pi j),$$

где мы использовали известную формулу, связывающую периодическую дельта-функцию с бесконечной суммой экспонент [24]. Таким образом, мы получили периодическую дельта-функцию. Если $|B| > 0$, то $\delta_B$ — сглаженная (регуляризованная) $\delta$-функция.

**Теорема 2.2.** *Все квазиклассические меры $\mu$, соответствующие проэволюционировавшим волновым пакетам $\upsilon^{(\hbar)}_{qp,t_\hbar}$, имеют один из видов, описанных ниже.*

*1. Пусть $t_\hbar$ удовлетворяет одному из следующих условий: а) (2.17) с иррациональным $A$ и произвольным $B$, б) (2.17) с $B = \infty$ и произвольным $A$, или в) $\hbar t_\hbar \to +\infty$. Тогда*

$$\lim_{\hbar\to 0} H_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p)dqdp = \mu(dqdp) = \frac{1}{(2\pi)^d}\,\delta(p-p_0)\,dqdp. \tag{2.20}$$

*2. Пусть $t_\hbar$ удовлетворяет (2.17) с $|B| < \infty$ и рациональным $A = M/N$ (выраженным в виде несократимой дроби) и $p_0 = 0$. Тогда*

$$\lim_{\hbar\to 0} H_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p)dqdp = \mu(dqdp) = \frac{1}{N'}\sum_{k\in[N']^d} \delta_B\left(q - q_0 - \Delta q_0 + \frac{2\pi k}{N'}\right)\delta(p)\,dqdp. \tag{2.21}$$

*3. Пусть $t_\hbar$ удовлетворяет $t_\hbar - \frac{M}{N}T_\hbar \to \tau \in \mathbb{R}$. Тогда*

$$\lim_{\hbar\to 0} H_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p)dqdp = \mu(dqdp) = \\ = \frac{1}{N'}\sum_{k\in[N']^d} \delta\left(q - q_0 - 2p_0\tau - \Delta q_0 + \frac{2\pi k}{N'}\right)\delta(p-p_0)\,dqdp.$$

*4. Пусть $t_\hbar$ удовлетворяет (2.17) с рациональным $A = M/N$, $B \neq 0$, $B \neq \infty$ и $p_0 \neq 0$. Тогда для каждого $q_1 \in [0, 2\pi/N']$ существует такая бесконечно малая последовательность $\{\hbar_n\}$, что*

$$\lim_{n\to\infty} H_{q_0,p_0,t_{\hbar_n}}(q,p)dqdp = \mu(dqdp) = \frac{1}{N'}\sum_{k\in[N']^d} \delta_B\left(q - q_1 + \frac{2\pi k}{N'}\right)\delta(p-p_0)\,dqdp.$$

**Теорема 2.3.** *Рассмотрим функцию $t_\hbar = \lambda_\hbar t$, где $\lambda_\hbar \to \infty$ при $\hbar \to 0$.*

*1. Если $\hbar\lambda_\hbar/\alpha_\hbar \to \infty$ при $\hbar \to 0$, то для всех функций $a \in C_0^\infty(\Omega)$ и $b \in L^1(\mathbb{R})$ существует предел*

$$\lim_{\hbar\to 0} \int\limits_{\Omega\times\mathbb{R}} a(q,p)b(t)H_{q_0,p_0,\lambda_\hbar t}(q,p)\,dqdpdt = \langle a\rangle(p_0)\int\limits_{\mathbb{R}} b(t)\,dt, \tag{2.22}$$

*где*

$$\langle a\rangle(p_0) = \frac{1}{(2\pi)^d}\int\limits_{\mathbb{T}^d} a(q,p_0)\,dq.$$

*2. Если* $\hbar\lambda_\hbar/\alpha_\hbar \to B \in [0,+\infty)$*, то для всех функций* $a \in C_0^\infty(\Omega)$ *и* $b \in L^1(\mathbb{R})$*, существует предел*

$$\lim_{\hbar\to 0} \int\limits_{\Omega\times\mathbb{R}} a(q,p)b(t)H_{q_0,p_0,\lambda_\hbar t}(q,p)\,dqdpdt = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int\limits_0^T a^{(b,B)}(q+p_0t,p_0)\,dt, \quad (2.23)$$

*где*

$$a^{(b,B)}(q,p) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\sum_{j\in\mathbb{Z}^d} a_j(p)\left[\int\limits_{\mathbb{R}^d} dx \int\limits_{-\infty}^{+\infty} b(t)\varphi(x)\overline{\varphi(x-2Btj)}\,dt\right] e^{ijq}.$$

*В частности, если* $B=0$*, то*

$$\lim_{\hbar\to 0} \int\limits_{\Omega\times\mathbb{R}} a(q,p)b(t)H_{q_0,p_0,\lambda_\hbar t}(q,p)\,dqdpdt = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int\limits_0^T a(q+p_0t,p_0)dt \int\limits_{-\infty}^{+\infty} b(t)dt. \quad (2.24)$$

*Если* $p_0$ *не принадлежит «резонансному» множеству*

$$R = \{p\in\mathbb{R}^d \,|\, jp = 0 \text{ для некоторых } j\in\mathbb{Z}^d\backslash\{0\}\},$$

*то пределы (2.23) и (2.24) сводятся к (2.22).*

**Замечание 2.5.** Утверждения теоремы 2.3 доказаны в [96, 234] (некоторые случаи требуют несущественных модификаций представленных в этих работах доказательств). Мы доказываем здесь эту теорему для того, чтобы продемонстрировать, что известные результаты воспроизводятся как следствия теоремы 2.1. В отличие от результатов этих работ (теоремы 2.3), теоремы 2.1 и 2.2 не включают сглаживание по времени. Это позволяет лучше различить различные масштабы времени и переходы между ними — см. разделы 2.3.1 и 2.3.5 ниже. В частности, предложенный метод позволяет увидеть структуру квантовых возрождений.

*Доказательство теоремы 2.1.* Найдём коэффициенты Фурье когерентных состояний $\upsilon^{(\hbar)}_{q_0p_0}(x)$:

$$\upsilon^{(\hbar)}_{q_0p_0}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\sum_{k\in\mathbb{Z}^d} c^{(\hbar)}_{k,q_0p_0}e^{ikx}. \quad (2.25)$$

Имеем

$$\begin{aligned} c_{k,qp}^{(\hbar)} &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int\limits_{\mathbb{T}^d} \upsilon_{qp}^{(\hbar)}(x) e^{-ikx}\, dx = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} \int\limits_{\mathbb{T}^d} \eta_{qp}^{(\hbar)}(x-2\pi n) e^{-ik(x-2\pi n)}\, dx = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \eta_{qp}^{(\hbar)}(x) e^{-ikx}\, dx = \\ &= \left(\frac{\alpha_\hbar}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) \exp\left\{ i(\alpha_\hbar x + q)\left(\frac{p}{\hbar} - k\right) - \frac{ipq}{\hbar}\right\} dx. \end{aligned}$$

Используя эту формулу, мы можем посчитать скалярное произведение

$$\langle \upsilon_{qp} | \upsilon_{q_0 p_0, t}\rangle = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \overline{c_{k,qp}^{(\hbar)}} c_{k,q_0p_0}^{(\hbar)} e^{-i\hbar t k^2}.$$

Представим функцию $a(q,p) \in C_0^\infty(\Omega)$ в виде разложения в ряд Фурье по $q$ и интеграл Фурье по $p$:

$$a(q,p) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} a_j(p) e^{ijq} = \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \tilde{a}_j(\xi) e^{ijq + i\xi p} d\xi.$$

Тогда

$$\begin{aligned} &\int\limits_\Omega H_{q_0,p_0,t_\hbar}^{(\hbar)}(q,p) a(q,p)\, dqdp = \\ &\qquad = \frac{1}{(2\pi\sqrt{\hbar})^{2d}} \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} \int\limits_{\mathbb{R}^d} d\xi \tilde{a}_j(\xi) \int\limits_\Omega |\langle \upsilon_{qp} | \upsilon_{q_0p_0,t_\hbar}\rangle|^2 e^{ijq+i\xi p}\, dqdp. \end{aligned} \tag{2.26}$$

Посчитаем

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int\limits_\Omega |\langle \upsilon_{qp} | \upsilon_{q_0p_0,t_\hbar}\rangle|^2 e^{ijq+i\xi p}\, dqdp = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{\alpha_\hbar}{2\pi}\right)^{2d} \sum_{k,n\in\mathbb{Z}^d} \int\limits_{\mathbb{R}^{4d}} dxdx'dydy' \int\limits_\Omega dqdp\, \overline{\varphi(x)}\varphi(y)\varphi(x')\overline{\varphi(y')} \times \\ &\times \exp\left\{ -i(\alpha_\hbar x + q)\left(\frac{p}{\hbar} - k\right) + i(\alpha_\hbar y + q_0)\left(\frac{p_0}{\hbar} - k\right) - i\hbar t_\hbar k^2 + \right. \\ &\quad \left. + i(\alpha_\hbar x' + q)\left(\frac{p}{\hbar} - n\right) - i(\alpha_\hbar y' + q_0)\left(\frac{p_0}{\hbar} - n\right) + i\hbar t_\hbar n^2 + ijq + i\xi p \right\}. \end{aligned}$$

Интегрирование по $p$ даёт множитель

$$(2\pi)^d \delta\left(\xi - \frac{\alpha_\hbar}{\hbar}(x - x')\right) = \left(\frac{2\pi\hbar}{\alpha_\hbar}\right)^d \delta\left(x' - x + \frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right).$$

Интегрирование по $q$ даёт множитель $(2\pi)^d \delta_{j+k-n}$, где $\delta_x$ — символ Кронекера ($\delta_x = 1$ при $x = 0$ и $\delta_x = 0$ в противном случае). Таким образом, интегрирование $x'$ и суммирование по $n$ снимаются с подстановками $x' = x - \frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}$ и $n = k + j$. Имеем

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int\limits_\Omega |\langle \upsilon_{qp} | \upsilon_{q_0 p_0, t_\hbar} \rangle|^2 e^{ijq + i\xi p} dq dp = \\
&\quad = \left(\frac{\alpha_\hbar}{2\pi}\right)^d \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \int\limits_{\mathbb{R}^{3d}} dx dy dy' \, \overline{\varphi(x)} \varphi(y) \varphi\left(x - \frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right) \overline{\varphi(y')} \times \\
&\quad \times \exp\left\{ \frac{i\alpha_\hbar}{\hbar} p_0 (y - y') + ik[\alpha_\hbar(y' - y) + 2\hbar t_\hbar j + \hbar\xi] - i\alpha_\hbar (x - y') j + \right. \\
&\qquad \left. + ij(q_0 + \hbar t_\hbar j) + i\hbar j \xi \right\}.
\end{aligned}$$

Суммирование по $k$ даёт

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\alpha_\hbar}{2\pi}\right)^d \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \exp\{ik[\alpha_\hbar(y' - y) + 2\hbar t_\hbar j + \hbar\xi]\} = \\
&\quad = \alpha_\hbar^d \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \delta(\alpha_\hbar(y' - y) + 2\hbar t_\hbar j + 2\pi k + \hbar\xi) = \\
&\quad = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \delta\left(y' - y + \frac{2\hbar t_\hbar j + 2\pi k + \hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right).
\end{aligned}$$

Тогда интегрирование по $y'$ даёт

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int\limits_\Omega \langle \upsilon_{qp} | \upsilon_{q_0 p_0, t_\hbar} \rangle |^2 \exp(ijq + i\xi p) dq dp = \\
&\quad = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dx dy \, \overline{\varphi(x)} \varphi\left(x - \frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right) \varphi(y) \overline{\varphi\left(y - \frac{2\hbar t_\hbar j + 2\pi k + \hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right)} \times \\
&\quad \times \exp\left\{ ij(q_0 + 2p_0 t_\hbar) + i\xi p_0 + 2\pi k \frac{p_0}{\hbar} - i\hbar t_\hbar j^2 - i\alpha_\hbar j(x - y) - ij\hbar\xi \right\}.
\end{aligned}$$

Подстановка этого выражения в формулу (2.26) даёт

$$\int\limits_{\Omega} H^{(\hbar)}_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p)a(q,p)\,dqdp = \\ = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\sum_{j,k\in\mathbb{Z}^d} a_j(p_0-\hbar j)\int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dxdy\overline{\varphi(x)}\varphi\left(x-\frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right)\times \\ \times\varphi(y)\overline{\varphi\left(y-\frac{2\hbar t_\hbar j+2\pi k+\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right)}\times \\ \times\exp\left\{ij(q_0+2p_0t_\hbar)+2\pi k\frac{p_0}{\hbar}-i\hbar t_\hbar j^2-i\alpha_\hbar j(x-y)\right\}. \qquad (2.27)$$

Теперь заметим, что, поскольку $a\in C_0^\infty(\Omega)$, ряд Фурье $\sum_j a_j(p)$ равно как и ряд $\sum_j j\nabla a_j(p)$ сходится абсолютно и равномерно по $p$. Далее,

$$\begin{aligned} a_j(p_0-\hbar j) &= a_j(p_0)-\hbar j\nabla a_j(p_0-\theta_1\hbar j),\\ \varphi\left(x-\frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right) &= \varphi(x)-\frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\nabla\varphi\left(x-\theta_2\frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right), \end{aligned} \qquad (2.28а)$$

$$\exp\{-i\alpha_\hbar j(x-y)\} = 1-i\alpha_\hbar j(x-y)\exp\{-ij\theta_3\alpha_\hbar(x-y)\}, \qquad (2.28б)$$

где $0<\theta_{1,2,3}<1$. Если мы подставим (2.28) в (2.27), то, используя абсолютную и равномерную сходимость $\sum_j a_j(p)$ и $\sum_j j\nabla a_j(p)$ и быстрое убывание $\varphi$, можно легко показать, что бесконечно малые члены в (2.28) можно отбросить в пределе $\hbar\to 0$. Например,

$$\hbar\Big|\sum_{j,k\in\mathbb{Z}^d} j\nabla a_j(p_0-\theta_1\hbar j)\int\limits_{\mathbb{R}^{2d}} dxdy\,\overline{\varphi(x)}\varphi\left(x-\frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right)\times \\ \times\varphi(y)\overline{\varphi\left(y-\frac{2\hbar t_\hbar j+2\pi k+\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right)}\times \\ \times\exp\left\{ij(q_0+2p_0t_\hbar)+2\pi k\frac{p_0}{\hbar}-i\hbar t_\hbar j^2-i\alpha_\hbar j(x-y)\right\}\Big| \leqslant \\ \leqslant \hbar C\int\limits_{\mathbb{R}^d}\left|\overline{\varphi(x)}\varphi\left(x-\frac{\hbar\xi}{\alpha_\hbar}\right)\right|dx\max_{z\in\mathbb{R}^d}\sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\int\limits_{\mathbb{R}^d}\left|\varphi(y)\overline{\varphi\left(y-z-\frac{2\pi k}{\alpha_\hbar}\right)}\right|dy\to 0,$$

где $C = \max_p \sum_j |j\nabla a_j(p)|$. Тогда в силу $\int |\varphi(x)|^2 dx = 1$ мы получаем

$$\lim_{\hbar\to 0}\Big[\int\limits_{\Omega} H^{(\hbar)}_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p)a(q,p)\,dqdp - \\ - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\sum_{j,k\in\mathbb{Z}^d} a_j(p_0)\int\limits_{\mathbb{R}^d} dx\,\varphi(x)\overline{\varphi\left(x-\frac{2\hbar t_\hbar j+2\pi k}{\alpha_\hbar}\right)}\times \\ \times\exp\left\{ij(q_0+2p_0t_\hbar)+2\pi k\frac{p_0}{\hbar}-i\hbar t_\hbar j^2\right\}\Big] = 0. \quad (2.29)$$

Рассмотрим теперь все предельные случаи. Во-первых, как видим, мы получили меру Дирака для импульса, что было ожидаемым в силу сохранения импульса.

Если $A$ — целое число и $|B| < \infty$, то в суммировании по $k$ в (2.29) остаётся только член с $k = -2A$ (иначе интеграл по $x$ стремится к нулю из-за быстрого убывания $\varphi$). Как можно заметить, мы получили формулу (2.19) для соответствующего случая.

Если или $B = \infty$, или $A$ иррационально, или $\hbar t_\hbar \to \infty$, то в двойной сумме (2.29) только член с $j = k = 0$ остаётся в пределе ненулевым. Это соответствует равномерному пространственному распределению. Мы получили формулу (2.18).

Пусть теперь $A = \frac{M}{N}$ (рациональное число, выраженное в виде несократимой дроби) и $|B| < \infty$. Интеграл (2.29) не стремится к нулю тогда и только тогда, когда $\frac{2Mj}{N} + k = 0$. Соответственно, в суммировании по $j$ ненулевыми остаются в пределе только слагаемые с $j = N'\ell$, $\ell \in \mathbb{Z}^d$, где $N' = N$ для нечётных $N$ и $N' = \frac{N}{2}$ для чётных $N$. В суммировании по $k$ ненулевым в пределе остаётся только слагаемое с $k = -\frac{2Mj}{N}$.

Рассмотрим слагаемое $-i\hbar t_\hbar j^2$ в экспоненте в правой части (2.29). Если $N$ нечётно, то

$$\hbar t_\hbar j^2 \sim 2\pi\frac{M}{N}(N\ell)^2 = 2\pi MN\ell^2 \in 2\pi\mathbb{Z}^d$$

($f \sim g$ означает $\lim f/g = 1$) и это слагаемое можно отбросить. Если $N$ чётно, то

$$\hbar t_\hbar j^2 \sim 2\pi\frac{M}{N}\left(\frac{N\ell}{2}\right)^2 = \pi\frac{MN\ell^2}{2}.$$

Если $N$ делится на четыре, то это число опять принадлежит $2\pi\mathbb{Z}^d$ и может быть отброшено. Если $N$ чётно, но не делится на четыре, то $M$ нечётно и

$$\exp\left\{-i\hbar t_\hbar j^2\right\} \sim \exp\left\{-i\pi\frac{MN\ell^2}{2}\right\} = (-1)^{N'\ell I} = \exp\left\{i\pi N'\ell I\right\}.$$

Таким образом, второе слагаемое в предельных выражениях в (2.29) можно переписать в виде

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\sum_{\ell\in\mathbb{Z}^d}\sigma_{BN'\ell}a_{N'\ell}(p_0)\exp\left\{iN'\ell[q_0+2p_0(t_\hbar-AT_\hbar)]+\gamma i\pi N'\ell I\right\} = \\
&= \frac{1}{N'}\sum_{k\in[N']^d} a^{(B)}\left(q_0+2p_0(t_\hbar-AT_\hbar)+\gamma\pi I+\frac{2\pi k}{N'},p_0\right) = \\
&= \frac{1}{N'}\sum_{k\in[N']^d} a^{(B)}\left(q_0+2p_0(t_\hbar-AT_\hbar)+\Delta q_0+\frac{2\pi k}{N'},p_0\right), \qquad (2.30)
\end{aligned}$$

где $\gamma = 1$ при $N \equiv 2 \pmod 4$ и $\gamma = 0$ в противном случае,

$$a^{(B)}(q,p) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\sum_{j\in\mathbb{Z}^d}\sigma_{Bj}a_j(p)e^{ijq}. \qquad (2.31)$$

Чтобы удостовериться в верности первого равенства в (2.30), мы можем использовать формулу (2.31) и заметить, что все слагаемые, кроме $j = N'\ell$ уничтожаются. Замена $\pi$ на $\frac{2\pi}{N}$ во втором равенстве в (2.30) (напомним, что $\Delta q_0 = \gamma\frac{2\pi}{N}I$) справедлива ввиду $k = (N'+1)/2$,

$$\pi + \frac{2\pi k}{N'} = \pi + \frac{2\pi}{N'}\frac{N'+1}{2} = 2\pi + \frac{2\pi}{N},$$

и $(2\pi\mathbb{Z}^d)$-периодичности $a^{(B)}(q,p)$ относительно $q$. Итак, мы получаем

$$\begin{aligned}
\lim_{\hbar\to 0}\Bigg[\int_\Omega H^{(\hbar)}_{q_0,p_0,t_\hbar} \quad & (q,p)a(q,p)\,dqdp - \\
- \quad & \frac{1}{N'}\sum_{k\in[N']^d} a^{(B)}\left(q_0+2p_0(t_\hbar-AT_\hbar)+\Delta q_0+\frac{2\pi k}{N'},p_0\right)\Bigg],
\end{aligned}$$

т.е., формулу (2.19). Таким образом, теорема полностью доказана. □

*Доказательство теоремы 2.2.* Это следствие теоремы 2.1. В самом деле, рассмотрим слагаемое $2p_0(t_\hbar - T_\hbar)$ в аргументе $\delta_B$ в (2.19). Вообще говоря, сам

этот член не имеет предела при $\hbar \to 0$. В первых трёх случаях утверждения теоремы 2.2 мы избавляемся от влияния этого «плохого» слагаемого разными способами. Влияние этого слагаемого исчезает либо в случае равномерного пространственного распределения, когда $\delta_B$ не зависит от пространственного аргумента, либо в случае $p_0 = 0$, либо в случае, когда $t_\hbar - T_\hbar$ сходится к константе. В противном случае (последний случай теоремы) не существует предела при $\hbar \to 0$, но для всякого $q_1 \in [0, \frac{2\pi}{N'}]$ мы можем найти такую бесконечно малую последовательность $\hbar_n \to 0$, что существует предел $\lim\limits_{n\to\infty} H^{(\hbar_n)}_{q_0,p_0,t_{\hbar_n}}(q,p)dqdp$. В самом деле, достаточно выбрать такую последовательность $\hbar_n$, что $2p_0(t_{\hbar_n} - T_{\hbar_n}) = q_1 - q_0 - \Delta q_0 + \frac{2\pi n}{N'}$. Это возможно в силу того, что $p_0 \neq 0$, $t_\hbar - AT_\hbar \to \infty$, и того, что $t_\hbar - AT_\hbar$ — непрерывная функция $\hbar$. □

*Доказательство теоремы 2.3.* Рассмотрим первый случай. По теореме 2.1,

$$\lim_{\hbar\to 0} \int\limits_\Omega H^{(\hbar)}_{q_0,p_0,\lambda_\hbar t}(q,p)a(q,p)dqdp = \langle a\rangle(p_0)$$

для всех $t$ (если $\hbar\lambda_\hbar \to 0$ или $\hbar\lambda_\hbar \to \infty$) или для иррациональных $t$ (если $\hbar\lambda_\hbar \to c \in (0,\infty)$). В любом случае, поскольку рациональные числа имеют на вещественной оси меру нуль, то

$$\lim_{\hbar\to 0} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\, b(t) \int\limits_\Omega H^{(\hbar)}_{q_0,p_0,\lambda_\hbar t}(q,p)a(q,p)dqdp = \langle a\rangle(p_0) \int\limits_{-\infty}^{+\infty} b(t)\, dt. \tag{2.32}$$

Рассмотрим второй случай. Перепишем формулу (2.29) для этого случая (напомним, что слагаемые с $k \neq 0$ исчезают в этом предельном случае):

$$\lim_{\hbar\to 0} \left[ \int\limits_{\Omega\times\mathbb{R}} H^{(\hbar)}_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p)a(q,p)b(t)\, dqdpdt - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} a_j(p_0) \int\limits_{\mathbb{R}^d} dx \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\, b(t)\varphi(x)\overline{\varphi\left(x - \frac{2\hbar\lambda_\hbar t j}{\alpha_\hbar}\right)} e^{ij(q_0+2p_0\lambda_\hbar t)} \right] = 0. \tag{2.33}$$

По теореме Римана–Лебега интеграл по $t$ стремится к нулю при $jp_0 \neq 0$ из-за

члена $2ijp_0\lambda_\hbar t$ в экспоненте. Следовательно,

$$\lim_{\hbar\to 0}\left[\int\limits_{\Omega\times\mathbb{R}} H^{(\hbar)}_{q_0,p_0,t_\hbar}(q,p)a(q,p)b(t)\,dqdpdt - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\sum_{j:\,jp_0=0} a_j^{(b,B)}(p_0)e^{ijq_0}\right] = 0,$$

что можно переписать в виде (2.23). Если $B = 0$, то, очевидно, (2.23) можно переписать в виде (2.24).

Если $p_0$ не принадлежит резонансному множеству, то в (2.33) в пределе не исчезает только слагаемое с $j = 0$. Поскольку

$$a_0(p) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\int\limits_{\mathbb{R}^d} a(q,p)\,dq,$$

(2.23) и (2.24) могут быть переписаны в виде (2.22). □

## 2.3 Обсуждение

### 2.3.1 Три масштаба времени

Из теоремы 2.1 можно сделать вывод о существовании трёх масштабов времени:

1. «Классический» масштаб времени. Если или $t_\hbar = t = const$, или $t_\hbar \to \infty$, но $\hbar t_\hbar/\alpha_\hbar \to 0$ (т.е., $A = B = 0$ в (2.17)), то волновой пакет движется вдоль классической траектории: второе слагаемое в пределе (2.19) имеет вид

   $$\delta(q - q_0 - 2p_0t_\hbar)\delta(p - p_0).$$

   В качестве промежутка времени, характеризующего этот масштаб, можно взять «средний период» классического движения $T_{cl} = \pi/\overline{p}$, где $\overline{p} = \frac{1}{d}\sum_{j=1}^d p_j$ — средний импульс $p = (p_1, \ldots, p_d) \in \mathbb{R}^d$.
2. $T_{coll} = \alpha_\hbar/\hbar$ — характерное время расплывания волнового пакета. Известно, что скорость расплывания волнового пакета пропорциональна среднеквадратичному отклонению импульса. Среднеквадратичное отклонение для гауссова волнового пакета составляет $\hbar/(2\alpha_\hbar)$. Этот масштаб времени соответствует $A = 0$, $B \in (0, \infty]$ в (2.17).

3. $T_\hbar = 2\pi/\hbar$ — время полного возрождения. Моменты $\frac{M}{N}T_\hbar$ соответствуют дробным возрождениям: возрождениям уменьшенных копий волнового пакета сразу в нескольких местах тора. Структура дробных возрождений для общего случая квантовых систем с дискретным спектром разработана в [1, 108]. Более подробно случай бесконечно глубокой потенциальной ямы разобран в [102, 103] (движение в бесконечно глубокой потенициальной яме можно свести к движению на торе [11]). Дальнейшее развитие общая теория дробных возрождений получила в [104, 218, 219, 276, 277]. Этот масштаб времени соответствует рациональным $A$ и нулевому $B$ в (2.17).

Случай рациональных $A$ и ненулевых конечных $B$ в (2.17) соответствует или процессу расплывания волнового пакета, т.е. переходу от начального или возрождённого состояния к полностью расплывшемуся ($B > 0$), или процессу квантового возрождения, т.е. обратному переходу ($B < 0$).

Время Эренфеста составляет $O(T_{coll}) = O(\alpha_\hbar/\hbar)$. Подходящим выбором $\alpha_\hbar$ его можно сделать сколь угодно близким (снизу) к $O(\hbar^{-1})$ или же сколь угодно малым (но всё равно неограниченно возрастающим при $\hbar \to 0$), т.е. даже меньше, чем $O(\ln \hbar^{-1})$.

### 2.3.2 Рациональные и иррациональные моменты времени

Теоремы 2.1 и 2.2 различают рациональные и иррациональные $A$. Однако каждое иррациональное $A$ можно сколь угодно точно приблизить рациональными дробями $M/N$, где $M \to \infty$ и $N \to \infty$ так, что $M/N \to A$. Противоречия в этом нет, поскольку и распределение, стоящее во втором слагаемом (2.19), и распределение (2.21) стремятся к распределению (2.18) при $N \to \infty$.

Различение рациональных и иррациональных времён (в единицах $T_\hbar$) в квазиклассическом пределе раскрывает взаимосвязь квантовой механики с теорией чисел, что проявляется в ряде других моделей [173, 201, 222].

Также здесь отметим, что мы рассмотрели тор с равными сторонами: $\mathbb{R}^d/(2\pi\mathbb{Z}^d)$. Рассмотрение квантовой динамики на торе с неравными или даже с

несоизмеримыми сторонами также может быть проведено тем же методом. Тогда в общем случае квантовая динамика уже не будет строго периодической. Могут возникать ситуации, в которых, например, по одной координате волновой пакет находится в расплывшемся состоянии, а по другой произошло возрождение. Т.е. количество различных случаев увеличится, но качественно новых эффектов не возникнет.

### 2.3.3 Гауссовские когерентные состояния

Пусть $\varphi$ имеет гауссовский вид (2.6). Тогда

$$\delta_B(q) = \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} \exp\left\{-\frac{(Bj)^2}{2} + ijq\right\} = \frac{1}{(2\pi)^d}\,\theta\left(\frac{q}{2\pi}, \frac{B^2}{2\pi}\right),$$

где

$$\theta(x,\tau) = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} e^{-\pi\tau k^2 + 2\pi i k x}$$

— тета-функция нескольких переменных, $x \in \mathbb{R}^d$, $\tau \in \mathbb{C}$, $\operatorname{Re}\tau > 0$. Используя функциональное уравнение для тета-функции [54]

$$\theta\left(\frac{x}{i\tau}, \frac{1}{\tau}\right) = \tau^{\frac{d}{2}} \exp\left(\frac{\pi x^2}{\tau}\right) \theta(x,\tau),$$

мы приходим к

$$\delta_B(q) = \frac{1}{(2\pi B^2)^{\frac{d}{2}}} \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} \exp\left\{-\frac{(q-2\pi n)^2}{2B^2}\right\}.$$

Таким образом, в этом случае $B$ есть среднеквадратичное отклонение конфигурационного распределения волнового пакета. Мы воспроизвели соответствующие результаты [11, в списке публикаций автора].

### 2.3.4 Физически малые параметры

В разделе 2.1 было упомянуто, что с физической точки зрения постоянная Планка не может стремиться к нулю и следует вместо этого говорить о малости некоторых безразмерных величин. В нашем случае условие $\hbar \to 0$, $\alpha_\hbar \to 0$,

$\hbar/\alpha_\hbar \to 0$ эквивалентно условию, что каждый масштаб времени много больше предыдущего, т.е. они «хорошо различимы»:

$$T_{rev} \gg T_{coll} \gg T_{cl}.$$

Можно выразить эти пределы и следующим образом:

- $\alpha_\hbar \ll 2\pi$ означает, что пространственная протяжённость волнового пакета много меньше, чем размер тора (это соответствует $T_{coll} \ll T_{rev}$);
- $\overline{p}\pi \gg \hbar$ означает, что физическое действие, связанное с одним периодом классического движения, много больше кванта действия $\hbar$ (это соответствует $T_{rev} \gg T_{cl}$);
- $\overline{p}\alpha_\hbar \gg \hbar$ означает, что действие, связанное с движением волнового пакета на расстояние порядка его пространственной протяжённости (т.е. на расстояние, на котором можно говорить о смещении волнового пакета) много больше кванта действия (это усиление предыдущего условия и соответствует $T_{coll} \gg T_{cl}$).

### 2.3.5 Связь с теоремами о диффузии

Для классической динамики на торе известны теоремы В.В. Козлова о диффузии [45, 46], которые доказаны на основе идей Пуанкаре [68]. Рассмотрим решение уравнения Лиувилля для тора при начальной интегрируемой функции плотности, т.е. функцию $f(q,p,t)$, и соответствующее пространственное распределение вероятностей $\rho(q,t) = \int_{\mathbb{R}^d} f(q,p,t)dp$. Суть теорем о диффузии заключается том, что $\rho(q,t)$ стремится в слабом смысле к равномерному распределению, т.е. к $1/(2\pi)^d$. Интересно обобщение [41, 61], в котором интегрируемость требуется только от начального распределения по импульсам, но не по координатам. Неформально говоря, выравнивание плотности пространственного распределения происходит из-за начальной неопределённости по импульсу, благодаря которой распределение по координатам постепенно расплывается.

В квантовой динамике тоже имеет место этот эффект что выражает пункт 1 в теоремах 2.1 и 2.2. Однако квантовый случай отличается тем, что периодически

происходят дробные и полные возрождения начального локализованного волнового пакета. Это чисто квантовое явление, связанное с интерференцией волн, движущихся с разными скоростями. Однако, как показывает теорема 2.3, введение дополнительного сглаживания по времени позволяет описать выравнивание плотности пространственного распределения на произвольно больших временах (при $\hbar t_\hbar/\alpha_\hbar \to \infty$). Этому можно придать следующий физический смысл: если макроскопический измерительный прибор сглаживает по различным квантовым масштабам времени, то в квазиклассическом пределе на больших временах мы получаем равномерное пространственное распределение, что и ожидаем получить в этом пределе ввиду теорем Козлова о диффузии.

Отметим, что сглаживание по времени можно также эквивалентно сформулировать как сглаживание по пространственным размерам конфигурационного пространства (в данном случае тора), поскольку размеры влияют на время полного возрождения (2.3). В работе [11, в списке публикаций автора] это сделано для случая частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме: при сглаживании по размерам ямы в квазиклассическом пределе также имеет место выравнивание плотности пространственного распределения.

# ГЛАВА 3

# ОПТИМАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ К КВАНТОВОМУ ЭФФЕКТУ ЗЕНОНА В МОДЕЛИ ЛАНДАУ–ЗИНЕРА

Эта глава посвящена оптимальному приближению к квантовому эффекту Зенона в системе Ландау–Зинера (фундаментальной модели неадиабатического квантового перехода) посредством неселективных измерений, т.е. задаче выбора оптимальных моментов времени неселективных измерений фиксированной наблюдаемой. Текст этой главы организован следующим образом. В разделе 3.1 приводится описание модели Ландау–Зинера и вывод формулы Ландау–Зинера. В разделе 3.3 ставится задача оптимального управления и показывается, что целевая функция может иметь огромное число локальных максимумов, что делает невозможным даже численное решение задачи оптимизации «в лоб». Поэтому раздел 3.4 посвящён разработке эффективного численного алгоритма решения задачи оптимизации, основанного на методе динамического программирования. Но и этот алгоритм достаточно затратен с вычислительной точки зрения. Для выяснения математических структур, стоящих за этой задачей и разработки вычислительно простых алгоритмов мы рассмотрим предельные случаи ультрадиабатического (раздел 3.5) и адиабатического (раздел 3.6) режимов. Графическое представление результатов дано на рисунках 3.4 и 3.5. В разделах 3.7 и 3.8 дан вывод приближённых формул, использующихся в разделах 3.5 и 3.6.

## 3.1 Модель Ландау–Зинера

Гамильтониан Ландау–Зинера в момент времени $t$ имеет вид

$$H(t) = \Delta\sigma_x - \varepsilon t\sigma_z = \begin{pmatrix} -\varepsilon t & \Delta \\ \Delta & \varepsilon t \end{pmatrix}, \tag{3.1}$$

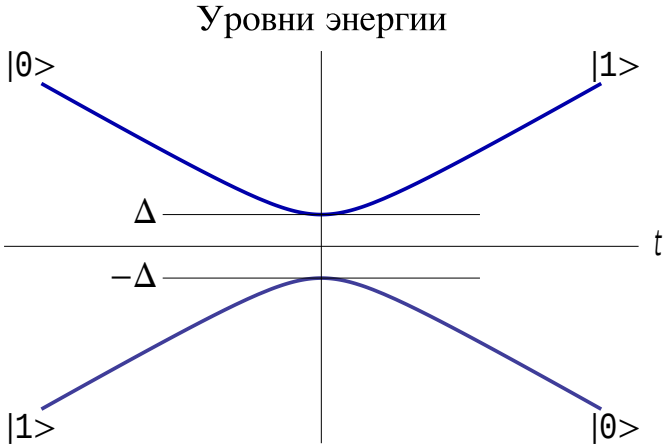



**Рисунок 3.1. – Уровни энергии в системе Ландау–Зинера**

где

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

— матрицы Паули, а $\varepsilon$ и $\Delta$ — положительные константы. Эволюция чистого состояния системы $|\psi(t)\rangle$ задаётся уравнением Шрёдингера (в единицах $\hbar = 1$)

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = -iH(t)|\psi(t)\rangle$$

Собственные значения гамильтониана, зависящие от времени (так называемые адиабатические уровни энергии) и соответствующие собственные векторы имеют вид

$$\begin{aligned} E_j(t) &= \mp\sqrt{\Delta^2 + (\varepsilon t)^2}, \\ |\varphi_j(t)\rangle &= \alpha_j(t) \begin{pmatrix} \varepsilon t \pm \sqrt{\Delta^2 + (\varepsilon t)^2} \\ -\Delta \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.2}$$

где $j = 0, 1$, верхний знак в обозначениях $\pm$ и $\mp$ соответствует $j = 0$, нижний знак соответствует $j = 1$, $\alpha_j(t) \in \mathbb{C}$. Если $\alpha_j(t)$ таковы, что $|\varphi_j(t)\rangle$ — единичные векторы для всех $t$, то $|\varphi_0(t)\rangle$ и $|\varphi_1(-t)\rangle$ стремятся к $|0\rangle$ (с точностью до фазового множителя) при $t \to +\infty$ и к $|1\rangle$ при $t \to -\infty$. Зависимость уровней энергии от времени показана на рисунке 3.1.

Чистое состояние задаётся единичным вектором

$$|\psi(t)\rangle = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle,$$

где $a(t)$ и $b(t)$ — комплексные коэффициенты и $|a(t)|^2 + |b(t)|^2 = 1$. Если выразить эти коэффициенты в виде $a(t) = \cos(\theta/2)e^{i\varphi_1}$, $b(t) = \sin(\theta/2)e^{i\varphi_2}$, $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$, $0 \leqslant \varphi_{1,2} < 2\pi$, то состояние кубита можно представить в виде точки на двухмерной сфере — так называемой сфере Блоха — со сферическими координатами $\theta$ и $\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$. Единичный вектор в $\mathbb{R}^3$, соединяющий начало координат с точкой на сфере Блоха, называется вектором Блоха.

Уравнение Шрёдингера принимает вид

$$\begin{cases} i\dot{a} = -\varepsilon t a + \Delta b, \\ i\dot{b} = \Delta a + \varepsilon t b. \end{cases}$$

При помощи перерастяжки времени $\tau = \sqrt{2\varepsilon}\, t$ и переобозначения новой переменной $\tau$ снова как $t$ эта система сводится к

$$\begin{cases} i\dot{a} = -\dfrac{t}{2}\, a + \sqrt{\gamma}\, b, \\ i\dot{b} = \sqrt{\gamma}\, a + \dfrac{t}{2}\, b, \end{cases} \tag{3.3}$$

где $\gamma = \Delta^2/2\varepsilon$.

Пусть начальное состояние в момент времени $t_0 = -\infty$ таково, что

$$|a(-\infty)| = 1, \quad b(-\infty) = 0, \tag{3.4}$$

т.е. система находится в состоянии $|0\rangle$, на верхнем энергетическом уровне. Нас будет интересовать вероятность того, что в момент $t = +\infty$ система окажется на нижнем энергетическом уровне (что снова будет соответствовать состоянию $|0\rangle$), т.е. произойдёт переход с верхнего уровня на нижний (или, точнее, произойдёт нечётное количество переходов с уровня на уровень).

Объясним некоторые понятия, которые используются в связи с этой моделью. Если гамильтониан не зависит от времени, то квантовая система с течением времени остаётся на том же уровне энергии, на котором была вначале. Если же гамильтониан и, следовательно, уровни энергии и соответствующие собственные состояния (единичные собственные векторы) зависят от времени, то переходы между уровнями энергии становятся возможными. Но если гамильтониан меняется во временно бесконечно медленно (в нашем случае это предел

$\varepsilon \to 0$), адиабатическая теорема гласит, что в этом пределе система также остаётся в своём мгновенном собственном состоянии. Поэтому собственные значения и собственные векторы (3.2) называются *адиабатическими*, или *непереходимыми* уровнями энергиями и состояниями. Состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ называются *диабатическими*, или *переходимыми*. Если эти состояния соответствуют, например, направлениям спина вверх и вниз соответственно, то мы видим, что адиабатические уровни энергии обмениваются этими характеристиками: при $t \to -\infty$ верхний уровень соответствует направлению спина вверх, нижний — направлению спина вниз, при $t \to +\infty$ — наоборот. Противоположный предел бесконечно быстрого изменения гамильтониана, $\varepsilon \to \infty$, назовём *ультрадиабатическим пределом*. В литературе он называется антиадиабатическим, но, на наш взгляд, использование двух отрицательных приставок не очень удачно и название *ультрадиабатический* (т.е. «сверхдиабатический», «сверхпереходимый») лучше. В этом случае состояние системы как бы не успевает подстроиться под изменение гамильтониана и остаётся в своём начальном диабатическом состоянии $|0\rangle$.

Переход между уровнями энергии возможен главным образом в промежуток времени, на котором уровни энергии близки друг к другу. Это так называемая область квазипересечения уровней. Уровни энергии пересекаются при $\Delta = 0$, но взаимодействие между диабатическими состояниями, вызванное членом $\Delta\sigma_x$ в гамильтониане, приводит к их отталкиванию друг от друга, которое называется квазипересечением энергетических уровней, или межуровневым отталкиванием.

## 3.2 Формула Ландау–Зинера

Система линейных дифференциальных уравнений (3.3) определяет семейство унитарных операторов $U(t, t_0)$, $t_0, t \in \mathbb{R}$. Обозначим их элементы в стандартном базисе следующим образом:

$$\begin{pmatrix} u_{00}(t, t_0) & u_{01}(t, t_0) \\ u_{10}(t, t_0) & u_{11}(t, t_0) \end{pmatrix},$$

где

$$u_{kl}(t,t_0) = \langle k|U(t,t_0)|l\rangle.$$

Тогда $u_{00}(t,t_0) = a(t)$ и $u_{10}(t,t_0) = b(t)$, где $a(t)$ и $b(t)$ — решения системы (3.3) с начальными условиями $a(t_0) = 1$, $b(t_0) = 0$. Аналогично $u_{01}(t,t_0) = a(t)$ и $u_{11}(t,t_0) = b(t)$ при начальных условиях $a(t_0) = 0$, $b(t_0) = 1$.

Общее решение системы (3.3) можно выразить в виде (подробный вывод можно найти в [125])

$$\begin{aligned} a(t) &= c_1 e^{-3i\pi/8}\sqrt{\gamma}D_{-i\gamma-1}(-e^{i\pi/4}t) + c_2 e^{-3i\pi/8}D_{i\gamma}(e^{3i\pi/4}t) \\ b(t) &= c_1 e^{3i\pi/8}D^*_{i\gamma}(e^{3i\pi/4}t) - c_2 e^{3i\pi/8}\sqrt{\gamma}D^*_{-i\gamma-1}(-e^{i\pi/4}t). \end{aligned} \tag{3.5}$$

Здесь $D_\nu(z)$ — функция параболического цилиндра, определённая для произвольных комплексных чисел $\nu$ и $z$ (называются соответственно порядком и аргументом функции), $D^*_\nu(z) = [D_\nu(z)]^* = D_{\nu^*}(z^*)$ — комплексно сопряжённая функция, $c_1$ и $c_2$ — произвольные константы. Функция параболического цилиндра может быть выражена через функции Уиттекера и вырожденную гипергеометрическую функцию [34].

Мы будем пользоваться следующими асимптотиками функций $D_{i\gamma}(\pm e^{3i\pi/4}t)$ и $D_{-i\gamma-1}(\pm e^{i\pi/4}t)$ при $t \to +\infty$ [34]:

$$\begin{aligned} D_{i\gamma}(e^{3i\pi/4}t) &= e^{-3\pi\gamma/4}e^{it^2/4}t^{i\gamma} + O(t^{-1}), \\ D_{i\gamma}(-e^{3i\pi/4}t) &= e^{\pi\gamma/4}e^{it^2/4}t^{i\gamma} + O(t^{-2}), \\ D_{-i\gamma-1}(e^{i\pi/4}t) &= O(t^{-1}), \\ D_{-i\gamma-1}(-e^{i\pi/4}t) &= \frac{\sqrt{2\pi}\,e^{-\pi\gamma/4}}{\Gamma(1+i\gamma)}e^{it^2/4}t^{i\gamma} + O(t^{-1}), \end{aligned} \tag{3.6}$$

где $\Gamma$ — гамма-функция. Отметим, что обе функции ограниченны при $t \in \mathbb{R}$.

Рассмотрим начальные условия (3.4). Из асимптотик (3.6) следует, что $c_1$ можно выбрать в виде $e^{-\pi\gamma/4}e^{3i\pi/8}$ (это соответствует тому, что фаза $a(t)$ при больших отрицательных $t$ равна $e^{it^2/4}|t|^{i\gamma}$) и $c_2 = 0$, так что

$$a(t) = e^{-\pi\gamma/4}D_{i\gamma}(e^{3i\pi/4}t), \tag{3.7}$$

$$b(t) = -e^{-\pi\gamma/4}e^{3i\pi/4}\sqrt{\gamma}D^*_{-i\gamma-1}(-e^{i\pi/4}t). \tag{3.8}$$

Это даёт знаменитую *формулу Ландау–Зинера*:

$$|a(+\infty)|^2 = e^{-2\pi\gamma} \tag{3.9}$$

Величина $|a(+\infty)|^2$ есть вероятность того, что конечное диабатическое состояние системы совпадает с начальным диабатическим состоянием. Эта вероятность нас и будет интересовать в дальнейшем. Поскольку она соответствует переходу с одного адиабатического уровня энергии на другой, мы будем называть её «вероятностью перехода». Отметим, что иногда термин «переход Ландау–Зинера» используется в обратном смысле: для обозначения перехода между диабатическими состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$ или, соответственно, сохранения системы на том же адиабатическом уровне.

Как мы и говорили в разделе 3.1, вероятность перехода оказывается близкой к нулю при больших $\gamma$ или, эквивалентно, для малых $\varepsilon$ относительно $\Delta^2$: для очень медленной (адиабатической) эволюции гамильтониана система остаётся на том же адиабатическом уровне энергии. Это адиабатический предел. В противоположном предельном случае малых $\gamma$ (ультрадиабатическом пределе) вероятность перехода Ландау–Зинера стремится к единице.

## 3.3 Квантовое управление посредством измерений

Общее состояние квантовой системы задаётся оператором плотности $\rho$, чья унитарная эволюция задаётся формулой

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U(t, t_0)^\dagger \equiv \mathcal{U}(t, t_0)\rho(t_0). \tag{3.10}$$

Будем осуществлять измерение фиксированной наблюдаемой, которой соответствует вероятностная проекторнозначная мера $\{P_0 = |0\rangle\langle 0|, P_1 = |1\rangle\langle 1|\}$. Тогда изменение состояния при измерении задаётся формулой (1.6) или, в нашем случае,

$$\rho \mapsto |0\rangle\langle 0|\rho|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|\rho|1\rangle\langle 1| \equiv \mathcal{P}\rho. \tag{3.11}$$

На языке операторов плотности начальные условия (3.4) имеют вид

$\rho(-\infty) = |0\rangle\langle 0|$. Вероятность перехода Ландау–Зинера, т.е. левая часть (3.9) тогда выражается в виде $\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle$.

Итак, математически динамика оператора плотности выглядит следующим образом: эволюция задаётся формулой (3.10), в основе которой лежат дифференциальные уравнения (3.3), в дискретные моменты времени измерений состояние мгновенно меняется по формуле (3.11).

Рассмотрим следующую задачу оптимизации: для заданного натурального $N$ найти моменты измерений $-\infty < t_1 \leqslant t_2 \leqslant \ldots \leqslant t_N < +\infty$, максимизирующие вероятность перехода $\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle$ при начальном условии $\rho(-\infty) = |0\rangle\langle 0|$.

Вероятность перехода тогда можно выразить в виде

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \mathrm{Tr}[|0\rangle\langle 0|\mathcal{U}(+\infty, t_N)\mathcal{P}\ldots\mathcal{P}\mathcal{U}(t_2, t_1)\mathcal{P}\mathcal{U}(t_1, -\infty)\rho(-\infty)] =$$
$$= \sum_{j_1,\ldots,j_N\in\{0,1\}} \prod_{k=0}^{N} |u_{j_{k+1},j_k}(t_{k+1}, t_k)|^2, \tag{3.12}$$

где $t_0 = -\infty$, $t_{N+1} = +\infty$, $j_0 = j_{N+1} = 0$.

Теоретически можно воспользоваться общим решением (3.5) для того, чтобы выразить матричные элементы $u_{jk}(t, t_0)$ через функции параболического цилиндра и затем решить задачу максимизации целевой функции (3.12) от $t_1, \ldots, t_N$ численно. Однако матричные элементы быстро осциллируют при измерении $t_0$ и $t$. Более того, частота осцилляций стремится к бесконечности при $\gamma \to \infty$. Это порождает огромное количество локальных максимумов этой функции. Примеры графиков целевой функции приведены на рисунках 3.2 и 3.3. Попытки решить задачу глобальной оптимизации (т.е. поиска глобального, а не локального максимума) в представленном виде известными методами оптимизации, такими как случайный поиск, имитация отжига, эволюционные алгоритмы и другие, не приводят к успеху.

Поскольку задачу не удаётся решить численными методами «в лоб», необходимо упростить задачу. Для начала установим верхнюю границу максимальной вероятности перехода.

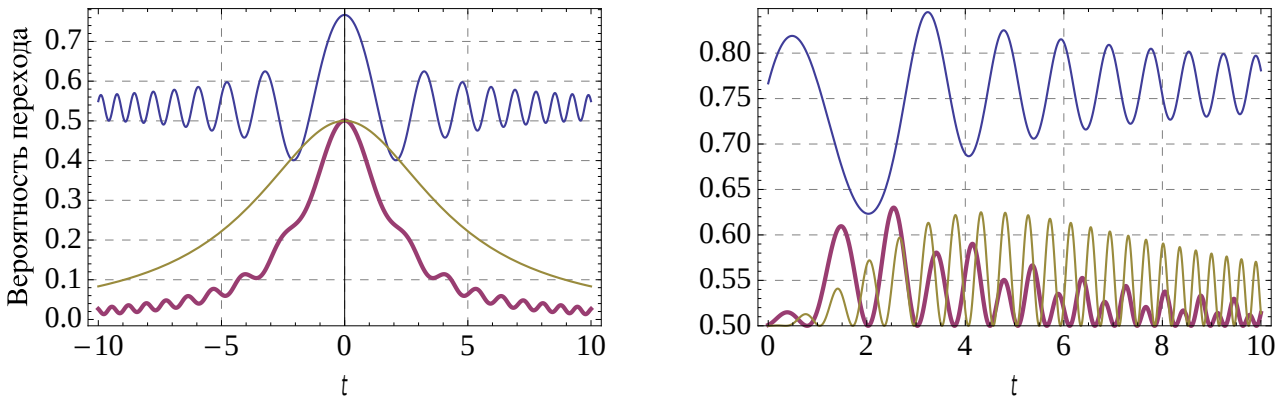



**Рисунок 3.2. – Графики вероятности перехода для одного измерения $N = 1$ в момент $t$ (левый график) и для трёх измерений $N = 3$ (правый график) в моменты $-t$, $0$ и $t$, $t \geqslant 0$, для $\gamma = 0.1$ (верхние кривые), $\gamma = 1$ (нижние жирные кривые) и $\gamma = 5$ (нижние тонкие кривые).**

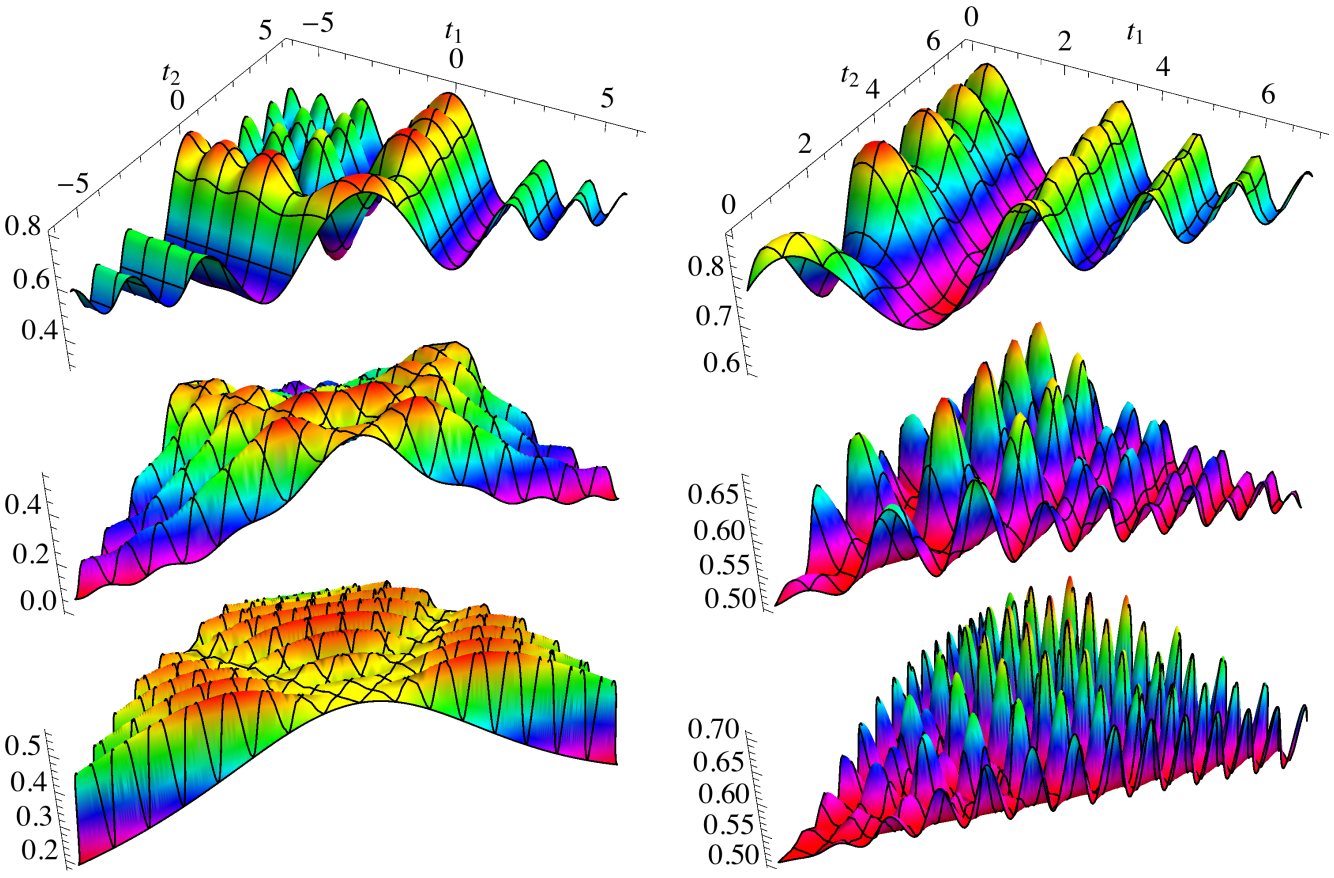



**Рисунок 3.3. – Графики вероятности перехода для двух измерений $N = 2$ в моменты времени $t_1, t_2$ (левый столбец) и для пяти измерений $N = 5$ (правый столбец) в моменты времени $-t_2, -t_1$, $\mathbf{0}$, $t_1$, $t_2$, $0 \leqslant t_1 \leqslant t_2$, для $\gamma = 0.1$ (верхний ряд), $\gamma = 1$ (средний ряд) и $\gamma = 5$ (нижний ряд).**

**Утверждение 3.1.** *Для любых значений аргументов имеем*

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle \leqslant \frac{1}{2}\left\{1+\left(\cos\frac{\Delta\varphi}{N+1}\right)^{N+1}\right\}. \tag{3.13}$$

*Здесь $\Delta\varphi$ означает угол между векторами Блоха, которые соответствуют состояниям $|0\rangle$ и $U(+\infty,-\infty)^{\dagger}|0\rangle$.*

*Доказательство.* Предположим, мы можем не только варьировать моменты измерений, но и при каждом измерении произвольно выбирать наблюдаемую, т.е. вероятностную проекторнозначную меру $\{P_0, P_1\}$. Рассмотрим задачу максимизации $\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle$ при этих условиях. Эта задача была решена в [264, 288] и максимальное значение вероятности перехода даётся правой частью (3.13). Наша задача имеет дополнительное ограничение — наблюдаемые фиксированы. Максимальное значение целевой функции с дополнительным ограничением не может превосходить максимальное значение без этого ограничения. □

**Замечание 3.1.** Отметим, что формально в [264, 288] была рассмотрена задача оптимизации с произвольными наблюдаемыми, но фиксированными моментами времени $t_1, \ldots, t_N$. Однако при произвольно выбираемых наблюдаемых ограничение на моменты измерений несущественно, поскольку измерение некоторой наблюдаемой $\{P_0, P_1\}$ в момент $t$ эквивалентно измерению наблюдаемой $\{P'_1, P'_2\}$ в момент $t'$, где

$$P'_j = U(t',t)P_jU(t',t)^{\dagger}, \quad j=1,2,$$

т.е. значение целевой функции при этом не меняется.

Мы позже обсудим взаимосвязь между этими двумя задачами квантового оптимального управления посредством измерений в разделе 3.6.2.

Из рисунка 3.2 можно предположить, что при произвольном $\gamma$ оптимальный момент измерения в случае $N = 1$ — это $t = 0$. Соответствующее значение целевой функции составит

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \frac{1+e^{-2\pi\gamma}}{2}. \tag{3.14}$$

Это значение можно получить из формулы

$$D_\nu(0) = \frac{2^{\nu/2}\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{1-\nu}{2})}, \tag{3.15}$$

которая, в свою очередь, является непосредственным следствием определения функции параболического цилиндра и вырожденной гипергеометрической функции [34]. Здесь $\Gamma(x)$ — гамма-функция.

Отсюда можно сделать важное заключение о том, что единственное измерение, сделанное в оптимальный момент времени, уменьшает модуль разности между вероятностью перехода Ландау–Зинера и единицей (максимально возможной вероятностью) вдвое. В частности, при больших $\gamma$ вероятность перехода Ландау–Зинера экспоненциально стремится к нулю, тогда как единственное измерение (в оптимальный момент времени) увеличивает эту вероятность до $1/2$.

## 3.4 Метод динамического программирования

Будем решать нашу задачу оптимального управления методом динамического программирования [12, 71]. Он заключается в том, что сложная задача оптимизации сводится к последовательности более простых.

**Теорема 3.1.** *Максимальное значение целевой функции (3.12) можно представить в виде*

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = f_N^0(-\infty), \tag{3.16}$$

*где функции $f_n^j(t)$, $n \geqslant 0$, $j = 0, 1$, удовлетворяют следующей системе рекуррентных соотношений (задач оптимизации):*

$$f_n^j(t) = \max_{t'>t}\{|u_{0j}(t',t)|^2 f_{n-1}^0(t') + |u_{1j}(t',t)|^2 f_{n-1}^1(t')\}, \quad n \geqslant 1, \tag{3.17}$$

$$f_0^j(t) = |u_{0j}(+\infty, t)|^2. \tag{3.18}$$

*Доказательство.* Определим $f_0^j(t)$ по формуле (3.18), а $f_n^j(t)$, $n \geqslant 1$, — следующим образом:

$$f_n^j(t) = \max_{t<t_1<t_2<\ldots<t_n} \mathrm{Tr}\{|0\rangle\langle 0|\,\mathcal{U}(+\infty, t_n)\mathcal{P}\ldots\mathcal{P}\mathcal{U}(t_2,t_1)\mathcal{P}\mathcal{U}(t_1,t)(|j\rangle\langle j|)\}. \tag{3.19}$$

Тогда (3.16) выполнено по определению. Ввиду того что

$$\mathcal{PU}(t_1,t)(|j\rangle\langle j|) = |u_{0j}(t_1,t)|^2\,|0\rangle\langle 0| + |u_{1j}(t_1,t)|^2\,|1\rangle\langle 1|$$

и

$$\max_{t<t_1<t_2<\ldots<t_n}(\cdot) = \max_{t_1>t}\ \max_{t_1<t_2<\ldots<t_n}(\cdot), \tag{3.20}$$

$f_n^j(t)$ удовлетворяет рекуррентному соотношению (3.17). Поскольку формулы (3.17) и (3.18) однозначно задают $f_n^j(t)$, их можно взять за определение. □

Теперь мы можем решить нашу задачу максимизации следующим образом. Вычисляем значения функций $f_n^j(t)$, $j = 0, 1$, для $t \in [-50, 50]$ с шагом по времени 0.01, начиная с $n = 1$. Для произвольных значений времени в этом интервале функция вычисляется на основе интерполяции. Зная функцию $f_n^j$, можно таким же образом вычислить значения функций $f_{n+1}^j(t)$ при помощи формулы (3.19). Таким образом, на каждом шаге мы решаем задачу одномерной оптимизации. Она всё равно имеет множество локальных экстремумов, но глобальный экстремум эффективно находится при помощи алгоритма сверхбыстрого отжига [53]. Указанного интервала времени $[-50, 50]$ достаточно для $\gamma \leqslant 5$ и $N \leqslant 15$: все оптимальные моменты измерений лежат в этом интервале. Результаты представлены на рисунках 3.4 и 3.5.

Этот алгоритм также довольно вычислительно затратен. В следующих двух разделах мы разработаем более простые алгоритмы и исследуем математические структуры, стоящие за этой задачей. Для этого мы проанализируем случаи малых и больших $\gamma$, что соответствует ультрадиабатическому и адиабатическому режимам.

## 3.5 Ультрадиабатический режим

Предельный случай малых $\gamma$ соответствует ультрадиабатическому режиму. Поэтому применим первый порядок по $\gamma$.

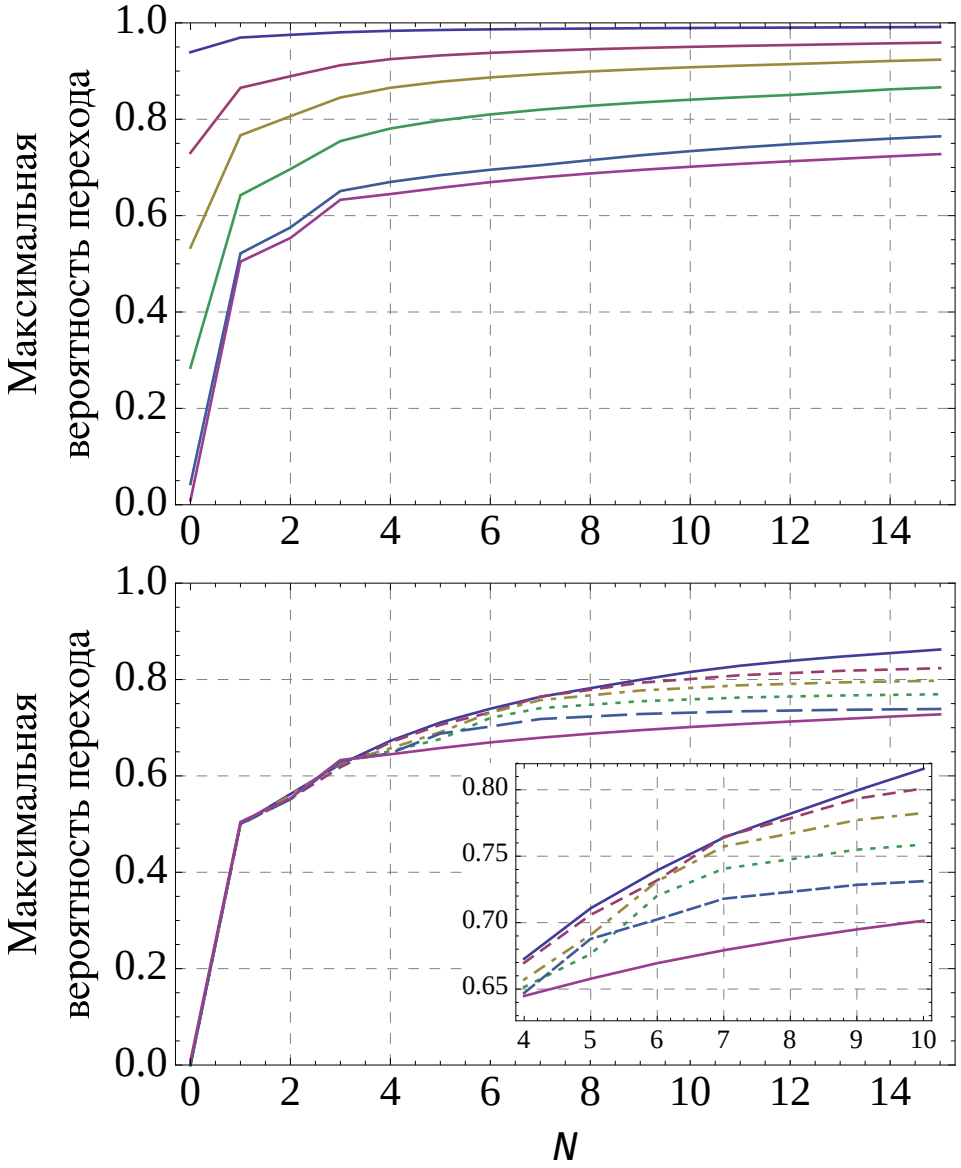



**Рисунок 3.4. – Максимальная вероятность перехода Ландау–Зинера в зависимости от числа измерений $N$ для различных $\gamma$. Кривые на левом графике (сверху вних): $\gamma = 0.01,\ 0.05,\ 0.1,\ 0.2,\ 0.5,\ 0.75$. Кривые на правом графике (снизу вверх): $\gamma = 0.75,\ 1,\ 1.2,\ 1.5,\ 2,\ 5$. Вычисления для $\gamma \leqslant 0.5$ проведены по алгоритму для малых $\gamma$ (см. раздел 3.5) и проверены по более точному и общему, но и более вычислительно затратному метода раздела 3.4. Разности в найденных значениях максимальной вероятности перехода не превышают $0.01$. Вычисления для $\gamma > 0.5$ были проведены по общему методу раздела 3.4, но комбинация результатов раздела 3.6 с алгоритмом диффернциальной эволюции также даёт хорошие результаты. Разность в определении максмальной вероятности перехода также составляет $0.01$ для $\gamma \geqslant 1$ и меньше или порядка $0.01$ для $0.5 \leqslant \gamma < 1$. Кривая для $\gamma = 5$, а также не показанные здесь кривые для $\gamma > 5$ практически совпадают с теоретической верхней границей (3.26).**

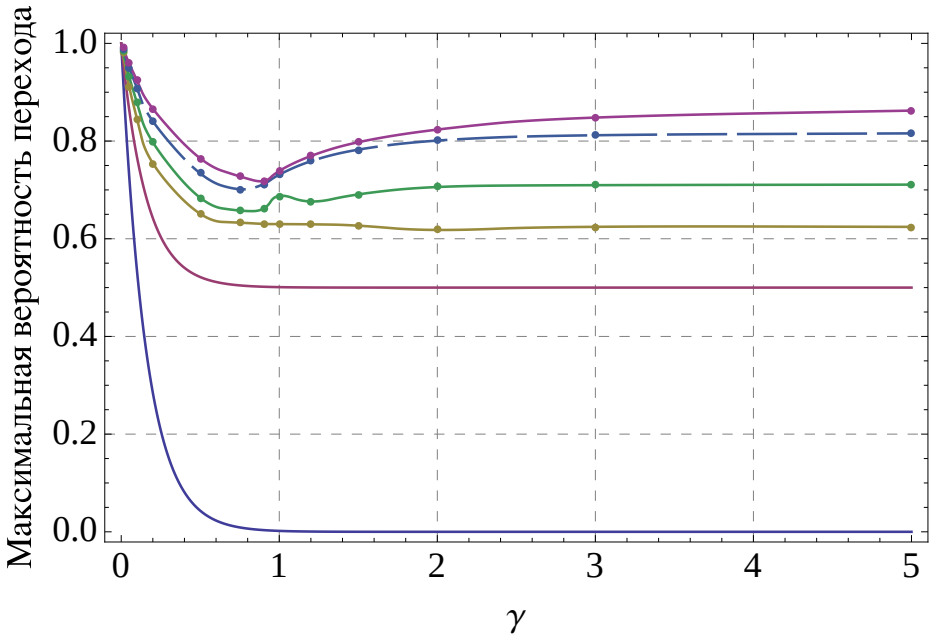



**Рисунок 3.5. – Максимальная вероятность перехода в зависимости от $\gamma$ для фиксированного количества измерений $N$. Кривые на графике (снизу вверх): $N = 0,\ 1,\ 3,\ 5,\ 10,\ 15$. Кривые для $N = 0$ и $N = 1$ построены с использованием точной формулы Ландау–Зинера (3.9) и формулы (3.14). Остальные вычисления проведены так же, как описано на рисунке 3.4. Точки обозначают значения $\gamma$, для которых были проведены вычисления и на основе которых выполнена интерполяция.**

**Теорема 3.2.** *В приближении первого порядка по $\gamma$ целевая функция (3.12) имеет вид*

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = 1 - 2\pi\gamma \sum_{k=0}^{N} \mathrm{Re}\{\mathscr{F}(t_k/\sqrt{2})[\mathscr{F}^*(t_k/\sqrt{2}) - \mathscr{F}^*(t_{k+1}/\sqrt{2})]\} + O(\gamma^2), \tag{3.21}$$

*где $t_0 = -\infty$ и $t_{N+1} = +\infty$. Максимальное значение приближения первого порядка целевой функции (3.21) можно представить в виде*

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle \cong 1 - 2\pi\gamma g_N(-\infty), \tag{3.22}$$

*где функции $g_n(t)$, $n \geqslant 0$, $j = 0, 1$, удовлетворяют следующей системе рекуррентных соотношений (задач оптимизации):*

$$\begin{aligned} g_n(t) &= \min_{t' \geqslant t} \left[ \mathrm{Re}\left\{ \mathscr{F}(t/\sqrt{2}) \left[ \mathscr{F}^*(t/\sqrt{2}) - \mathscr{F}^*(t'/\sqrt{2}) \right] \right\} + g_{n-1}(t') \right], \\ g_0(t) &= \mathrm{Re}\left\{ \mathscr{F}(t/\sqrt{2}) \left[ \mathscr{F}^*(t/\sqrt{2}) - \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \right] \right\}. \end{aligned} \tag{3.23}$$

Здесь

$$\mathscr{F}(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int\limits_0^t e^{is^2} ds, \quad \mathscr{F}(\pm\infty) = \pm\frac{1+i}{2} = \pm\frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}},$$

— интеграл Френеля.

*Доказательство.* Чтобы не перегружать изложение техническими деталями, связанными со специальными функциями, отложим вывод формулы (3.21) до раздела 3.7. Вторая часть теоремы следует из вида функции (3.21) и (3.20). □

**Следствие 3.1.** *В случае единственного измерения $N = 1$ приближение первого порядка целевой функции (3.21) принимает максимальное значение, равное $1 - \pi\gamma$, в точке $t_1 = 0$ и только в ней.*

*Доказательство.* При $N = 1$ выражение (3.22) принимает вид

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle \cong 1 - \pi\gamma - 2\pi\gamma|\mathscr{F}(t_1/\sqrt{2})|^2.$$

Максимум этого выражения, очевидно, достигается только при $t_1 = 0$ и равен $1 - \pi\gamma$. □

Поскольку формула Ландау–Зинера в первом приближении по $\gamma$ имеет вид $1 - 2\pi\gamma$, подтверждается вывод, сделанный в конце раздела 3.3 о том, что единственное измерение, проведённое в оптимальный момент времени $t = 0$, уменьшает модуль разности между вероятностью перехода Ландау–Зинера и единицей вдвое.

Значения интеграла Френеля $\mathscr{F}(t/\sqrt{2})$ можно представить графически в виде спирали Корню. Таким образом, с геометрической точки зрения задача максимизации (3.21) заключается в нахождении точек $t_1, \ldots, t_N$ на спирали Корню, которые максимизируют функцию (3.21), см. рисунок 3.7.

Однако функция (3.21) по-прежнему (как и исходная (3.12)) имеет множество локальных максимумов, так что попытка прямой численной оптимизации не приводит к нахождению глобального максимума. Поэтому в теореме 3.2 мы снова представили задачу как задачу динамического программирования. Алгоритм численного решения тогда аналогичен тому, что описан в разделе 3.4. Несмотря

на то что задача (3.22) и (3.23) внешне выглядит аналогично задаче (3.16)–(3.18), на практике алгоритм на основе теоремы 3.2 находит решение задачи намного быстрее. Вероятно, это связано с меньшей сложностью вычисления интеграла Френеля по сравнению с функцией параболического цилиндра. Также преимущество задачи (3.22) и (3.23) с токи зрения численного решения заключается в независимости оптимальных моментов измерений от $\gamma$, т.е. для каждого $N$ достаточно решить эту задачу один раз.

Для улучшения точности прибегнем к следующей дополнительной процедуре. Пусть $(t_1, \ldots, t_N)$ — решение, найденное методом динамического программирования. Применим затем метод поиска локального максимума с начальной точкой $(t_1, \ldots, t_N)$ в исходной задаче максимизации (3.21) в $N$-мерном пространстве. Локальный максимум найти гораздо легче, чем глобальный. Обозначим новую точку через $(t'_1, \ldots, t'_N)$. Эта операция также не зависит от $\gamma$. Найденные таким образом оптимальные моменты измерений приведены в таблице 3.1. Рисунки 3.6 и 3.7 построены с использованием данных таблицы 3.1.

В пределе $N \to \infty$ максимальное значение вероятности перехода (3.21) стремится к единице, что соответствует квантовому эффекту Зенона. В самом деле, в пределе сумму можно заменить на интеграл, а разность $\mathscr{F}(t_k/\sqrt{2}) - \mathscr{F}(t_{k+1}/\sqrt{2})$ — на производную, т.е. $e^{it^2/2}/\sqrt{\pi}$. Поскольку

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathscr{F}(t/\sqrt{2}) e^{it^2/2} dt = 0,$$

то выражение (3.21) становится равным единице.

Вычисления показывают, что эти операции дают очень точные результаты для $\gamma \leqslant 0.1$: значения целевой функции в точках $(t'_1, \ldots, t'_N)$ отличаются от значений целевой функции, которые находит более точный алгоритм раздела 3.4, не более чем на $0.01$.

Для бóльших значений $\gamma$, когда приближение малых $\gamma$ работает уже не очень хорошо, прибегнем к ещё одной вычислительной процедуре. Используем найденную точку $(t'_1, \ldots, t'_N)$ в качестве начальной для поиска локального максимума исходной задачи (3.12) без приближения малых $\gamma$. Это даёт очень точные

Таблица 3.1. – Решение задачи оптимизации в приближении первого порядка относительно $\gamma$.

| $N$ | $g_N(-\infty)$ | Оптимальные моменты измерений |
|---|---|---|
| 1 | 0.5 | $t_1 = 0$ |
| 2 | 0.812 | $t_1 = -3.31, t_2 = 0.12$ |
| 3 | 0.640 | $t_1 = -3.33, t_2 = 0, t_3 = 3.33$ |
| 4 | 0.539 | $t_1 = -3.38, t_2 = -0.24, t_3 = 0.24, t_4 = 3.38$ |
| 5 | 0.479 | $t_1 = -3.41, t_2 = -0.39, t_3 = 0, t_4 = 0.39, t_5 = 3.41$ |
| 6 | 0.437 | $t_1 = -3.44, t_2 = -0.50, t_3 = -0.17, t_4 = 0.17, t_5 = 0.50, t_6 = 3.44$ |
| 7 | 0.405 | $t_1 = -3.46, t_2 = -0.59, t_3 = -0.30, t_4 = 0, t_5 = 0.30, t_6 = 0.59, t_7 = 3.46$ |
| 8 | 0.381 | $t_1 = -3.48, t_2 = -0.66, t_3 = -0.39, t_4 = -0.13, t_5 = 0.13, t_6 = 0.39,$ $t_7 = 0.66, t_8 = 3.48$ |
| 9 | 0.360 | $t_1 = -3.50, t_2 = -0.73, t_3 = -0.48, t_4 = -0.24, t_5 = 0, t_6 = 0.24, t_7 = 0.48$ $t_8 = 0.73, t_9 = 3.50$ |
| 10 | 0.343 | $t_1 = -3.52, t_2 = -0.78, t_3 = -0.56, t_4 = -0.34, t_5 = -0.11, t_6 = 0.11,$ $t_7 = 0.34, t_8 = 0.56, t_9 = 0.78, t_{10} = 3.52$ |
| 11 | 0.328 | $t_1 = -3.54, t_2 = -0.83, t_3 = -0.62, t_4 = -0.42, t_5 = -0.21, t_6 = 0, t_7 = 0.21,$ $t_8 = 0.42, t_9 = 0.62, t_{10} = 0.83, t_{11} = 3.54$ |
| 12 | 0.315 | $t_1 = -3.55, t_2 = -0.88, t_3 = -0.68, t_4 = -0.49, t_5 = -0.29, t_6 = 0.10,$ $t_7 = 0.10, t_8 = 0.29, t_9 = 0.49, t_{10} = 0.68, t_{11} = 0.88, t_{12} = 3.55$ |
| 13 | 0.303 | $t_1 = -3.55, t_2 = -0.88, t_3 = -0.69, t_4 = -0.49, t_5 = -0.30, t_6 = -0.10,$ $t_7 = 0.10, t_8 = 0.28, t_9 = 0.48, t_{10} = 0.67, t_{11} = 0.88, t_{12} = 3.54, t_{13} = 7.08$ |
| 14 | 0.291 | $t_1 = -7.08, t_2 = -3.55, t_3 = -0.87, t_4 = -0.68, t_5 = -0.48, t_6 = -0.29,$ $t_7 = -0.10, t_8 = 0.10, t_9 = 0.29, t_{10} = 0.48, t_{11} = 0.68, t_{12} = 0.87, t_{13} = 3.55,$ $t_{14} = 7.08$ |
| 15 | 0.280 | $t_1 = -7.09, t_2 = -3.56, t_3 = -0.91, t_4 = -0.73, t_5 = -0.55, t_6 = -0.36,$ $t_7 = -0.18, t_8 = 0, t_9 = 0.18, t_{10} = 0.36, t_{11} = 0.55, t_{12} = 0.73, t_{13} = 0.91,$ $t_{14} = 3.56, t_{15} = 7.09$ |

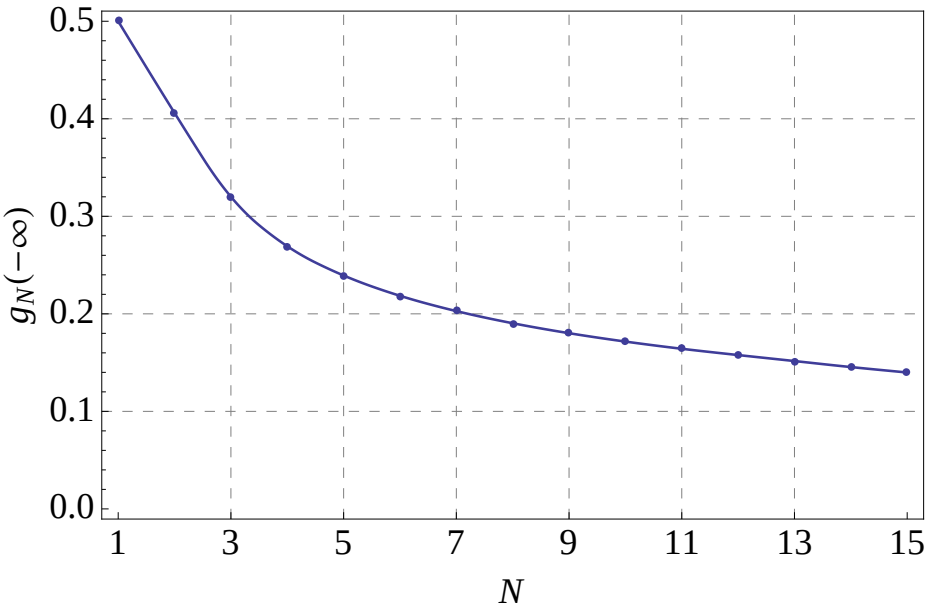



**Рисунок 3.6. – Величина $g_N(-\infty)$ в зависимости от количества измерений $N$. Максимальное значение целевой функции в первом приближении по $\gamma$ имеет вид $\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle \cong 1 - 2\pi\gamma g_N(-\infty)$ (см. (3.22)). Случай отсутствия измерений соответствует $g_0(-\infty) = 1$, в результате чего получаем формулу Ландау–Зинера $1 - 2\pi\gamma$ в первом порядке по $\gamma$.**

результаты для значений $\gamma$ вплоть до $0.5$. Результаты представлены на рисунке 3.4.

Можно заметить интересный эффект, что хоть для большинства значений $N$ оптимальные моменты времени измерений расположены симметрично относительно нуля, эта симметрия нарушается при $N = 2$ и $N = 13$. Это «нарушение симметрии» происходит тогда, когда моменты измерений переходят на новый виток спирали — см. точку на новом витке в правом верхнем углу графика на рисунке 3.7. Но, поскольку задача симметрична, если $t_1, \ldots, t_N$ — решение задачи оптимизации, то $-t_N, \ldots, -t_1$ — тоже решение с тем же значением целевой функции.

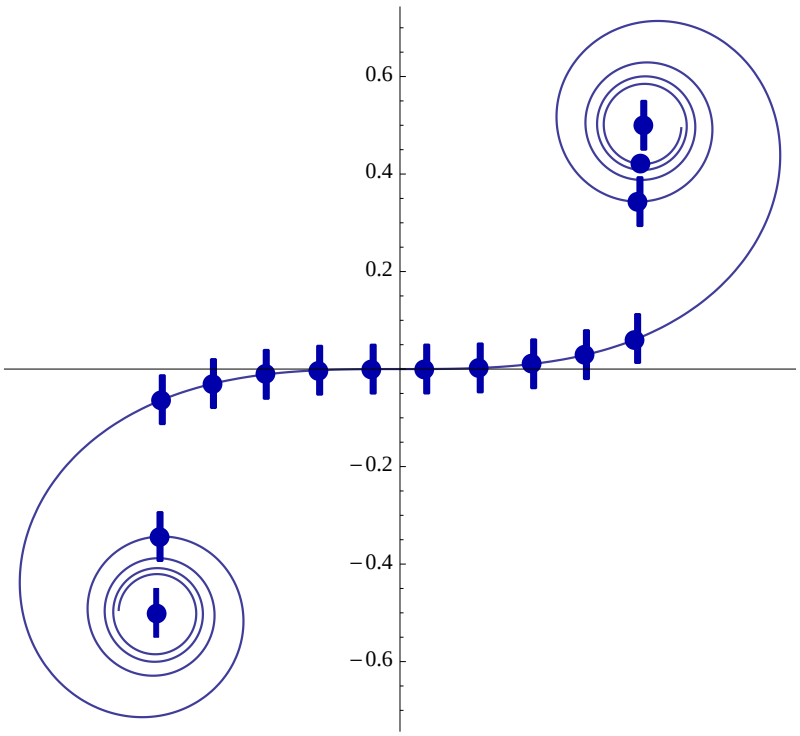



**Рисунок 3.7. – Точки на спирали Корню, оответствующие оптимальным моментам измерений для $N = 12$ (палочки) и $N = 13$ (кружки) в приближении малых $\gamma$: ультрадиабатическом режиме. Также отмечены точки, соответствующие $\pm\infty$. Отметим, что оптимальные моменты измерения симметричны относительно нуля при $N = 12$ (что имеет место для большей части значений $N$), но несимметричны при $N = 13$. Это «нарушение симметрии» происходит тогда, когда моменты измерений переходят на новый виток спирали — см. точку на новом витке в правом верхнем углу графика.**

## 3.6 Адиабатический режим

### 3.6.1 Аналитическое решение

Адиабатический режим соответствует пределу больших $\gamma$. Этот предел представляет особый интерес ввиду того, что без управления искомая вероятность перехода экспоненциально стремится к нулю.

В этом пределе, как мы показываем в разделе 3.8, элементы унитарной матрицы можно приближённо представить в виде

$$|u_{jl}(2\sqrt{\gamma}\,t, 2\sqrt{\gamma}\,t_0)|^2 = \frac{1 \pm \tau(t)\tau(t_0)}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{[1-\tau(t_0)^2][1-\tau(t)^2]}\cos(\gamma\Delta\omega_{t,t_0}), \tag{3.24}$$

где знаки «плюс» и «минус» в $\pm$ соответствуют $l = j$ и $l = 1 - j$ соответственно,

$$\begin{aligned} \tau(t) &= \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}, \quad \Delta\omega_{t,t_0} = \omega(t) - \omega(t_0), \\ \omega(t) &= \operatorname{sgn}(t) \ln(|t| + \sqrt{1+t^2}) + t\sqrt{1+t^2}, \end{aligned} \tag{3.25}$$

**Теорема 3.3.** *Если в качестве элементов унитарной матрицы в задаче (3.12) взять приближённую формулу (3.24), то максимальное значение целевой функции в пределе $\gamma \to \infty$ составит*

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \frac{1}{2}\left\{1 + \left(\cos\frac{\pi}{N+1}\right)^{N+1}\right\}. \tag{3.26}$$

*Решение, доставляющее это значение (вообще говоря, неединственное), имеет вид*

$$t_k = -2\sqrt{\gamma}\operatorname{ctg}\left(\frac{\pi k}{N+1}\right) + O\left(\frac{2\pi}{\sqrt{\gamma}\omega'(t_k)}\right), \tag{3.27}$$

*где $\omega'(t)$ — производная от $\omega(t)$.*

*Доказательство.* Определим функции

$$\begin{aligned} h_0^j(t_N) &= |u_{0j}(+\infty, t_N)|^2, \\ h_k^j(t_{N-k}, t_{N-k+1}, \ldots, t_N) &= \sum_{j_{N-k+1},\ldots,j_N \in \{0,1\}} \prod_{l=N-k}^{N} |u_{j_{l+1},j_l}(t_{l+1}, t_l)|^2, \end{aligned}$$

$k = 1, 2, \ldots, N$, $j = 0, 1$. Здесь $j_{N-k} = j$, $j_{N+1} = 0$ и $t_{N+1} = +\infty$. Очевидно,

$$\begin{aligned} h_{k+1}^j(t_{N-k-1}, \ldots, t_N) = {} & |u_{0j}(t_{N-k}, t_{N-k-1})|^2 h_k^0(t_{N-k}, \ldots, t_N) + \\ & + |u_{1j}(t_{N-k}, t_{N-k-1})|^2 h_k^1(t_{N-k}, \ldots, t_N). \end{aligned}$$

По индукции нетрудно показать, что

$$\begin{aligned} h_k^j(2\sqrt{\gamma}\,t_{N-k}, \ldots, 2\sqrt{\gamma}\,t_N) = {} & \\ = \frac{1}{2}\left\{1 \pm \tau_N \prod_{l=N-k+1}^{N} \left[\tau_l\tau_{l-1} + \sqrt{(1-\tau_l^2)(1-\tau_{l-1}^2)}\cos(\gamma\Delta\omega_l)\right]\right\}, & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \lim_{t_0\to-\infty} h_N^0(2\sqrt{\gamma}\,t_0, 2\sqrt{\gamma}\,t_1, \ldots, 2\sqrt{\gamma}\,t_N) = {} & \\ = \frac{1}{2}\left\{1 - \tau_1 \prod_{l=2}^{N} \left[\tau_l\tau_{l-1} + \sqrt{(1-\tau_l^2)(1-\tau_{l-1}^2)}\cos(\gamma\Delta\omega_l)\right]\tau_N\right\}, & \end{aligned}$$

где знаки «плюс» и «минус» в первой формуле соответствуют $j = 0$ и $j = 1$ соответственно, также для краткости мы обозначили $\tau_l = \tau(t_l)$, $\Delta\omega_l = \Delta\omega_{t_l,t_{l-1}}$, а произведение $\prod_{l=2}^{N}$ положим по определению равным единице при $N = 1$ (таким образом, выражение в фигурных скобках принимает в этом случае вид $1 - \tau_1\tau_N \equiv 1 - \tau_1^2$).

Поскольку $\tau_l \in [-1, 1]$, можно сделать замену $\tau_l = \cos\alpha_l$, $\alpha_l \in [0, \pi]$, которая даёт

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \frac{1}{2}\{1 - \cos\alpha_1 \prod_{l=2}^{N}(\cos\alpha_l\cos\alpha_{l-1} + \sin\alpha_l\sin\alpha_{l-1}\cos\gamma\Delta\omega_l)\cos\alpha_N\}, \tag{3.28}$$

где $\alpha_k = \mathrm{arcctg}(t_k)$, $k = 1, \ldots, N$. Рассмотрим множители $\cos\gamma\Delta\omega_l$. Поскольку мы рассматриваем предел больших $\gamma$, эти множители осциллируют с бесконечно большими частотами порядка $\gamma\omega'(t_l)$ при изменении $t_l$. Эти быстрые осцилляции можно видеть, например, на рисунке 3.2 (правый нижний график, случай $\gamma = 5$, $N = 3$). Это означает, что в пределе $\gamma \to \infty$ можно приписать этим косинусам любые значения на отрезке $[-1, 1]$, изменяя $t_l$ лишь на бесконечно малые величины, т.е. не влияя на другие части целевой функции. Приписывание значения $+1$ всем этим косинусам даёт

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \frac{1}{2}\left\{1 - \cos\alpha_1 \prod_{l=2}^{N}\cos(\alpha_{l-1} - \alpha_l)\cos\alpha_N\right\}.$$

Положим $\pi - \alpha_1 = \varphi_0$, $\alpha_{l-1} - \alpha_l = \varphi_{l-1}$ ($l = 2, \ldots, N$), $\alpha_N = \varphi_N$. Тогда

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \frac{1}{2}\left\{1 + \prod_{l=0}^{N}\cos\varphi_l\right\}$$

и исходная задача максимизации сведётся к задаче

$$\begin{cases} \displaystyle\prod_{l=0}^{N}\cos\varphi_l \to \max_{\varphi_0,\ldots,\varphi_N}, \\ \displaystyle\sum_{l=0}^{N}\varphi_l = \pi. \end{cases}$$

Нетрудно показать (см., например, [288]), что решение имеет вид $\varphi_l = \pi/(N+1)$ для всех $l$. Следовательно, $\alpha_l = \pi - \pi l/(N+1)$, $\tau_l = -\cos[\pi l/(N+1)]$,

$t_l = -\operatorname{ctg}(\pi l/(N+1))$, $l = 1, \ldots, N$. Таким образом, оптимальные моменты измерений лежат в окрестностях моментов $-2\sqrt{\gamma}\operatorname{ctg}\left(\frac{\pi k}{N+1}\right)$ радиусов порядка $2\pi/\sqrt{\gamma}\omega'(t_k)$. Максимальное значение вероятности перехода даётся выражением (3.26).

Ввиду утверждения 3.1 (с $\Delta\varphi = \pi$ в правой части (3.13), поскольку, с точностью до фазы, $U(+\infty, -\infty)^\dagger |0\rangle = |1\rangle$ при больших $\gamma$) не существует решения, при котором целевая функция превосходит правую часть (3.26). Следовательно, решение (3.27) оптимально. Теорема доказана. □

При $N \to \infty$ максимальное значение целевой функции (3.26) стремится к единице (как $1/(4N)$), что соответствует квантовому эффекту Зенона.

Решение неединственно при $N \geqslant 2$. В случае $N = 2$ имеем

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \frac{1}{2}\left\{1 - \tau_1[\tau_1\tau_2 + \sqrt{(1-\tau_1^2)(1-\tau_2^2)}\cos\gamma\Delta\omega_2]\tau_2\right\}$$

($\tau_k = \cos\alpha_k$). Если положить, как и ранее, $\cos\gamma\Delta\omega_2 = +1$, тогда решение имеет вид $\tau_1 = -\cos(\pi/3) = -1/2$, $\tau_2 = -\cos(2\pi/3) = 1/2$. Но если положить $\cos\gamma\Delta\omega_2 = -1$, но поменять знак, например, $\tau_1$, то, очевидно, значение целевой функции будет тем же. Поэтому в этом случае $\tau_1 = \tau_2 = 1/2$ тоже будет оптимальным решением. Равенство $\tau_1$ и $\tau_2$ не означает, что два измерения проводятся в один и тот же момент времени, но означает, что эти моменты времени отстоят друг от друга на бесконечно малый промежуток, а именно, такой промежуток, что $\cos\gamma\Delta\omega_2 = -1$.

Таким образом, аналитическое решение даёт только окрестности оптимальных моментов времени, радиус которых стремится к нулю при $\gamma \to \infty$. Точные значения моментов при конечных $\gamma$ можно определить численно при помощи алгоритмов поиска локального максимума при начальной точке $(t_1, \ldots, t_N)$, задаваемой формулой (3.27). Эта проблема эффективно разрешима.

Однако трудность состоит в том, что при малых $|t_k|$ (что которые возникают при больших $N$) перестают работать приближённые формулы для функций параболического цилиндра, с помощью которых выведена формула (3.24), см. раздел 3.8, поэтому алгоритм находит решение, далёкое от оптимального в ис-

ходной задаче. Рассмотрим возможные способы преодоления этой трудности.

Первый способ заключается в нахождении оптимальных моментов времени, близких к нулю, при помощи какого-то общего метода глобальной оптимизации, например, метода случайного поиска или имитации отжига. Эта задача имеет малую размерность (поскольку требуется решения для малого числа моментов времени) и потому может быть эффективно решена. Для бóльших времён можно по-прежнему использовать приближение больших $\gamma$.

Второй способ заключается в использовании алгоритма дифференциальной эволюции (разновидность генетических алгоритмов, или, более общо, эволюционных алгоритмов) [296] для нахождения максимума не в бесконечно малой окрестности точки $(t_1, \ldots, t_N)$, задаваемой формулой (3.27), а в более широкой области. Алгоритм дифференциальной эволюции, будучи алгоритмом поиска глобального максимума, позволяет находить не только ближайший локальный максимум, который может оказаться не глобальным, но и более отдалённые. Вычисления по этому методу дают хорошие результаты: разность между значениями целевой функции, которые находит этот метод, и теми, которые находит более точный метод раздела 3.4 — меньше $0.01$ для $\gamma \geqslant 1$ и меньше или порядка $0.01$ для $0.5 \leqslant \gamma < 1$ (т.е. когда приближение больших $\gamma$, строго говоря, и не обязано работать). Но данный метод намного менее затратен с вычислительной точки зрения, нежели алгоритм раздела 3.4. Напомним, что при $\gamma \leqslant 0.5$ хорошие результаты даёт вычислительно простой алгоритм для малых $\gamma$, описанный в разделе 3.5. Следовательно, этими двумя вычислительно простыми алгоритмами мы охватываем весь диапазон изменения $\gamma$.

Подчеркнём, что в алгоритме дифференциальной эволюции мы ограничиваем область поиска оптимума некоторой окрестностью точки $(t_1, \ldots, t_N)$, задаваемой (3.27). Если мы будем использовать этот алгоритм для поиска оптимума во всём пространстве $\mathbb{R}^N$, то он, как и другие методы глобальной оптимизации, применяемые «в лоб», будет давать большую ошибку: находимые значения целевой функции будут меньше максимальных на величину $0.1$ и более. Поэтому к успеху в данном случае приводит именно сочетание аналитических методов и

численных.

### 3.6.2 Взаимосвязь с задачей оптимального управления с варьируемыми наблюдаемыми

В работах [264, 288] была рассмотрена следующая задача оптимального управления двухуровневой системой, основанной на измерениях: пусть унитарная эволюция отсутствует, а начальное состояние — чистое с вектором Блоха $\boldsymbol{w}_0$. Нам необходимо выполнить $N$ неселективных измерений произвольных наблюдаемых, чтобы максимизировать вероятность перехода в другое чистое состояние с вектором Блоха $\boldsymbol{w}_{\text{target}}$. Угол между $\boldsymbol{w}_0$ и $\boldsymbol{w}_{\text{target}}$ обозначим $\Delta\varphi$. Опишем решение этой задачи. Обозначим $\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_N$ векторы, получаемые в результате вращения вектора $\boldsymbol{w}_0$ на углы $k\Delta\varphi/(N+1)$ ($k = 1, \ldots, N-1$) в плоскости векторов $\boldsymbol{w}_0$ и $\boldsymbol{w}_{\text{target}}$. Тогда оптимальные наблюдаемые — это проекторы на состояния с векторами Блоха $\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_N$ (в парах с проекторами на $-\boldsymbol{w}_1, \ldots, -\boldsymbol{w}_N$ соответственно). Обозначим эти проекторы $P_{\boldsymbol{w}_1}, \ldots, P_{\boldsymbol{w}_N}$. Оптимальное значение целевой функции составит

$$\frac{1}{2}\left\{1 + \left(\cos\frac{\Delta\varphi}{N+1}\right)^{N+1}\right\}.$$

Это решение можно обобщить на случай наличия унитарной динамики, что также рассмотрено в [264]. Пусть динамика системы описывается семейством унитарных операторов $U(t, t_0)$. Нам необходимо найти $N$ наблюдаемых, измеряемых в фиксированные моменты времени $t_0 \leqslant t_1 \leqslant \ldots \leqslant t_N \leqslant T$, при которых вероятность перехода в заданное состояние $\rho_{\text{target}}$ в конечный момент времени $T$ максимальна. Эта задача эквивалентна предыдущей задаче без унитарной эволюции, но с целевым состоянием $U(T, t_0)^\dagger \rho_{\text{target}} U(T, t_0)$. Если $P_{\boldsymbol{w}_1}, \ldots, P_{\boldsymbol{w}_N}$ — оптимальные проекторы в задаче без эволюции, то оптимальные проекторы в данной задаче имеют вид

$$U(t_k, t_0) P_{\boldsymbol{w}_k} U(t_k, t_0)^\dagger, \quad k = 1, \ldots, N.$$

В нашем случае $t_0 = -\infty$, $T = +\infty$, начальное состояние $\rho(-\infty) = |0\rangle\langle 0|$,

целевое состояние $\rho_{\text{target}} = |0\rangle\langle 0|$ и, наконец,

$$U(+\infty, -\infty)^\dagger \rho_{\text{target}} U(+\infty, -\infty) = |1\rangle\langle 1| .$$

Поэтому $\Delta\varphi = \pi$. Далее, в нашей задаче проектор, определяющий наблюдаемую фиксирован и равен $P_0 = |0\rangle\langle 0|$, но мы можем выбирать моменты измерений $t_1, \ldots, t_N$. Следовательно, мы должны стремится выбрать моменты такими, что

$$U(t_k, t_0) P_{\boldsymbol{w}_k} U(t_k, t_0)^\dagger = P_0, \quad k = 1, \ldots, N, \tag{3.29}$$

или, эквивалентно,

$$U(t_k, t_0)^\dagger P_0 U(t_k, t_0) = P_{\boldsymbol{w}_k}, \quad k = 1, \ldots, N,$$

где $\boldsymbol{w}_k$ определены выше. Конечно, в общем случае это невозможно. Но рассмотрим траекторию вектора Блоха состояния $U(t, -\infty)^\dagger |0\rangle$, $-\infty \leqslant t \leqslant +\infty$, при больших $\gamma$. Вектор выходит из северного полюса единичной сферы при $t = -\infty$ и завершает движение в южном полюсе при $t = +\infty$. Как видно из приведённых ниже формул (3.37) и (3.38), вектор движется по дуге, на которой и расположены векторы Блоха, соответствующие проекторам на оптимальные состояния в задаче с варьируемыми наблюдаемыми. Благодаря этому максимальное значение целевой функции приближается к верхней границе (3.26) в пределе больших $\gamma$.

Таким образом, в этом случае можно говорить о своеобразной двойственности между задачами с фиксированными моментами измерений, но варьируемыми наблюдаемыми, и задачей с фиксированными наблюдаемыми, но варьируемыми моментами времени.

На рисунке 3.5 показана зависимость максимальной вероятности перехода от $\gamma$ при различных $N$. Мы видим, что для большого числа измерений зависимость немонотонна (также мы это видим и из рисунка 3.4). Начальное убывание вероятности перехода с ростом $\gamma$ находится в согласии с формулой Ландау–Зинера. Но при $\gamma$, превышающих определённое значение (которое составляет от $0.7$ до $0.9$ в зависимости от $N$), вероятность возрастает до теоретического

предела (3.26). Это происходит благодаря быстрым осцилляциям, которые позволяют выбрать такие моменты, что «идеальные» условия (3.29) приблизительно выполнены с большой точностью.

Немонотонная зависимость максимальной вероятности перехода от силы взаимодействия между двумя диабатическими энергетическими уровнями перекликается с немонотонной зависимостью вероятности перехода от силы взаимодействия и температуры для системы Ландау–Зинера, взаимодействующей с гармоническим осциллятором, обнаруженной в [105].

### 3.6.3 Задача на максимин

Как показано выше, при больших $\gamma$ вероятность перехода быстро осциллирует благодаря множителям $\cos(\gamma\Delta\omega_l)$ в (3.28). Точный выбор моментов времени в окрестностях радиусов прядка $2\pi/\sqrt{\gamma}\omega'(t_k)$ позволяет зафиксировать желаемые значения этих множителей. Но на практике эти результаты можно применять только если длительность реального измерения не превышает $2\pi/\sqrt{\gamma}\omega'(t_k)$ (мгновенное измерение — это математическая идеализация). В противном случае фактические значения измерений невозможно контролировать с достаточной точностью и фактическая вероятность перехода может быть далека от оптимальной. Это можно видеть из рисунков 3.2 и 3.3 (правые нижние графики): значение вероятности перехода становится далёким от оптимального, если мы стремимся провести измерения в оптимальные моменты, но не можем с достаточной точностью обеспечить проведение измерения в нужный момент.

Поэтому имеет смысл рассмотреть так называемую задачу на максимин, то есть задачу максимизации вероятности перехода при срабатывании худшего случая в рамках окрестностей, определяемых точностью прибора. Иными словами, для заданных нами моментов измерений $\tau_1, \ldots, \tau_N$ измерительный прибор «выбирает» значения $\cos(\gamma\Delta\omega_l)$, которые минимизируют вероятность перехода. За-

дача формулируется следующим образом:

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \max_{\alpha_1 \geqslant \ldots \geqslant \alpha_N} \min_{\Delta\omega_2,\ldots,\Delta\omega_N} \frac{1}{2}\left\{1 - \cos\alpha_1 \prod_{l=2}^{N} (\cos\alpha_l \cos\alpha_{l-1} + \sin\alpha_l \sin\alpha_{l-1} \cos\gamma\Delta\omega_l) \cos\alpha_N\right\}.$$

Рассмотрим эту задачу. Поскольку каждый член $\cos(\gamma\Delta\omega_l)$ входит в целевую функцию линейно, значения, доставляющие экстремум, составляют $\pm 1$. Следовательно, задача переписывается в виде

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \max_{\alpha_1 \geqslant \ldots \geqslant \alpha_N} \min_{\text{знаки}} \frac{1}{2}\left\{1 - \cos\alpha_1 \prod_{l=2}^{N} \cos(\alpha_{l-1} \pm \alpha_l) \cos\alpha_N\right\}. \quad (3.30)$$

Эта задача эквивалентна следующей:

$$\min_{\alpha_1 \geqslant \ldots \geqslant \alpha_N} \max_{\text{знаки}} \cos\alpha_1 \prod_{l=2}^{N} \cos(\alpha_{l-1} \pm \alpha_l) \cos\alpha_N. \quad (3.31)$$

**Теорема 3.4.** *Все решения задачи на максимин (3.30) таковы:*

*а)* $\alpha_1 = \pi/2$*, все остальные* $\alpha_l$ *произвольны, но не превосходят* $\alpha_1$*;*

*б)* $\alpha_N = \pi/2$*, все остальные* $\alpha_l$ *произвольны, но не менее, чем* $\alpha_N$*;*

*в) каждое* $\alpha_l$ *— либо, либо* $\pi/2$*, либо* $\pi$*, причём* $\alpha_l = \pi/2$ *по крайней мере для одного* $l$ *и имеет место цепочка неравенств* $\alpha_1 \geqslant \alpha_2 \geqslant \ldots \geqslant \alpha_N$*.*

*Во всех случаях вероятность перехода составит* $\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = 1/2$*.*

*Доказательство.* Очевидно, вероятность перехода в случаях а)—в) равна 1/2. Докажем, что эти и только эти комбинации аргументов дают оптимальное решение. Достаточно показать, что для других значений $\alpha_l$ можно выбрать знаки в (3.31) таким образом, чтобы правая часть (3.31) была положительна.

Пусть оба числа $\alpha_1$ и $\alpha_N$ принадлежат либо $[0, \pi/2)$, либо $(\pi/2, \pi]$. Тогда $\cos\alpha_1 \cos\alpha_N > 0$. Припишем всем знакам значение «$-$». Все разности $\alpha_{l-1} - \alpha_l$ принадлежат интервалу $(-\pi/2, \pi/2)$ и, следовательно, $\cos(\alpha_{l-1} - \alpha_l) > 0$. Тогда правая часть (3.31) положительна.

Пусть теперь $\alpha_1 \in (\pi/2, \pi]$ и $\alpha_N \in [0, \pi/2)$. Тогда $\cos\alpha_1 \cos\alpha_N < 0$. Если решение не укладывается в случай в), то существуют $\alpha_l \in (0, \pi/2) \cup (\pi/2, \pi)$.

Для определённости предположим, что существует по крайней мере одно $\alpha_l \in (0, \pi/2)$. Имеем $\alpha_1 \geqslant \alpha_2 \ldots \geqslant \alpha_N$. Обозначим через $k$ такое число, что $\alpha_k \in [\pi/2, \pi]$, $\alpha_{k+1} \in (0, \pi/2)$. Припишем всем знакам для $l \leqslant k$ и $l \geqslant k+2$ значение «$-$», а знаку для $l = k+1$ — значение «$+$». Тогда

$$\prod_{l=1}^{k} \cos(\alpha_{l-1} - \alpha_l) > 0, \quad \prod_{l=k+2}^{N} \cos(\alpha_{l-1} - \alpha_l) > 0\,.$$

Но $\alpha_k + \alpha_{k+1} \in (\pi/2, 3\pi/2)$, поэтому $\cos(\alpha_k + \alpha_{k+1}) < 0$. Итого получаем

$$\cos\alpha_1 \prod_{l=1}^{k} \cos(\alpha_{l-1} - \alpha_l) \cos(\alpha_k + \alpha_{k+1}) \prod_{l=k+2}^{N} \cos(\alpha_{l-1} - \alpha_l) \cos\alpha_N > 0.$$

□

Таким образом, если длительность измерения сравнима или превышает период осцилляций $4\pi/\sqrt{\gamma}\omega'(t_k)$, то оптимальное решение — это единственное измерение в момент $t = 0$, что соответствует $\alpha = \pi/2$. Повторные измерения в этот момент и в моменты $t = \pm\infty$, которые соответствуют $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi$, не влияют на вероятность перехода. Вероятность перехода составит

$$\langle 0|\rho(+\infty)|0\rangle = \frac{1 - \tau_1^2}{2},$$

Она не содержит осциллирующих членов, которые требуют точного выбора моментов измерений.

## 3.7 Приближённое выражение для вероятности перехода в ультрадиабатическом режиме

Этот раздел посвящён выводу формул (3.21) в приближении первого порядка по $\gamma$. Во-первых, получим приближённые выражения матричных элементов операторов $U(t, t_0)$ в нулевом порядке по $\gamma$. Подстановка $\gamma = 0$ в (3.5) даст постоянные населённости $|a(t)|^2$ и $|b(t)|^2$. Чтобы убедиться в этом, мы можем воспользоваться формулой $D_0(e^{3i\pi/4}t) = e^{it^2/4}$ или просто решить систему (3.3) с

$\gamma = 0$. В частности, при начальном условии $|a(-\infty)| = 1$ мы имеем $|a(+\infty)| = 1$. Это соответствует формуле Ландау–Зинера в нулевом порядке по $\gamma$.

Для получения формул первого порядка по $\gamma$ мы воспользуемся формулой для производной функции параболического цилиндра [126]:

$$\left.\frac{\partial D_{i\gamma}(e^{3i\pi/4}t)}{\partial\gamma}\right|_{\gamma=0} = \left\{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}e^{i\pi/4}\mathscr{F}^*(t/\sqrt{2}) - \frac{t^2}{2}\,{}_2F_2\left(-\frac{it^2}{2}\right) - \frac{i}{2}(\ln 2 + \boldsymbol{C})\right\} e^{it^2/4},$$

где

$${}_pF_q\left(\left.\begin{matrix}a_1,\ldots,a_p\\ b_1,\ldots,b_q\end{matrix}\right| z\right) \equiv {}_pF_q(a_1,\ldots,a_p;b_1,\ldots,b_q|z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a_1)_n\cdots(a_p)_n}{(b_1)_n\cdots(b_q)_n}\frac{z^n}{n!} \quad (3.32)$$

— обобщённая гипергеометрическая функция, $(a)_n = a(a+1)\cdots(a+n-1)$ — символ Похгаммера ($(a)_0 = 1$). Выше фигурирует функция ${}_2F_2(1,1;3/2,2|z)$, у которой мы для краткости не будем указывать параметры, а только аргумент.

Поскольку

$$\sqrt{\gamma}D_{-i\gamma-1}(-e^{i\pi/4}t) = \sqrt{\gamma}D_{-1}(-e^{i\pi/4}t) + O(\gamma^{3/2}),$$

нам не нужна производная $D_{-i\gamma-1}(-e^{i\pi/4}t)$, если мы интересуемся только первым порядком по $\gamma$. Справедлива формула [34]

$$D_{-1}(-e^{i\pi/4}t) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\,e^{it^2/4}\left[1 + \sqrt{2}e^{i\pi/4}\mathscr{F}^*(t/\sqrt{2})\right].$$

Тогда матричные элементы $u_{j0}(t,t_0)$, $j = 0,1$, можно записать в виде

$$\begin{aligned}
u_{j0}(t,t_0) &= \tilde{u}_{j0}(t,t_0)e^{i(t-t_0)^2/4}\left(\frac{1+t^2}{1+t_0^2}\right)^{i\gamma/2},\\
\tilde{u}_{00}(t,t_0) &= 1 + \pi\gamma\mathscr{F}(t_0/\sqrt{2})[\mathscr{F}^*(t/\sqrt{2}) - \mathscr{F}^*(t_0/\sqrt{2})] -\\
&\quad - \frac{\gamma t^2}{2}\,{}_2F_2(-\frac{it^2}{2}) + \frac{\gamma t_0^2}{2}\,{}_2F_2(-\frac{it_0^2}{2}) - \frac{i\gamma}{2}\ln\frac{1+t^2}{1+t_0^2} + O(\gamma^2),\\
\tilde{u}_{10}(t,t_0) &= -i\sqrt{\pi\gamma}[\mathscr{F}(t/\sqrt{2}) - \mathscr{F}(t_0/\sqrt{2})] + O(\gamma^{\frac{3}{2}}).
\end{aligned} \quad (3.33)$$

Поскольку уравнения (3.3) переходят друг в друга при комплексном сопряжении и подстановке $t \to -t$, имеем $u_{j1}(t,t_0) = u^*_{1-j,0}(-t,-t_0)$. Итак, мы получили выражения для матричных элементов в первом порядке по $\gamma$.

Выделение члена $[(1+t^2)/(1+t_0^2)]^{i\gamma/2}$ связано с неограниченностью функции ${}_2F_2(1,1;3/2,2;-it^2/2)$ при $t\to\pm\infty$, что мы увидим далее. Сейчас объясним это следующим образом. Член $|t|^{i\gamma}$ в асимптотике (3.6) равен единице по абсолютному значению, но в первом порядке по $\gamma$ он составит $1+i\gamma\ln|t|$. Это неограниченная функция, которая не является приближением к $|t|^{i\gamma}$ при больших $t$. Эта асимптотика для малых $\gamma$ работает только при ограниченных $|t|$. Но мы хотим рассматривать также и случай $t\to\pm\infty$, поскольку и формула Ландау–Зинера рассматривает именно этот случай. Для этого мы должны этот член выделить. В противном случае, как мы увидим, приближение первого порядка для матричных элементов не будет работать при больших $|t|$ и не сможет воспроизвести первый порядок даже в случае отсутствия измерений (формулу Ландау–Зинера).

Поскольку функция $|t|^{i\gamma}$ не определена при $t=0$, мы выделим член $(1+t^2)^{i\gamma/2}$, который асимптотически эквивалентен $|t|^{i\gamma}$ при $t\to\pm\infty$.

Вычислим пределы $t_0\to-\infty$ и $t\to+\infty$. Воспользуемся следующим асимптотическим разложением для обобщённой гипергеометрической функции [203]:

$$ {}_2F_2\left(\left.\begin{matrix}1,a\\b,c\end{matrix}\right|z\right)\simeq\frac{\Gamma(b)\Gamma(c)}{\Gamma(a)}[K_{22}(z)+L_{22}(-z)] $$

при $|z|\to\infty$, $-3\pi/2<\arg z<\pi/2$. Здесь

$$ K_{22}(z)=z^v e^z\,{}_2F_0(b-a,c-a|z^{-1}),\quad v=1+a-b-c. $$

Ряд (3.32) расходится при $p\geqslant q+2$ и $z\neq0$, но здесь функция ${}_2F_0$ понимается в смысле асимптотического ряда (3.32). Символ $\simeq$ означает, что правая часть есть асимптотическое разложение функции, стоящей в левой части. Далее, определение функции $L_{22}(-z)$ дано в [228, формула (3), с. 15]. Алгоритм получения этой формулы приводится в [229]. Мы не будем выписывать всю формулу в виде ряда из-за её громоздкости, нам понадобится только первый член:

$$ L_{22}(-z)=\frac{1}{\sqrt{\pi}z}[\ln z-\psi(1/2)]+\ldots=\frac{1}{\sqrt{\pi}z}[\ln 4z+\boldsymbol{C}]+\ldots $$

(следующий член имеет порядок $1/z^2$), где $\psi(x)$ — дигамма-функция, т.е. логарифмическая производная гамма-функции, $\psi(1/2)=-\boldsymbol{C}-2\ln2$, $\boldsymbol{C}\approx0.577-$

константа Эйлера–Маскерони. Таким образом,

$$ {}_2F_2\left(\begin{matrix}1,1\\ \frac{3}{2},2\end{matrix}\middle|-\frac{it^2}{2}\right)=\frac{\ln(2it^2)+\boldsymbol{C}}{it^2}+O(t^{-3}). $$

Функция $(t^2/2)\,{}_2F_2(-it^2/2)$ логарифмически расходится, когда $|t|$ растёт. Но расходящийся множитель компенсируется множителем $-\frac{i}{2}\ln(1+t^2)/(1+t_0^2)$ выражениях для $u_{00}(t,t_0)$ и $u_{11}(t,t_0)$. В этом и состояла причина выделения множителя $[(1+t^2)/(1+t_0^2)]^{i\gamma/2}$.

Итак,

$$ \begin{aligned}
\tilde u_{00}(t,-\infty)&=1-\frac{\pi\gamma}{2}\left[1+\sqrt{2}e^{i\pi/4}\mathscr{F}^*(t/\sqrt{2})\right]-\frac{\gamma t^2}{2}\,{}_2F_2(-\frac{it^2}{2})-\\
&\quad-\frac{i\gamma}{2}\{\ln[2(1+t_0^2)]+\boldsymbol{C}\}+\frac{\pi\gamma}{4}+O(\gamma^2),\\
\tilde u_{00}(+\infty,t_0)&=1+\pi\gamma\mathscr{F}(t_0/\sqrt{2})[\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}-\mathscr{F}^*(t_0/\sqrt{2})]+\frac{\gamma t_0^2}{2}\,{}_2F_2(-\frac{it_0^2}{2})+\\
&\quad+\frac{i\gamma}{2}\{\ln[2(1+t_0^2)]+\boldsymbol{C}\}-\frac{\pi\gamma}{4}+O(\gamma^2),\\
\tilde u_{10}(t,-\infty)&=e^{-i\pi/4}\sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}}[1+\sqrt{2}e^{-i\pi/4}\mathscr{F}(t/\sqrt{2})]+O(\gamma^{3/2}),\\
\tilde u_{10}(+\infty,t_0)&=e^{-i\pi/4}\sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}}[1-\sqrt{2}e^{-i\pi/4}\mathscr{F}(t_0/\sqrt{2})]+O(\gamma^{3/2}),\\
\tilde u_{00}(+\infty,-\infty)&=1-\pi\gamma+O(\gamma^2),\quad \tilde u_{10}(+\infty,-\infty)=e^{-i\pi/4}\sqrt{2\pi\gamma}+O(\gamma^{3/2}).
\end{aligned} \tag{3.34} $$

Соответственно,

$$ \begin{aligned}
|u_{00}(t,-\infty)|^2&=1-\frac{\pi\gamma}{2}-\sqrt{2}\pi\gamma\ \mathrm{Re}\{e^{i\pi/4}\mathscr{F}^*(t/\sqrt{2})\}-\\
&\quad-\gamma t^2\ \mathrm{Re}\ {}_2F_2(-it^2/2)+O(\gamma^2),\\
|u_{00}(t,\tau)|^2&=1+\mathrm{Re}\{2\pi\gamma\mathscr{F}(\tau/\sqrt{2})[\mathscr{F}^*(t/\sqrt{2})-\mathscr{F}^*(\tau/\sqrt{2})]-\\
&\quad-\gamma t^2\,{}_2F_2(-it^2/2)+\gamma\tau^2\,{}_2F_2(-i\tau^2/2)\}+O(\gamma^2),\\
|u_{00}(+\infty,\tau)|^2&=1-\frac{\pi\gamma}{2}+\mathrm{Re}\Big\{2\pi\gamma\mathscr{F}(\tau/\sqrt{2})\Big[\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}-\mathscr{F}^*(\tau/\sqrt{2})\Big]+\\
&\quad+\gamma\tau^2\,{}_2F_2(-i\tau^2/2)\Big\}+O(\gamma^2),
\end{aligned} \tag{3.35} $$

Также мы видим, что

$$ |u_{00}(+\infty,-\infty)|^2=1-2\pi\gamma+O(\gamma^2), $$

что подтверждает формулу Ландау–Зинера в первом порядке по $\gamma$.

В приближении первого порядка по $\gamma$ в сумме (3.12) можно оставить только члены с $j_1 = j_2 = \ldots = j_N = 0$. В самом деле, из (3.33) и (3.34) следует, что все остальные члены имеют порядок $\gamma^2$ и выше. Тогда подстановка формул (3.35) в (3.12) приводит к (3.21), что нам и требовалось.

**Замечание 3.2.** Поскольку нам нужны только абсолютные значения матричных элементов, в выделении множителя $[(1+t^2)/(1+t_0^2)]^{i\gamma/2}$ не было необходимости. В самом деле, в величины $|u_{jj}(t,t_0)|^2$ в первом порядке входит только вещественная часть $t^2\,{}_2F_2$, которая не содержит расходящихся членов. Но этот приём может быть важен в более общей ситуации, где нас могут интересовать не только вероятность перехода, но и фаза — например, в интерферометрии Ландау–Зинера–Штюкельберга. Также без этого приёма не обойтись, если нас интересуют приближения более высокого порядка по $\gamma$.

## 3.8 Приближённое выражение для элементов унитарной матрицы в адиабатическом режиме

В этом разделе мы получим формулу (3.28). В пределе больших $\gamma$ имеют место следующие асимптотические формулы для функций параболического цилиндра [141, 261]:

$$\begin{aligned} D_{i\gamma}(2e^{3i\pi/4}\sqrt{\gamma}\,t) &= \exp\left\{\frac{\pi\gamma}{4} - \frac{i\gamma}{2}(1-\ln\gamma) - i\gamma\omega(t)\right\}\times \\ &\quad\times\sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\frac{|t|}{\sqrt{1+t^2}}\right)}(1+O(\gamma^{-1})), \\ \sqrt{\gamma}D_{-1-i\gamma}(-2e^{i\pi/4}\sqrt{\gamma}\,t) &= \exp\left\{\frac{\pi\gamma}{4} + \frac{i\gamma}{2}(1-\ln\gamma) - \frac{i\pi}{4} + i\gamma\omega(t)\right\}\times \\ &\quad\times\sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\frac{|t|}{\sqrt{1+t^2}}\right)}(1+O(\gamma^{-1})), \end{aligned} \tag{3.36}$$

где

$$\omega(t) = \operatorname{sgn}(t)\ln(|t|+\sqrt{1+t^2}) + t\sqrt{1+t^2}.$$

Эти асимптотические формулы выведены только при $t \neq 0$, поэтому в разделе 3.6.1 нам требовалась корректировка моментов времени в окрестности нуля по одному из численных методов, не использующих данные приближённые формулы. Тем не менее, интересно заметить, что пределы $t \to \pm 0$ этих формул для $D_{i\gamma}(\pm 2e^{3i\pi/4}\sqrt{\gamma}\,t)$ совпадают и друг с другом, и с асимптотикой $D_{i\gamma}(0)$ при больших $\gamma$. В самом деле, ввиду (3.15),

$$D_{i\gamma}(0) \sim \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left\{\frac{\pi\gamma}{4} - \frac{i\gamma}{2}(1 - \ln\gamma)\right\}$$

(здесь $a \sim b$ означает $\lim\limits_{\gamma\to\infty} a/b = 1$), что совпадает с первой формулой в (3.36) при $t = 0$. Аналогично, пределы при $t \to \pm 0$ вышеприведённых формул для $\sqrt{\gamma}D_{-1-i\gamma}(\pm 2e^{i\pi/4}\sqrt{\gamma}\,t)$ совпадают и друг с другом, и с асимптотикой $D_{-1-i\gamma}(0)$ при больших $\gamma$:

$$\sqrt{\gamma}D_{-1-i\gamma}(0) \sim \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left\{\frac{\pi\gamma}{4} + \frac{i\gamma}{2}(1 - \ln\gamma) - \frac{i\pi}{4}\right\}.$$

В результате подстановки этих асимптотических формул в (3.5) получим

$$\begin{aligned}
a(2\sqrt{\gamma}\,t) &= \tilde{c}_1 e^{i\gamma\omega(t)}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}\right)} + \tilde{c}_2 e^{-i\gamma\omega(t)}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}\right)} + O(\gamma^{-1}),\\
b(2\sqrt{\gamma}\,t) &= \tilde{c}_1 e^{i\gamma\omega(t)}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}\right)} - \tilde{c}_2 e^{-i\gamma\omega(t)}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}\right)} + O(\gamma^{-1}),
\end{aligned} \tag{3.37}$$

где новые константы равны

$$\tilde{c}_j = c_j \exp\left\{\frac{\pi\gamma}{4} \pm \frac{i\gamma}{2}(1 - \ln\gamma) + \frac{3i\pi}{8}\right\},$$

Здесь верхний знак в обозначениях $\pm$ и $\mp$ соответствует $j = 0$, нижний знак соответствует $j = 1$. В дальнейшем мы будем для простоты опускать члены $O(\gamma^{-1})$ и решать задачу в главном порядке. Для начальных условий $a(2\sqrt{\gamma}\,t_0) = 1$ и $b(2\sqrt{\gamma}\,t_0) = 0$ коэффициенты принимают вид

$$\tilde{c}_j = e^{\mp i\gamma\omega(t_0)}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{t_0}{\sqrt{1+t_0^2}}\right)}. \tag{3.38}$$

Для начальных условий $a(2\sqrt{\gamma}\,t_0) = 0$ и $b(2\sqrt{\gamma}\,t_0) = 1$ имеем

$$\tilde{c}_j = \pm e^{\mp i\gamma\omega(t_0)} \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{t_0}{\sqrt{1+t_0^2}}\right)}. \tag{3.39}$$

Вводя переменную $\tau(t)$ согласно (3.25), из (3.37)–(3.39) получаем (3.24).

## 3.9 Итог главы

В этой главе мы решили задачу максимизации вероятности перехода Ландау–Зинера под действием повторяющихся неселективных измерений фиксированной наблюдаемой. Основной приём, который был использован — это метод динамического программирования, который, как известно, является одним из основных методов теории оптимального управления вообще. В этой главе на примере модели Ландау–Зинера показано, что этот метод может быть эффективным при решении задач квантового оптимального управления посредством измерений (как селективных, так и неселективных). Теорема 3.1 о сведении задачи максимизации вероятности перехода к задаче динамического программирования не связана с видом матричных элементов в (3.12) и, следовательно, очевидным образом обобщается на случай произвольных систем произвольной размерности.

Что касается собственно системы Ландау–Зинера, отметим, что диапазон $[0, 5]$ для параметра $\gamma$, для которого построены графики на рисунках 3.4 и 3.5, покрывает значения из экспериментальных работ [111, 200, 260]. Дальнейшее увеличение $\gamma$ почти не изменяет результаты ввиду достижения верхней границы (3.26). Отметим также робастность предложенных методов, если гамильтониан лишь приближённо описывается формулой (3.1) или в случае наличия внешних шумов, поскольку предложенные алгоритмы завершаются поиском локального максимума, который может учесть особенности реальной системы.

При всех $\gamma$ при большом числе измерений вероятность перехода между адиабатическими уровнями энергии стремится к единице (соответственно, между диабатическими состояниями — к нулю), т.е. воспроизводится квантовый эф-

фект Зенона. Но, как можно видеть из рисунка 3.4, сходимость к этому пределу может быть очень медленной, особенно для промежуточных значений $\gamma$ в интервале $[0.2, 2.0]$.

К этой главе примыкает работа автора диссертации [15, в списке публикаций автора], в которой рассматривается классическая динамика, задаваемая уравнением Лиувилля, с дискретными моментами селективных измерений координат и импульса. В эти моменты функция плотности мгновенно меняется (в связи с уточнением состояния частицы), но вместе с тем согласно принципу Ландауэра [216] в измерительном приборе выделяется тепло и возрастает энтропия. В работе выводится соотношение между точностью измерений и возрастанием энтропии в приборе.

В этой главе большую роль играли методы численной оптимизации — алгоритмы имитации отжига и дифференциальной эволюции. Поэтому с точки зрения методов к этой главе также примыкает статья [55], в которой автор настоящей диссертации является одним из соавторов, в которой предлагается квантовый аналог метода ветвей и границ (известного метода решения задач комбинаторной оптимизации) и исследуются его возможности на примере задачи коммивояжёра.

# ГЛАВА 4

# МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА–ЭНСКОГА

## 4.1 Уравнение Больцмана–Энскога

Эта глава посвящена уравнению Больцмана–Энскога, которое описывает кинетику газа из твёрдых шаров:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v_1 \frac{\partial f}{\partial r_1} + Q(f,f), \tag{4.1}$$

$$Q(f,f)(r_1,v_1,t) = na^2 \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21},\omega)[f(r_1,v_1',t)f(r_1+a\omega,v_2',t) - \\ - f(r_1,v_1,t)f(r_1-a\omega,v_2,t)]d\omega dv_2. \tag{4.2}$$

Здесь $f = f(r_1,v_1,t) \geqslant 0$ — функция плотности распределения шаров в фазовой точке $(r_1,v_1)$, где $r_1$ — пространственные координаты шара (т.е. координаты его центра), $v_1$ — скорость шара. Для простоты (чтобы не брать во внимание граничные эффекты) будем считать, что газ заключён в трёхмерный тор $\mathbb{T}^3 = \mathbb{R}^3/(\alpha\mathbb{Z}\times\beta\mathbb{Z}\times\gamma\mathbb{Z})$, где $\alpha,\beta,\gamma$ — некоторые вещественные числа, превосходящие $a$. К динамике твёрдых шаров на торе может быть сведена динамика в прямоугольном параллелепипеде с упругим отражением от стенок. Тогда $r_1 \in \mathbb{T}^3$, $v_1 \in \mathbb{R}^3$, $t \in \mathbb{R}$, $\frac{\partial}{\partial r_1}$ — градиент по переменной $r_1$, $n, a > 0$ — положительные постоянные. Постоянная $a$ — диаметр шара.

Смысл постоянной $n$ зависит от нормировки функции $f$. Если функция $f$ нормирована на единицу, т.е. $\int f dr_1 dv_1 = 1$ (тогда $f$ — функция плотности вероятности), то $n$ — число шаров в газе (обозначим его через $N$). Если $f$ нормирована на число шаров $N$, то $n = 1$. Если $f$ нормирована на объём $V$ ёмкости, в которую заключён газ (в нашем случае $V = \alpha\beta\gamma$), то $n = \frac{N}{V}$ — концентрация шаров. Такую нормировку и будем предполагать в дальнейшем.

Далее,

$$\begin{aligned} v_1' &= v_1 + (v_{21}, \omega)\omega, \\ v_2' &= v_2 - (v_{21}, \omega)\omega, \end{aligned} \tag{4.3}$$

$v_{21} = v_2 - v_1$, $\omega \in S^2$ ($S^2$ — единичная сфера в $\mathbb{R}^3$), $(\cdot, \cdot)$ — скалярное произведение. $v_1$ и $v_2$ имеют смысл скоростей первого и второго шара до столкновения, $v_1'$ и $v_2'$ — после столкновения. $\omega$ имеет смысл единичного вектора, направленного из центра второго шара в центр первого шара. Выражение $Q(f, f)$ называется интегралом столкновений. Интегрирование в нём ведётся по области

$$\Omega_{v_1} = \{(\omega, v_2) : \omega \in S^2, v_2 \in \mathbb{R}^3, (v_{21}, \omega) \geqslant 0\} \subset S^2 \times \mathbb{R}^3.$$

Это уравнение отличается от уравнения Больцмана для твёрдых шаров слагаемыми $\pm a\omega$ в аргументах $f$ в интеграле столкновений. А именно, уравнение Больцмана предполагает, что размером шаров можно пренебречь (в сравнении с пространственным масштабом, на котором функция плотности $f$ существенно меняется), тогда как уравнение Больцмана–Энскога учитывает этот размер. Формально уравнение Больцмана для твёрдых шаров можно получить из уравнения Больцмана–Энскога в пределе Больцмана–Грэда $n \to \infty$, $a \to 0$, $na^2 = const$. Сходимость решений уравнения Больцмана–Энскога к решениям уравнения Больцмана доказана в [100, 101, 115]. Таким образом, уравнение (4.1) можно считать более точной версией уравнения Больцмана, которая лучше описывает «плотный газ» и, к тому же, математически проще для анализа.

Важная задача в теории уравнения Больцмана — это его вывод из уравнений микроскопической динамики (гамильтоновой системы частиц), см. классические работы [18,134,217,291], а также недавние [123,146,169,172,268,270], в том числе работы автора диссертации [13, 14, в списке публикаций автора]. На данный момент строгий вывод уравнения Больцмана для твёрдых шаров и других коротодействующих потенциалов осуществлён только для малых времён. В отличие от уравнения Больцмана, для уравнения Больцмана–Энскога неизвестно, можно ли его строго вывести из динамики частиц.

Интересно заметить, что в случае твёрдых шаров микроскопический вывод

Боголюбова [18] приводит не к уравнению Больцмана, а именно к уравнению Больцмана–Энскога (4.1).

Также выводу кинетического уравнения Больцмана–Энскога (и более общего уравнения Энскога) из микроскопической динамики посвящены работы [39, 40, 172]. В работах [39, 40] приводится вывод уравнения Энскога на «физическом» уровне строгости, при этом в выводе явно используются гидродинамические переменные. В работе [172] строго из микродинамики выводится кинетическое уравнение для большого канонического ансамбля твёрдых шаров, отличающееся от уравнения Энскога и уточняющее его.

Вывод уравнения Больцмана, его вариаций и обобщений из динамики частиц, подчиняющихся (изначально необратимой) марковской стохастической динамике изучался в [11, 114, 206, 207].

## 4.2 Микроскопические решения

Итак, для уравнения Больцмана–Энскога (4.1) неизвестно, можно ли его строго вывести из динамики частиц. Однако уравнение Больцмана–Энскога обладает интересным свойством, которое связывает его с микроскопической динамикой другим образом.

Рассмотрим систему $N$ шаров диаметра $a$ на торе $\mathbb{T}^3$. Считаем, что выполнено неравенство $Na^3 < V$. Пусть $q_1^0, w_1^0, \ldots, q_N^0, w_N^0$ — начальные координаты и скорости $N$ шаров, причём выполнено условие $|q_i^0 - q_j^0| \geqslant a$ при $i \neq j$, т.к. шары твёрдые и не могут проникать друг в друга.

Динамика определяется свободным движением шаров между столкновениями и законом парного упругого соударения (4.3). Динамика определена корректно для начальных условий, которые не приводят к тройным и более столкновениям и к бесконечному числу парных столкновений на конечном промежутке времени. Также обычно исключаются начальные условия, ведущие к «скользящим» столкновениям (т.е. таким, при которых $v_{21} = 0$). Когда мы будем требовать от начальной конфигурации в фазовом пространстве $\{q_i^0, w_i^0\}_{i=1}^N$, чтобы она

приводила к корректно определённой динамике, мы также будем подразумевать и исключение «скользящих» столкновений. Можно показать, что мера исключённых начальных конфигураций равна нулю [64, 94, 131, 134]. Обозначим через $q_1(t), w_1(t), \ldots, q_N(t), w_N(t)$ координаты и скорости $N$ шаров в момент $t$.

В моменты столкновений скорости претерпевают разрывы. Будем считать, что скорости непрерывны справа ($w_i(t) = w_i(t+0)$) при $t > 0$ и непрерывны слева ($w_i(t) = w_i(t-0)$) при $t < 0$. Предположим, что в начальный момент столкновений нет, т.е. $|q_i^0 - q_j^0| > a$ при $i \neq j$

Микроскопическая динамика обладает свойством обратимости по времени: если набор функций $(q_1(t), w_1(t), \ldots, q_N(t), w_N(t))$ — возможная траектория движения $N$ шаров в фазовом пространстве, то $(q_1(-t), -w_1(-t), \ldots, q_N(-t), -w_N(-t))$ (т.е. осуществили обращение времени и скоростей) — тоже возможная траектория движения $N$ шаров (с точностью до определения скоростей в точках их разрыва).

Рассмотрим пространство $C'(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)$ линейных непрерывных функционалов над пространством $C(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)$ и обобщённые функции из этого пространства вида

$$f(r_1, v_1, t) = n^{-1} \sum_{i=1}^{N} \delta(r_1 - q_i(t), v_1 - w_i(t)). \tag{4.4}$$

Здесь $\delta(r, v) \equiv \delta(r)\delta(v)$ — шестимерная дельта-функция (функционал, ставящий в соответствие непрерывной функции $\varphi(r, v)$ значение $\varphi(0, 0)$), $\delta(r)$ и $\delta(v)$ — трёхмерные дельта-функции. На «физическом» уровне строгости Боголюбов показал, что функции (4.4) являются решениями уравнения Больцмана–Энскога. Боголюбов назвал эти решения микроскопическими, поскольку они соответствуют динамике системы $N$ частиц (шаров), т.е. микродинамике. Более распространённое название таких решений — «решения в виде эмпирических мер» [206, 207, 269, 271]. Тот факт, что кинетическое уравнение как бы содержит в себе $N$-частичную динамику, тогда как кинетическое уравнение применимо, как ожидалось, только в пределе бесконечного числа частиц и описывает динамику газа частиц на макроскопическом уровне, представляется удивительным.

Существование таких решений становится ещё более удивительным, если

мы вспомним, что уравнение Больцмана–Энскога описывает необратимую динамику газа. А именно, рассмотрим функционал

$$H(f) = \int\limits_{\mathbb{R}^6} f \ln f \, dxdv + \frac{na^2}{2} \int\limits_{\mathbb{R}^3} dx \int\limits_{B(x,a)} \rho(x,t)\rho(y,t)\, dy, \tag{4.5}$$

где $B(x,a)$ — шар с центром в $x$ радиуса $a$, а $\rho(x,t) = \int\limits_{\mathbb{R}^3} f(x,v,t)\, dv$ — пространственная плотность. Этот функционал не возрастает, если $f$ — решение уравнения Больцмана–Энскога [101]. Этот функционал представляет собой обобщение $H$-функции для уравнения Больцмана на уравнение Больцмана–Энскога. В пределе Больцмана–Грэда второе слагаемое в (4.5) исчезает и мы получаем известную $H$-функцию для уравнения Больцмана: энтропию, взятую с обратным знаком.

Несмотря на это, микроскопические решения обратимы по времени: вследствие обратимости динамики твёрдых шаров преобразование $t \to -t$ и $v \to -v$ отображает обобщённую функцию вида (4.4) в другую обобщённую функцию этого вида (т.е. связанную с микроскопической динамикой), которая также является решением (4.1). Конечно, функционал (4.5) не определён на решениях вида (4.4), т.е. формально противоречия не возникает. Однако этот факт означат, что обратимость или необратимость динамики, описываемой уравнением Больцмана–Энскога, зависит от рассматриваемого класса решений: динамика необратима, если рассматриваются регулярные решения, и необратима, если рассматриваются сингулярные решения вида (4.4).

Однако аргументация Боголюбова существования микроскопических решений была на «физическом» уровне строгости. Строгое определение того, в каком смысле (4.4) является решением (4.1), наталкивается на трудности. Формальная подстановка даёт в правой части произведения дельта-функций. Если в момент $t$ происходит столкновение некоторых шаров $i$ и $j$, т.е. $q_i(t) = q_j(t) + a\omega$ для некоторого $\omega \in S^2$, то аргументы соответствующих дельта-функций совпадают и возникают квадраты дельта-функций

$$\delta(r_1 - q_i(t))\delta(r_1 - a\omega - q_j(t)) = \delta^2(r_1 - q_i(t)),$$

которые, как известно, математически некорректны. В левой части мы тоже получим произведения сингулярных обобщённых функций: по правилу дифференцирования сложной функции в левую часть будут входить слагаемые вида $\frac{\partial f}{\partial w_i}\frac{dw_i}{dt}$. Поскольку скорости $w_i(t)$ меняются скачкообразно, то эти слагаемые будут представлять собой произведения дельта-функций и их производных.

Более естественно понимать функции (4.4) как решения уравнения Больцмана–Энскога (4.1) в интегральном, или «мягком» (“mild”) смысле [150, 207]:

$$f(r_1, v_1, t) = f^0(r_1 - v_1 t, v_1) + \int\limits_0^t Q(f, f)(r_1 - v_1(t-s), v_1, s)\, ds, \qquad (4.6)$$

где $f^0(r_1, v_1) \in L^1(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)$ — начальная функция. В формальной эквивалентности уравнений (4.1) и (4.6) можно убедиться, продифференцировав (4.6) по времени.

При подстановке в (4.6) обобщённой функции (4.4) левая часть определена корректно как обобщённая функция. Но в правой части остаются произведения обобщённых функций. Поэтому строгий смысл микроскопическим решениям удаётся придать, только если рассматривать предел подстановки в (4.6) сумм дельта-образных семейств функций.

Несколько способов придания строгого смысла таким образом предложен в работах автора [8–10, 12, в списке публикаций автора]. В этой главе до раздела 4.5 мы следуем работе [8, в списке публикаций автора]. В разделе 4.5 будет кратко рассказано о другом способе придания строгого смысла микроскопическим решениям — не через регуляризацию дельта-функций, а через представление решений уравнения Больцмана–Энскога в виде ряда по историям столкновений твёрдых шаров, которые графически представляются в виде деревьев. Эти результаты получены автором совместно с М. Пульвиренти (M. Pulvirenti) и С. Симонеллой (S. Simonella) в статье [271].

Строгая теорема о существовании микроскопических решений уравнения Больцмана–Энскога (через регуляризацию дельта-функций) будет доказана позже (теорема 4.2), но для начала, по нашему мнению, имеет смысл сформули-

ровать и доказать теорему эвристически. Эвристическое доказательство позволит лучше понять основную идею, почему решения в виде сумм дельта-функций (4.4) являются решениями уравнения Больцмана–Энскога и благодаря чему интегрируются возникающие при подстановке (4.4) в (4.1) квадраты дельта-функций. В теореме 4.2 основное внимание уделяется техническим деталям работы с дельта-образными семействами гладких функций, доказательству независимости предела от выбора семейства дельта-образных функций, что несколько затмевает идею доказательства.

## 4.3 Эвристическое доказательство существования микроскопических решений

Основное интуитивное соображение, стоящее за доказательством: если $f(r_1, v_1, t)$ имеет вид (4.4), то носители сингулярных обобщённых функций $r_1 \mapsto f(r_1, v_1, t)$ и $r_1 \mapsto f(r_1 \pm a\omega, v_2, t)$ (при фиксированных $v_1$, $v_2$, $\omega$, $t$) пересекаются только в дискретные моменты времени (в моменты столкновений). Следовательно, при всех остальных $t$ произведения этих функций равны нулю. Таким образом, интеграл столкновений имеет вид $A_k \sum_k \delta(t - t_k)$, где $t_k$ — моменты столкновений, $A_k$ — некоторые выражения. В результате интегрирования по $t$ получаем математически корректное выражение.

Мы следуем идее доказательства из книги [19], что проявляется в леммах 4.1–4.4 далее. Основное отличие заключается в том, что мы понимаем (4.4) как решения (4.1) в интегральном смысле (лемма 4.5). Это позволяет упростить доказательство.

Прежде всего, запишем интеграл столкновений в виде

$$Q(f,f) = na^2 \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21}, \omega)[f(r_1, v_1', t) f(r_1 + (a+0)\omega, v_2', t) - \\ - f(r_1, v_1, t) f(r_1 - (a+0)\omega, v_2, t)] d\omega dv_2. \quad (4.7)$$

Если функция $f$ непрерывная, то различия между данным выражением и выражением, приведённым сразу после формулы (4.1), нет. Однако различие появляется, если функция разрывна. Физический смысл выражения $f(r_1, v_1, t)f(r_1 - a\omega, v_1, t)$ — это плотность пар шаров в фазовых точках $(r_1, v_1)$ и $(r_1 - a\omega, v_1)$ в момент времени $t$. Поскольку шары твёрдые и не могут сближаться на расстояние, меньшее их диаметра $a$, плотность шаров в фазовых точках $(r_1, v_1)$ и $(r_1 - (a - 0)\omega, v_1)$ равна нулю. Следовательно, в случае разрывной функции необходимо рассматривать плотность в фазовых точках $(r_1, v_1)$ и $(r_1 - (a + 0)\omega, v_1)$.

Вследствие этого в процессе выкладок возникает односторонняя дельта-функция $\delta(x - 0)$. Она может быть определена не только на непрерывных (как обычная дельта-функция), но и на кусочно-непрерывных функциях. Её действие на основную кусочно-непрерывную функцию $g(x)$ определяется как $(\delta(x - 0), g(x)) = g(x - 0)$.

Иногда во избежание громоздкости мы будем в выражении интеграла столкновений вместо $a + 0$ писать $a$.

**Теорема 4.1** (Эвристическое утверждение о существовании микроскопических решений)**.** *Обобщённая функция вида (4.4) формально удовлетворяет уравнению (4.6) с интегралом столкновений (4.7) и*

$$f^0(r_1, v_1) = n^{-1} \sum_{i=1}^{N} \delta(r_1 - q_i^0, v_1 - w_i^0) \tag{4.8}$$

*(в предположении, что начальная конфигурация $\{q_i^0, w_i^0\}_{i=1}^N$ приводит к корректно определённой динамике твёрдых шаров) при всех $t \in \mathbb{R}$.*

Проведём сначала доказательство для случая $N = 2$. Для простоты положим $n = 1$ (этот множитель сокращается при подстановке функции вида (4.4) в уравнение). Разобьём доказательство на леммы.

**Лемма 4.1.**

$$a^2 \int\limits_{S^2} \delta[r - (a + 0)\omega] F(\omega) d\omega = \delta(|r| - a - 0) F\left(\frac{r}{|r|}\right),$$

*где $r \in \mathbb{R}^3$, $F(\omega)$ — непрерывная функция на $S^2$.*

*Доказательство.*

$$\delta(|r|-a-0)F\left(\frac{r}{|r|}\right)=\int\limits_{\mathbb{R}^3}\delta(r-R)\delta(|R|-a-0)F\left(\frac{R}{|R|}\right)dR=$$
$$=\int\limits_{\mathbb{R}^3}\delta(r-|R|\omega)\delta(|R|-a-0)F(\omega)R^2\,d|R|\,d\omega=$$
$$=a^2\int\limits_{S^2}\delta[r-(a+0)\omega]F(\omega)d\omega.$$

□

**Лемма 4.2.**

$$\delta(v_1'-w_1)\delta(v_2'-w_2)=\delta(v_1-w_1')\delta(v_2-w_2'),$$

*где* $w_{1,2}'=w_{1,2}\pm(w_{21},\omega)\omega$.

*Доказательство.* Произвольный вектор $V\in\mathbb{R}^3$ можно представить в виде суммы составляющих, параллельной и перпендикулярной фиксированному единичному вектору $\omega\in S^2$, а именно, $V=(V,\omega)\omega+V^\perp$. Тогда $\delta(V)=\delta[(V,\omega)]\delta(V^\perp)$, где первая дельта-функция в произведении — одномерная, вторая — двухмерная. Имеем

$$\delta(v_1'-w_1)\delta(v_2'-w_2)=$$
$$=\delta[v_1+(v_2-v_1,\omega)\omega-w_1]\,\delta[v_2-(v_2-v_1,\omega)\omega-w_2]=$$
$$=\delta[(v_2-w_1,\omega)]\,\delta(v_1^\perp-w_1^\perp)\,\delta[(v_1-w_2,\omega)]\,\delta(v_2^\perp-w_2^\perp)=$$
$$=\delta[(v_1-w_1,\omega)-(w_{21},\omega)]\,\delta(v_1^\perp-w_1^\perp)\,\delta[(v_2-w_2,\omega)+(w_{21},\omega)]\,\delta(v_2^\perp-w_2^\perp)=$$
$$=\delta[v_1-w_1-(w_{21},\omega)\omega]\,\delta[v_1-w_2+(w_{21},\omega)\omega]=\delta(v_1-w_1')\,\delta(v_2-w_2').$$

Здесь в первом и последнем равенствах мы воспользовались выражениями (4.3).

□

**Лемма 4.3.**

$$a^2\int\limits_{\Omega_{v_1}}(v_{21},\omega)\delta(r_1-q_1,v_1-w_1)\delta(r_1-a\omega-q_2,v_2-w_2)d\omega dv_2=$$
$$=\theta\left[\left(w_{21},\frac{q_{12}}{a}\right)\right](w_{21},\frac{q_{12}}{a})\delta(r_1-q_1,v_1-w_1)\delta(|q_{12}|-a).$$

*Здесь $\theta$ — функция Хевисайда («ступенька»). $w_{21} = w_2 - w_1$, $q_{12} = q_1 - q_2$. Во избежание громоздкости у функций $w_{1,2}(t)$ и $q_{1,2}(t)$ опущен аргумент $t$.*

*Доказательство.*

$$a^2 \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21}, \omega)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1)\delta(r_1 - a\omega - q_2, v_2 - w_2)d\omega dv_2 =$$

$$= a^2 \int\limits_{S^2\times\mathbb{R}^3} \theta[(v_{21}, \omega)](v_{21}, \omega)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1)\delta(r_1 - a\omega - q_2, v_2 - w_2)d\omega dv_2 =$$

$$= a^2 \int\limits_{S^2} \theta[(w_{21}, \omega)](w_{21}, \omega)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1)\delta(r_1 - a\omega - q_2)d\omega =$$

$$= \theta\left[\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\right]\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1)\delta(|q_{12}| - a).$$

Здесь в последнем равенстве мы воспользовались леммой 4.1. □

**Лемма 4.4.**

$$a^2 \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21}, \omega)\delta(r_1 - q_1, v_1' - w_1)\delta(r_1 + a\omega - q_2, v_2' - w_2)d\omega dv_2 =$$

$$= \theta\left[\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\right]\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1')\delta(|q_{12}| - a).$$

*Здесь $w_{1,2}' = w_{1,2} \pm (w_{21}, \omega)\omega$.*

*Доказательство.*

$$a^2 \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21}, \omega)\delta(r_1 - q_1, v_1' - w_1)\delta(r_1 + a\omega - q_2, v_2' - w_2)d\omega dv_2 =$$

$$= a^2 \int\limits_{S^2\times\mathbb{R}^3} \theta[(v_{21}, \omega)](v_{21}, \omega)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1')\delta(r_1 + a\omega - q_2, v_2 - w_2')d\omega dv_2 =$$

$$= a^2 \int\limits_{S^2} \theta[(w_{21}', \omega)](w_{21}', \omega)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1')\delta(r_1 + a\omega - q_2)d\omega =$$

$$= a^2 \int\limits_{S^2} \theta[(w_{21}, \omega)](w_{21}, \omega)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1')\delta(r_1 - a\omega - q_2)d\omega =$$

$$= \theta\left[\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\right]\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1)\delta(|q_{12}| - a).$$

Здесь в первом равенстве мы воспользовались леммой 4.2, в третьем — выполнили замену $\omega \to -\omega$ и воспользовались тем, что $w'_{21} \equiv w'_2 - w'_1 = -w_{21}$, в последнем равенстве мы воспользовались леммой 4.1. □

**Лемма 4.5.**

$$\int_0^t \theta\left[\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\right]\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\delta(|q_{12}| - a - 0)\times$$

$$\times\left[\delta(r_1 - v_1(t-s) - q_1, v_1 - w'_1) - \delta(r_1 - v_1(t-s) - q_1, v_1 - w_1)\right]ds =$$

$$= \delta(r_1 - q_1(t), v_1 - w_1(t)) - \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t, v_1 - w_1^0)$$

(*под интегралом в левой части* $q_{1,2} = q_{1,2}(s)$ *и* $w_{1,2} = w_{1,2}(s)$).

*Доказательство.* Рассмотрим сначала случай $t > 0$. Пусть сначала момент времени $t$ таков, что при данном начальном состоянии $(q_1^0, w_1^0, q_2^0, w_2^0)$ на отрезке $[0, t]$ не происходит столкновений. Тогда лемма, очевидно, справедлива. В самом деле, на этом промежутке левая часть равенства тождественно равна нулю, т.к. $\delta(|q_{12}| - a - 0) \equiv 0$ (отсутствие столкновений означает $|q_1 - q_2| > a$ на всём промежутке). С другой стороны, при этом $\delta(r_1 - q_1(t), v_1 - w_1(t)) = \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t, v_1 - w_1^0)$, т.е. правая часть равенства также тождественно равна нулю.

Пусть теперь на отрезке $[0, t]$ происходит одно столкновение в некоторый момент $t_1 \in [0, t]$. В этом случае $|q_{12}(t_1)| = a$, равенство $|q_{12}(s)| = a + 0$ достигается в два момента времени: $t_1 - 0$ (непосредственно перед столкновением) и $t_1 + 0$ (сразу после столкновения). Тогда

$$\delta(|q_{12}(s)| - a - 0) =$$
$$= \left|\frac{d|q_{12}(s)|}{ds}\right|^{-1}_{s=t_1-0}\delta(s - t_1 + 0) + \left|\frac{d|q_{12}(s)|}{ds}\right|^{-1}_{s=t_1+0}\delta(s - t_1 - 0) =$$
$$= \left(w_{21}(t_1 - 0), \frac{q_{12}(t_1)}{a}\right)^{-1}\delta(s - t_1 + 0) - \left(w_{21}(t_1 + 0), \frac{q_{12}(t_1)}{a}\right)^{-1}\delta(s - t_1 - 0). \tag{4.9}$$

Здесь мы воспользовались известной формулой $\delta(f(x)) = \sum_i |f'(x_i)|^{-1}\delta(x - x_i)$, где $x_i$ — корни $f(x)$, и тем, что перед столкновением

$(w_{21}(t_1 - 0), q_{12}(t_1)/a) > 0$, после столкновения $(w_{21}(t_1 + 0), q_{12}(t_1)/a) < 0$. Также $q_{12}(t_1 + 0) = q_{12}(t_1 - 0) = q_{12}(t_1)$, поскольку функция $q_{12}(s)$ непрерывна.

Ввиду наличия множителя $\theta[(w_{21}(s), q_{12}(s)/a)]$ вклад в искомый интеграл даёт только первое слагаемое в выражении (4.9). Тогда искомый интеграл равен

$$\begin{aligned}
&\delta(r_1 - v_1(t - t_1) - q_1(t_1), v_1 - w_1'(t_1 - 0)) - \\
&- \delta(r_1 - v_1(t - t_1) - q_1(t_1), v_1 - w_1(t_1 - 0)) = \\
=&\,\delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t_1 - w_1(t_1 + 0)(t - t_1), v_1 - w_1(t_1 + 0)) - \\
&- \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t_1 - w_1^0(t - t_1), v_1 - w_1^0) = \\
=&\,\delta(r_1 - q_1(t), v_1 - w_1(t)) - \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t, v_1 - w_1^0),
\end{aligned}$$

что и требовалось доказать. Здесь мы использовали то, что $w_1(t_1 - 0) = w_1^0$, $w_1(t_1 + 0) = w_1(t)$ (поскольку по предположению $t_1$ — единственный момент столкновения на отрезке времени $[0, t]$), $w_1'(t_1 - 0) = w_1(t_1 + 0)$ по определению (формулы (4.3) как раз и определяют скорости после столкновения через скорости до столкновения),

$$\begin{aligned}
q_1(t_1) &= q_1^0 + w_1^0 t_1, \\
q_1(t) &= q_1(t_1) + w_1(t_1 + 0)(t - t_1).
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Для доказательства леммы на случай нескольких столкновений двух частиц на промежутке времени $[0, t)$ достаточно разбить этот промежуток на отрезки времени, на каждом из которых происходит только одно столкновение, и применить приведённые рассуждения к каждому отрезку. Конечное состояние на каждом отрезке является начальным для следующего отрезка.

Рассмотрим теперь случай $t < 0$. Пусть на отрезке $[t, 0]$ происходит одно столкновение в момент $t_1 \in [t, 0]$. Поменяем местами пределы интегрирования (т.е. будем интегрировать от $t < 0$ до 0), поставив перед интегралом знак «минус». Преобразования (4.9) сохраняют свою силу. Искомый интеграл (с учётом

знака перед ним) будет равен

$$\begin{aligned}
&\delta(r_1 - v_1(t-t_1) - q_1(t_1), v_1 - w_1(t_1-0)) - \\
&- \delta(r_1 - v_1(t-t_1) - q_1(t_1), v_1 - w_1'(t_1-0)) = \\
=&\,\delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t_1 - w_1(t_1-0)(t-t_1), v_1 - w_1(t_1-0)) - \\
&- \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t_1 - w_1^0(t-t_1), v_1 - w_1^0) = \\
=&\,\delta(r_1 - q_1(t), v_1 - w_1(t)) - \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t, v_1 - w_1^0),
\end{aligned}$$

т.е. снова получаем требуемое утверждение. Здесь мы использовали, что в рассматриваемом случае $w_1(t_1-0) = w_1(t)$, $w_1(t_1+0) = w_1^0$. □

*Продолжение доказательства теоремы 4.1.* Подставляя обобщённую функцию $f$ в выражение для интеграла столкновений $Q(f,f)(r_1,v_1,t)$ вида (4.7), получаем слагаемые следующего вида ($i,j = 1,2$):

$$\begin{aligned}
&a^2 \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21},\omega)\delta(r_1 - q_i, v_1 - w_i)\delta(r_1 - (a+0)\omega - q_j, v_2 - w_j)\,d\omega dv_2, \\
&a^2 \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21},\omega)\delta(r_1 - q_i, v_1' - w_i)\delta(r_1 - (a+0)\omega - q_j, v_2' - w_j)\,d\omega dv_2.
\end{aligned}$$

Слагаемые с $i = j$ равны нулю, поскольку $\delta(r_1 - q_i)\delta(r_1 - q_i - (a+0)\omega) = 0$. Применяя для $i \neq j$ леммы 4.3 и 4.4, получаем

$$\begin{aligned}
Q(f,f) = \theta\left[\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\right]\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\delta(|q_{12}| - a - 0)\times \\
\times [\delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1') - \delta(r_1 - q_1, v_1 - w_1)] + \\
+ \theta\left[\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\right]\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\delta(|q_{12}| - a - 0)\times \\
\times [\delta(r_1 - q_2, v_1 - w_2') - \delta(r_1 - q_2, v_1 - w_2)].
\end{aligned}$$

Пользуясь леммой 4.5, получаем

$$\int_0^t Q(f,f)(r_1 - v_1(t-s), v_1, s)ds =$$
$$= \sum_{i=1}^{2} \delta(r_1 - q_i(t), v_1 - w_i(t)) - \sum_{i=1}^{2} \delta(r_1 - q_i^0 - w_i^0 t, v_1 - w_i^0) =$$
$$= \sum_{i=1}^{2} \delta(r_1 - q_i(t), v_1 - w_i(t)) - \sum_{i=1}^{2} \delta(r_1 - q_i^0 - v_1 t, v_1 - w_i^0) =$$
$$= f(r_1, v_1, t) - f^0(r_1 - v_1 t, v_1),$$

что и требовалось доказать.

Для доказательства теоремы для произвольного числа шаров $N$ достаточно разбить промежуток времени $[0,t]$ на отрезки, на каждом из которых происходит только одно столкновение какой-нибудь пары шаров, и применить приведённые рассуждения к сталкивающейся паре на каждом отрезке. Конечное состояние на каждом отрезке является начальным для следующего отрезка. Если в некоторый момент времени происходит одновременно несколько парных столкновений, то приведённые рассуждения также можно применить, поскольку сталкивающиеся пары можно рассматривать по отдельности. □

**Замечание 4.1.** Аналогичным образом можно доказать, что функция вида (4.4) удовлетворяет также уравнению (4.6), в котором область интегрирования в интеграле столкновения заменена на

$$\Omega_{v_1}^- = \{(\omega, v_2) : \omega \in S^2, v_2 \in \mathbb{R}^3, (v_{21}, \omega) \leqslant 0\} \subset S^2 \times \mathbb{R}^3. \qquad (4.11)$$

Т.е. интегрирование теперь проводится не по области $(v_{21}, \omega) \geqslant 0$, а по области $(v_{21}, \omega) \leqslant 0$, иными словами — не по состояниям пар шаров непосредственно перед столкновением, а по состояниям шаров сразу после столкновения. Это «обратное» уравнение Больцмана–Энскога, которому в случае классических или мягких решений соответствует не производство, а убывание энтропии.

В самом деле, леммы 4.3 и 4.4 сохраняют свою справедливость, если область интегрирования в левых частях заменить на $\Omega_{v_1}^-$, а член $\theta[(w_{21}, \frac{q_{12}}{a})]$ в правых частях — на $\theta[-(w_{21}, \frac{q_{12}}{a})]$. В выражении (4.9) играет роль только второе слагаемое

ввиду наличия множителя $\theta[-(w_{21}(s), q_{12}(s)/a)]$ в искомом интеграле

$$\int_0^t \theta\left[-\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\right]\left(w_{21}, \frac{q_{12}}{a}\right)\delta(|q_{12}|-a-0)\times$$

$$\times\left[\delta(r_1 - v_1(t-s) - q_1, v_1 - w_1') - \delta(r_1 - v_1(t-s) - q_1, v_1 - w_1)\right] ds.$$

Тогда при $t > 0$ интеграл равен

$$\begin{aligned}
&\delta(r_1 - v_1(t-t_1) - q_1(t_1), v_1 - w_1(t_1+0)) - \\
&- \delta(r_1 - v_1(t-t_1) - q_1(t_1), v_1 - w_1'(t_1+0)) = \\
=&\,\delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t_1 - w_1(t_1+0)(t-t_1), v_1 - w_1(t_1+0)) - \\
&- \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t_1 - w_1^0(t-t_1), v_1 - w_1^0) = \\
=&\,\delta(r_1 - q_1(t), v_1 - w_1(t)) - \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t, v_1 - w_1^0),
\end{aligned}$$

т.е. получаем тот же результат. Аналогично проводится анализ при $t < 0$. Здесь мы воспользовались тем, что $w_1'(t_1 + 0) = w_1(t_1 - 0)$, т.к. соотношения (4.3) обратимы: если в них интерпретировать $v_{1,2}$ как скорости после столкновения, а $v_{1,2}'$ — до столкновения, то они также верны.

## 4.4 Микроскопические решения как предел сумм дельта-образных семейств гладких функций

Мы показали, что формальная подстановка функций вида (4.4) в уравнение (4.6) превращает его в тождество. Однако осмыслить выражение (4.6) для произвольной обобщённой функции, а значит, и дать определение решения (4.6) в классе обобщённых функций, представляется весьма затруднительным. Поэтому, для того чтобы придать строгий смысл, в котором функции вида (4.4) являются решениями уравнения Больцмана–Энскога, рассмотрим предел подстановки в интеграл столкновений сумм дельта-образных семейств гладких функций.

**Теорема 4.2.** *Рассмотрим семейство функций*

$$f_\varepsilon(r_1, v_1, t) = n^{-1}\sum_{i=1}^{N}\delta_\varepsilon(r_1 - q_i(t), v_1 - w_i(t)),$$

*где $\delta_\varepsilon \in L_0^\infty(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)$, $\varepsilon > 0$, — дельта-образное семейство ограниченных функций с компактным носителем, $\delta_\varepsilon \to \delta$ при $\varepsilon \to 0$ в пространстве обобщённых функций $C'(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)$ (т.е. в пространстве линейных непрерывных функционалов над пространством непрерывных функций $C(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)$). Также потребуем, чтобы диаметр носителя $\delta_\varepsilon$ стремился к нулю при $\varepsilon \to 0$. Тогда в $C'(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)$ для всех $t \in \mathbb{R}$ имеет место предел*

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_0^t Q_\varrho(f_\varepsilon, f_\varepsilon)[r_1 - v_1(t-s), v_1, s]\,ds = f(r_1, v_1, t) - f^0(r_1 - v_1 t, v_1), \quad (4.12)$$

*где*

$$Q_\varrho(f_\varepsilon, f_\varepsilon) = na^2 \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21}, \omega)[f_\varepsilon(r_1, v_1', t) f_\varepsilon(r_1 + (a+\varrho)\omega, v_2', t) - \\ - f_\varepsilon(r_1, v_1, t) f_\varepsilon(r_1 - (a+\varrho)\omega, v_2, t)]d\omega dv_2, \quad (4.13)$$

$$f(r_1, v_1, t) = n^{-1} \sum_{i=1}^N \delta(r_1 - q_i(t), v_1 - w_i(t)),$$
$$f^0(r_1, v_1) = n^{-1} \sum_{i=1}^N \delta(r_1 - q_i^0, v_1 - w_i^0),$$

*в предположении, что начальная конфигурация $\{q_i^0 = q_i(0), w_i^0 = w_i(0)\}_{i=1}^N$ приводит к корректно определённой динамике твёрдых шаров.*

Основной в доказательстве является следующая

**Лемма 4.6.** *Пусть $N = 2$ (случай двух шаров). Тогда в условиях теоремы*

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}[I_1^{\varrho,\varepsilon}(r_1, v_1) - I_2^{\varrho,\varepsilon}(r_1, v_1)] = \delta(r_1 - q_1(t), v_1 - w_1(t)) - \delta(r_1 - q_1^0 - w_1^0 t, v_1 - w_1^0) \quad (4.14)$$

*в $C'(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)$, где*

$$I_1^{\varrho,\varepsilon}(r_1, v_1) = a^2 \int\limits_0^t ds \int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21}, \omega)\,\delta_\varepsilon(r_1 - v_1(t-s) - q_1(s), v_1' - w_1(s)) \times \\ \times \delta_\varepsilon(r_1 - v_1(t-s) + (a+\varrho)\omega - q_2(s), v_2' - w_2(s)),$$

$$I_2^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)=a^2\int\limits_0^t ds\int\limits_{\Omega_{v_1}}(v_{21},\omega)\delta_\varepsilon(r_1-v_1(t-s)-q_1(s),v_1-w_1(s))\times$$
$$\times\delta_\varepsilon(r_1-v_1(t-s)-(a+\varrho)\omega-q_2(s),v_2-w_2(s)).$$

*Доказательство.* Рассмотрим сначала случай $t>0$. Пусть сначала момент времени $t$ таков, что при фиксированном начальном состоянии $(q_1^0,w_1^0,q_2^0,w_2^0)$ на отрезке $[0,t]$ не происходит столкновений. Тогда лемма, очевидно, справедлива. В самом деле, в силу того, что $|q_1-q_2|>a$, на всём промежутке времени $t$ при достаточно малых $\varepsilon$ и $\varrho$ произведения дельта-функций в интеграле столкновений в выражениях для $I_{1,2}^{\varrho,\varepsilon}$ равны нулю. С другой стороны, при этом $\delta(r_1-q_1(t),v_1-w_1(t))=\delta(r_1-q_1^0-w_1^0t,v_1-w_1^0)$, т.е. выражение в правой части (4.14) также тождественно равно нулю.

Пусть теперь на отрезке $[0,t]$ происходит одно столкновение в некоторый момент $t_1\in[0,t]$. Пусть $\varphi(r_1,v_1)\in C(\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3)$ — основная функция. Тогда

$$\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} I_2^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1=$$
$$=a^2\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3}dr_1dv_1\,\varphi(r_1,v_1)\int\limits_0^t ds\int\limits_{\Omega_{v_1}}(v_{21},\omega)\delta_\varepsilon(r_1-v_1(t-s)-q_1(s),v_1-w_1(s))\times$$
$$\times\,\delta_\varepsilon(r_1-v_1(t-s)-(a+\varrho)\omega-q_2(s),v_2-w_2(s))d\omega dv_2.$$

Поменяем порядок интегрирования и выполним замену переменной $r_1\to q_1(s)+v_1(t-s)+r_1$, затем замены $v_1\to w_1(s)+v_1$, $v_2\to w_2(s)+v_2$. Тогда правая часть будет иметь вид

$$a^2\int\limits_0^t ds\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3}dr_1dv_1\int\limits_{S^2}d\omega\int\limits_{\mathbb{R}^3}dv_2\,\varphi[q_1(s)+r_1+(w_1(s)+v_1)(t-s),w_1(s)+v_1]\times$$
$$\times\,\theta[(w_{21}(s)+v_{21},\omega)](w_{21}(s)+v_{21},\omega)\delta_\varepsilon(r_1,v_1)\delta_\varepsilon(q_{12}(s)-(a+\varrho)\omega+r_1,v_2),$$

где $\theta(x)$ — функция Хевисайда (функция-«ступенька»), $w_{21}=w_2-w_1$.

Представим выражение в виде

$$a^2 \int\limits_0^t ds \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1 dv_2 \int\limits_{S^2} \delta_\varepsilon(q_{12}(s) - (a+\varrho)\omega + r_1, v_2)\psi(\omega, s, v_2) d\omega =$$

$$= \Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2 \int\limits_0^t ds \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1 dv_2 \int\limits_{S^2} d\omega \int\limits_0^\infty \delta_\varepsilon(q_{12}(s) - |r_2|\omega + r_1, v_2)\delta(|r_2| - a - \varrho)\times$$

$$\times \psi(\omega, s, v_2)|r_2|^2 d|r_2| =$$

$$= \Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2 \int\limits_0^t ds \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1 dv_2 \int\limits_{\mathbb{T}^3} \delta_\varepsilon(q_{12}(s) + r_{12}, v_2)\delta(|r_2| - a - \varrho)\times$$

$$\times \psi\Big(\frac{r_2}{a+\varrho}, s, v_2\Big) dr_2,$$

где $r_{12} = r_1 - r_2$,

$$\psi(\omega, s, v_2) = \int\limits_{\mathbb{R}^3} dv_1\, \varphi[q_1(s) + r_1 + (w_1(s) + v_1)(t-s), w_1(s) + v_1]\times$$

$$\times \theta[(w_{21}(s) + v_{21}, \omega)](w_{21}(s) + v_{21}, \omega)\delta_\varepsilon(r_1, v_1).$$

Выполним замену переменных $r_2 \to q_{12}(s) + r_1 - r_2$ и воспользуемся известным свойством дельта-функции

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x - x_i),$$

где $x_i$ — корни произвольной дифференцируемой функции $f(x)$. Получим

$$\Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2 \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1 dv_2 \int\limits_0^t ds \int\limits_{\mathbb{T}^3} \delta_\varepsilon(r_2, v_2)\delta(|q_{12}(s) + r_{12}| - a - \varrho)\times$$

$$\times \psi\Big(\frac{q_{12}(s) + r_{12}}{a+\varrho}, s, v_2\Big) dr_2 =$$

$$= \Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2 \sum_{i=1}^{2(1)} \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1 dv_2 \int\limits_{\mathbb{T}^3} \frac{\delta_\varepsilon(r_2, v_2)\psi(\frac{1}{a+\varrho}(q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}), t_i^{(r_{12},\varrho)}, v_2)}{\big|\frac{d}{dt}|q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}|\big|} dr_2, \tag{4.15}$$

где $t_i^{(r_{12},\varrho)}$, $i = 1, 2$, — моменты времени, при которых $|q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}| = a + \varrho$. По предположению в момент $t_1$ шары 1 и 2 сталкиваются, т.е. $|q_{12}(t_1)| = a$. Сле-

довательно, в некоторые моменты времени $t_1 \pm \Delta t_\varrho$ имеет место $|q_{12}(t_1)| = a + \varrho$. Очевидно, $\Delta t_\varrho \to 0$ при $\varrho \to 0$. Ввиду наличия множителей $\delta_\varepsilon(r_1, v_1)$ и $\delta_\varepsilon(r_2, v_2)$, при малых $\varepsilon$ рассматриваемое выражение не стремится к нулю, только когда $r_1$ и $r_2$ принадлежат малым окрестностям начала координат. Если эти окрестности достаточно малы, то моментов времени, при которых $|q_{12}(s) + r_{12}| = a + \varrho$, также два. Пусть $t_1^{(r_{12},\varrho)} < t_2^{(r_{12},\varrho)}$. Очевидно, $t_1^{(r_{12},\varrho)} \to t_1 - \Delta t_\varrho$ и $t_2^{(r_{12},\varrho)} \to t_1 + \Delta t_\varrho$ при $r_1 \to 0$ и $r_2 \to 0$. Верхний предел суммирования в (4.15) равен 2 при $t_1 < t$ и равен 1 при $t_1 = t$.

Подставляя выражение для $\psi$, получаем

$$\Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2 \sum_{i=1}^{2(1)} \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1 dv_1 \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_2 dv_2\, \theta\Big[\Big(w_{21}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + v_{21}, \frac{q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}}{a+\varrho}\Big)\Big] \times$$
$$\times\, \varphi(q_1(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_1 + (w_1(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + v_1)(t - t_i^{(r_{12},\varrho)}), w_1(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + v_1) \times$$
$$\times\, \frac{(w_{21}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + v_{21}, \frac{1}{a+\varrho}(q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}))}{\big|\frac{d}{dt}|q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}|\big|}\, \delta_\varepsilon(r_1, v_1)\, \delta_\varepsilon(r_2, v_2). \tag{4.16}$$

В силу того, что $t_1^{(r_{12},\varrho)}$ и $t_2^{(r_{12},\varrho)}$ соответствуют моментам до и после столкновения соответственно и в силу

$$(w_{21}(t_1 - 0), q_{12}(t_1 - 0)) > 0,$$
$$(w_{21}(t_1 + 0), q_{12}(t_1 + 0)) < 0$$

имеет место

$$\begin{aligned}(w_{21}(t_1^{(r_{12},\varrho)}) + v_{21}, q_{12}(t_1^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}) > 0,\\ (w_{21}(t_2^{(r_{12},\varrho)}) + v_{21}, q_{12}(t_2^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}) < 0\end{aligned} \tag{4.17}$$

при достаточно малых $v_1$, $v_2$, $r_1$ и $r_2$. Поэтому из-за наличия функции Хевисайда слагаемое с $i = 2$ обращается в нуль. Остаётся слагаемое с $i = 1$. Переходя к пределу $\varepsilon \to 0$ и пользуясь тем, что

$$\left|\frac{d}{dt}|q_{12}(t_1 - \Delta t_\varrho)|\right| = \left(w_{21}(t_1 - \Delta t_\varrho), \frac{q_{12}(t_1 - \Delta t_\varrho)}{a+\varrho}\right), \tag{4.18}$$

получаем

$$\Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2 \varphi[q_1(t_1 - \Delta t_\varrho) + w_1(t_1 - \Delta t_\varrho)(t - t_1 + \Delta t_\varrho), w_1(t_1 - \Delta t_\varrho)].$$

Переходя, наконец, к пределу $\varrho \to 0$ и пользуясь тем, что $q_1(t_1) = q_1^0 + w_1^0 t_1$, $w_1(t_1 - 0) = w_1^0$, получаем

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} I_2^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1 =$$

$$= \varphi[q_1(t_1) + w_1(t_1-0)(t-t_1), w_1(t_1-0)] = \varphi(q_1^0 + w_1^0 t, w_1^0).$$

Рассмотрим теперь выражение

$$\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} I_1^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1 =$$

$$= a^2\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1dv_1\varphi(r_1,v_1)\int\limits_0^t ds\int\limits_{\Omega_{v_1}}(v_{21},\omega)\delta_\varepsilon(r_1 - v_1(t-s) - q_1(s), v_1' - w_1(s))\times$$

$$\times\,\delta_\varepsilon(r_1 - v_1(t-s) + (a+\varrho)\omega - q_2(s), v_2' - w_2(s))d\omega dv_2.$$

Снова меняем порядок интегрирования и выполняем замену переменных $r_1 \to q_1(s) + v_1(t-s) + r_1$, затем замены $v_1 \to w_1'(s) + v_1$, $v_2 \to w_2'(s) + v_2$, $\omega \to -\omega$, где $w_{1,2}' = w_{1,2} \pm (w_{21},\omega)\omega$, получаем правую часть в виде

$$a^2\int\limits_0^t ds\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1dv_1\int\limits_{S^2} d\omega\int\limits_{\mathbb{R}^3} dv_2\,\varphi[q_1(s) + (w_1'(s)+v_1)(t-s) + r_1, v_1 + w_1'(s)]\times$$

$$\times\,\theta[(w_{21}(s) - v_{21},\omega)](w_{21}(s) - v_{21},\omega)\delta_\varepsilon(r_1, v_1')\delta_\varepsilon(q_{12}(s) - (a+\varrho)\omega + r_1, v_2').$$

Здесь мы учли, что $w_2' - w_1' = w_1 - w_2 = -w_{21}$. Аналогично преобразовывая это выражение, приходим к

$$\Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2\sum_{i=1}^{2(1)}\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_1dv_1\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} dr_2dv_2\,\theta\Big[\Big(w_{21}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) - v_{21}, \frac{q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}}{a+\varrho}\Big)\Big]\times$$

$$\times\,\varphi[q_1(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + (w_1'(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + v_1)(t - t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_1, w_1'(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + v_1]\times$$

$$\times\,\frac{\big(w_{21}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) - v_{21}, (q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12})/(a+\varrho)\big)}{\big|\frac{d}{dt}|q_{12}(t_i^{(r_{12},\varrho)}) + r_{12}|\big|}\,\delta_\varepsilon(r_1, v_1')\delta_\varepsilon(r_2, v_2'). \tag{4.19}$$

В силу неравенств (4.17) снова при достаточно малых $v_1$, $v_2$, $r_1$ и $r_2$ ненулевым остаётся только слагаемое с $i = 1$. Поэтому, после перехода к пределу $\varepsilon \to 0$ и интегрирования по $r_1$ и $r_2$ получаем

$$\Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2 \int\limits_{\mathbb{R}^6} dv_1 dv_2\, \delta(v_1')\delta(v_2')\, \frac{\big(w_{21}(t_1-\Delta t_\varrho)-v_{21},\,(q_{12}(t_1-\Delta t_\varrho))/(a+\varrho)\big)}{\big|\frac{d}{dt}|q_{12}(t_1-\Delta t_\varrho)|\big|} \times$$
$$\times\, \varphi[q_1(t_1-\Delta t_\varrho)+(w_1'(t_1-\Delta t_\varrho)+v_1)(t-t_1+\Delta t_\varrho),\, w_1'(t_1-\Delta t_\varrho)+v_1].$$

Представляя $v_1'$ и $v_2'$ как функции от $v_1$ и $v_2$, определяемые преобразованием (4.3) при фиксированном $\omega = \frac{1}{a+\varrho} q_{12}(t_1 - \Delta t_\varrho)$ (якобиан преобразования равен по модулю единице), получаем $\delta(v_1')\delta(v_2') = \delta(v_1)\delta(v_2)$. Интегрируя выражение по $v_1$ и $v_2$ получаем

$$\Big(\frac{a}{a+\varrho}\Big)^2 \varphi[q_1(t_1-\Delta t_\varrho)+w_1'(t_1-\Delta t_\varrho)(t-t_1+\Delta t_\varrho),\, w_1'(t_1-\Delta t_\varrho)].$$

Переходя, наконец, к пределу $\varrho \to 0$, пользуясь (4.10) и тем, что по определению

$$w_1'(t_1-0) = w_1(t_1+0) = w_1(t)$$

(последнее равенство верно вследствие того, что на рассматриваемом промежутке времени шары претерпевают только одно столкновение), получаем

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0} \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} I_1^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1 =$$
$$= \varphi[q_1(t_1)+w_1'(t-0)(t-t_1),\, w_1'(t-0)] = \varphi(q_1(t),w_1(t)).$$

Следовательно,

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0} \int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} [I_1^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1) - I_2^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)]\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1 =$$
$$= \varphi(q_1(t),w_1(t)) - \varphi(q_1^0+w_1^0t_1,w_1^0), \quad (4.20)$$

а это и означает утверждение леммы.

Рассмотрим теперь случай $t < 0$. Если на отрезке $[t, 0]$ не происходит столкновений, то аналогично случаю $t > 0$ легко показывается, что утверждение

леммы справедливо. Пусть на отрезке $[t,0]$ происходит одно столкновение в момент $t_1 \in [t,0]$. Поменяем местами пределы интегрирования по $s$ (т.е. будем интегрировать от $t < 0$ до 0), поставив перед интегралом знак «минус». Все проделанные преобразования сохраняют свою силу и в этом случае, но теперь $w_1(t_1+0) = w_1^0$ и $w_1(t_1-0) = w_1(t)$ (ранее было $w_1(t_1-0) = w_1^0$ и $w_1(t_1+0) = w_1(t)$ соответственно). Поэтому

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} I_1^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1 =$$

$$= -\varphi[q_1(t_1) + w_1'(t-0)(t-t_1), w_1'(t-0)] = -\varphi(q_1 + w_1^0 t, w_1^0),$$

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} I_2^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1 =$$

$$= -\varphi[q_1(t_1) + w_1(t_1-0)(t-t_1), w_1(t_1-0)] = -\varphi(q_1(t), w_1(t)).$$

т.е. снова получаем (4.20).

Если на отрезке времени $[0,t]$ или $[t,0]$ шары сталкиваются более одного раза, то лемма доказывается разбиением соответствующего промежутка на отрезки, на которых шары сталкиваются не более одного раза, и применением приведённых рассуждений к каждому из этих отрезков. Конечное состояние системы на каждом отрезке является начальным для следующего отрезка. Лемма 4.6 доказана. □

*Доказательство теоремы 4.2.* Подставляя функцию $f_\varepsilon$ в выражение для интеграла столкновений $Q_\varrho(f_\varepsilon, f_\varepsilon)(r_1,v_1,t)$, получаем слагаемые следующего вида ($i,j=1,2$):

$$a^2\int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21},\omega)\delta_\varepsilon(r_1-q_i,v_1-w_i)\delta_\varepsilon(r_1-a\omega-q_j,v_2-w_j)\,d\omega dv_2,$$

$$a^2\int\limits_{\Omega_{v_1}} (v_{21},\omega)\delta_\varepsilon(r_1-q_i,v_1'-w_i)\delta_\varepsilon(r_1-a\omega-q_j,v_2'-w_j)\,d\omega dv_2.$$

Слагаемые с $i = j$ равны нулю при таких достаточно малых $\varepsilon$, что $\delta_\varepsilon(r_1 - q_i)\delta_\varepsilon(r_1 - q_i - a\omega) \equiv 0$. Применяя для $i \neq j$ лемму 4.6, получаем

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_0^t Q_\varrho(f_\varepsilon, f_\varepsilon)(r_1 - v_1(t-s), v_1, s)ds =$$
$$= \sum_{i=1}^{2}\delta(r_1 - q_i(t), v_1 - w_i(t)) - \sum_{i=1}^{2}\delta(r_1 - q_i^0 - w_i^0 t, v_1 - w_i^0) =$$
$$= \sum_{i=1}^{2}\delta(r_1 - q_i(t), v_1 - w_i(t)) - \sum_{i=1}^{2}\delta(r_1 - q_i^0 - v_1 t, v_1 - w_i^0) =$$
$$= f(r_1, v_1, t) - f^0(r_1 - v_1 t, v_1),$$

что и требовалось доказать.

Для доказательства теоремы для произвольного числа шаров $N$ достаточно разбить промежуток времени $[0, t]$ на отрезки, на каждом из которых происходит только одно столкновение какой-нибудь пары шаров, и применить приведённые рассуждения к сталкивающейся паре на каждом отрезке. Конечное состояние каждого отрезка является начальным для следующего отрезка. Если в некоторый момент времени происходит одновременно несколько парных столкновений, то приведённые рассуждения также можно применить, поскольку сталкивающиеся пары можно рассматривать по отдельности. □

**Замечание 4.2.** Теорема также является справедливой для «обратного» уравнения Больцмана–Энского, в котором область интегрирования в интеграле столкновений имеет вид (4.11). В самом деле, отличие проявится в том, что вследствие неравенств (4.17) в выражениях (4.16) и (4.19) ненулевыми остаются только слагаемые с $i = 2$ (а не с $i = 1$, как раньше). Далее,

$$\left|\frac{d}{dt}|q_{12}(t_1 + \Delta t_\varrho)|\right| = -\left(w_{21}(t_1 - \Delta t_\varrho), \frac{q_{12}(t_1 + \Delta t_\varrho)}{a + \varrho}\right).$$

По сравнению с (4.18) в правой части появляется знак «минус» вследствие того,

что скалярное произведение теперь отрицательно. Получаем, что

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} I_1^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1 =$$

$$= -\varphi[q_1(t_1)+w_1'(t+0)(t-t_1),w_1'(t+0)] = -\varphi(q_1+w_1^0t,w_1^0),$$

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3} I_2^{\varrho,\varepsilon}(r_1,v_1)\varphi(r_1,v_1)\,dr_1dv_1 =$$

$$= -\varphi[q_1(t_1)+w_1(t_1+0)(t-t_1),w_1(t_1+0)] = -\varphi(q_1(t),w_1(t)),$$

т.е. снова получаем (4.20). Здесь мы воспользовались тем, что $w_1'(t_1+0) = w_1(t_1-0)$, т.к. соотношения (4.3) обратимы: если в них интерпретировать $v_{1,2}$ как скорости после столкновения, а $v_{1,2}'$ — до столкновения, то они также верны. Аналогично анализируется случай $t<0$.

**Замечание 4.3.** Добавка $+\varrho$ в аргументах функции $f_\varepsilon$ в интеграле столкновения (4.13) и устремление $\varrho$ к нулю уже после предельного перехода $\varepsilon\to 0$ являются важными для того, чтобы предел (4.12) не зависел от выбора регуляризации дельта-функции $\delta_\varepsilon$. В доказательстве это проявляется при получении выражения (4.15). Важным является то, что равенство $|q_{12}(s)+r_{12}| = a+\varrho$ достигается в два различных момента времени для любых $r_1$ и $r_2$ из достаточно малых окрестностей нуля (см. рассуждения сразу после формулы (4.15)). Если мы положим $\varrho=0$, то это утверждение уже не будет верным: какие бы малые окрестности мы ни брали, в зависимости от $r_{12}$ равенство $|q_{12}(s)+r_{12}|=a$ может не достигаться ни в какой момент времени, достигаться в один или в два момента времени. В этом случае результат интегрирования по $r_1$ и $r_2$ будет зависеть от выбранной регуляризации дельта-функции. Например, если носитель функции $\delta_\varepsilon(r_1,v_1)$ специально подобран так, что $\delta_\varepsilon(r_1,v_1)\delta_\varepsilon(r_2,v_2)\neq 0$ только при $|q_{12}(s)+r_{12}|>a$, то выражение (4.16) при $\varrho=0$ будет нулевым.

Данная регуляризация интеграла столкновений не является неожиданной, поскольку мы прибегли к ней и в эвристическом доказательстве, см. (4.7).

**Замечание 4.4.** Можно заметить, что выражение

$$\lim_{\varrho\to+0}\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_0^t Q_\varrho(f_\varepsilon,f_\varepsilon)(r_1-(t-s)v_1,v_1,s)ds$$

непрерывно справа при $t>0$ и слева при $t<0$. В самом деле, если в момент $t_1>0$ происходит столкновение, т.е. $|w_i(t_1)-w_j(t_1)|=a$ при некоторых $i\neq j$, то положительная бесконечно малая добавка $+\varrho$ в интеграле столкновений соответствует тому, что скорости сталкивающихся шаров изменяются чуть раньше, нежели момент их столкновения $t_1$ (при $t_1<0$ — соответственно чуть позже) — в момент $t-\Delta t_\varrho$, при котором $|w_i(t-\Delta t_\varrho)-w_j(t-\Delta t_\varrho)|=a+\varrho$. Это согласуется с определением скоростей $w_i(t)$ и, соответственно, функции $f(r_1,v_1,t)$ в моменты столкновений.

## 4.5 Микроскопические решения как мерозначные решения уравнения Больцмана–Энскога

Этот раздел посвящён краткому изложению другого способа придания смысла микроскопическим решениям уравнения Больцмана–Энскога. Результаты этого раздела получены автором настоящей диссертационной работы совместно с М. Пульвиренти (M. Pulvirenti) и С. Симонеллой (S. Simonella) и опубликованы в статье [271].

В предыдущих разделах смысл микроскопическим решениям был придан путём регуляризаций дельта-функций и интеграла столкновений. В этом разделе смысл будет дан через определение мерозначных решений и доказательство того, что эмпирическая мера, соответствующая обобщённой функции (4.4), является таким решением. Мерозначные решения кинетических уравнений изучались также в [206, 207].

Для того чтобы определить мерозначные решения, необходимо представить решение уравнения Больцмана в виде ряда по историям столкновений твёрдых шаров, которые графически представляются в виде деревьев.

### 4.5.1 Деревья истории столкновений

Будем использовать следующие обозначения: $\mathbf{z}_j = (z_1, \dots, z_j)$, $z_i = (r_i, v_i)$,

$$f^{\otimes j}(\mathbf{z}_j, t) = f(z_1, t) \cdots f(z_j, t).$$

Введём оператор переноса $\mathcal{S}_i(t)$ и оператор столкновения $\mathcal{C}^{\pm}_{i,j+1}$:

$$(\mathcal{S}_i(t) f^{\otimes j})(\mathbf{z}_j, t) = f(z_1, t) \cdots f(z_{i-1}, t) f(x_i - v_i t, v_i, t) f(z_{i+1}, t) \cdots f(z_j, t),$$

$$\left(\mathcal{C}^{+}_{i,j+1} f^{\otimes (j+1)}\right)(\mathbf{z}_j, t) = na^2 \int\limits_{\Omega_{v_i}} dv_{j+1} d\omega_{j+1} \left(v_i - v_{j+1}, \omega_{j+1}\right)$$

$$\times f(z_1, t) \cdots f(z_{i-1}, t) f(x_i, v_i', t) f(z_{i+1}, t) \cdots f(z_j, t) f(x_i - a\omega_{j+1}, v_{j+1}', t),$$

$$\left(\mathcal{C}^{-}_{i,j+1} f^{\otimes (j+1)}\right)(\mathbf{z}_j, t) = na^2 \int\limits_{\Omega_{v_i}} dv_{j+1} d\omega_{j+1} \left(v_i - v_{j+1}, \omega_{j+1}\right)$$

$$\times f(z_1, t) \cdots f(z_{i-1}, t) f(x_i, v_i, t) f(z_{i+1}, t) \cdots f(z_j, t) f(x_i + a\omega_{j+1}, v_{j+1}, t),$$

т.е. $Q(f, f) = (\mathcal{C}^{+}_{12} - \mathcal{C}^{-}_{12}) f^{\otimes 2}$.

Если мы проитерируем уравнение (4.6) (т.е. будем последовательно подставлять формулу (4.6) в правую часть самой себя), то получим представление решения уравнения Больцмана–Энскога в виде следующего ряда:

$$f(z_1, t) = \mathcal{S}_1 f_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\mathbf{r}_m}^{*} \sum_{\boldsymbol{\sigma}_m} \prod_{i=1}^{m} \sigma_i \int\limits_0^t dt_1 \int\limits_0^{t_1} dt_2 \dots \int\limits_0^{t_{m-1}} dt_m$$

$$\mathcal{S}_{1\dots j}(t - t_1) \mathcal{C}^{\sigma_1}_{r_1, j+1} \mathcal{S}_{1\dots j+1}(t_1 - t_2) \dots \mathcal{C}^{\sigma_m}_{r_m, j+m} \mathcal{S}_{1\dots j+m}(t_m) f_0^{\otimes (j+m)}, \quad (4.21)$$

где значение правой части (как функции на $\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3$) берётся в точке $z_1$. Здесь $\boldsymbol{\sigma}_m = \{\sigma_1, \cdots, \sigma_m\}$, $\sigma_i \in \{+, -\}$, $\mathcal{S}_{1\dots j}(s) = \mathcal{S}_1(s) \dots \mathcal{S}_j(s)$,

$$\sum_{\mathbf{r}_m}^{*} = \sum_{r_1=1}^{j} \sum_{r_2=1}^{j+1} \cdots \sum_{r_m=1}^{j+m-1}.$$

Набор целых чисел $\mathbf{r_m} = \{r_1, \cdots, r_m\}$ назовём «деревом». Это название обосновывается тем фактом, что он описывает историю столкновений шаров, повлиявших на динамику шара, пришедшего в момент времени $t$ в точку $z_1$. Эта история столкновений может быть представлена графически в виде дерева. Например, графическое представление члена ряда, соответствующего

$\mathbf{r_5} = \{1, 1, 2, 3, 2\}$, приведено на рисунке 4.1, другие примеры см. на рисунке 4.2. По построению $i$-я ветвь дерева создаётся частицей с номером $r_i$.

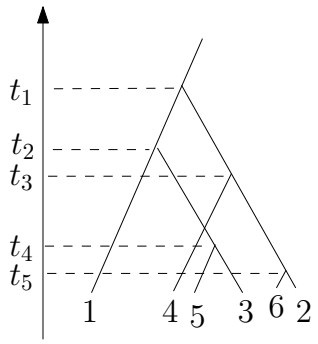



**Рисунок 4.1. – Дерево, соответствующее члену ряда $\mathbf{r_5} = \{1, 1, 2, 3, 2\}$.**

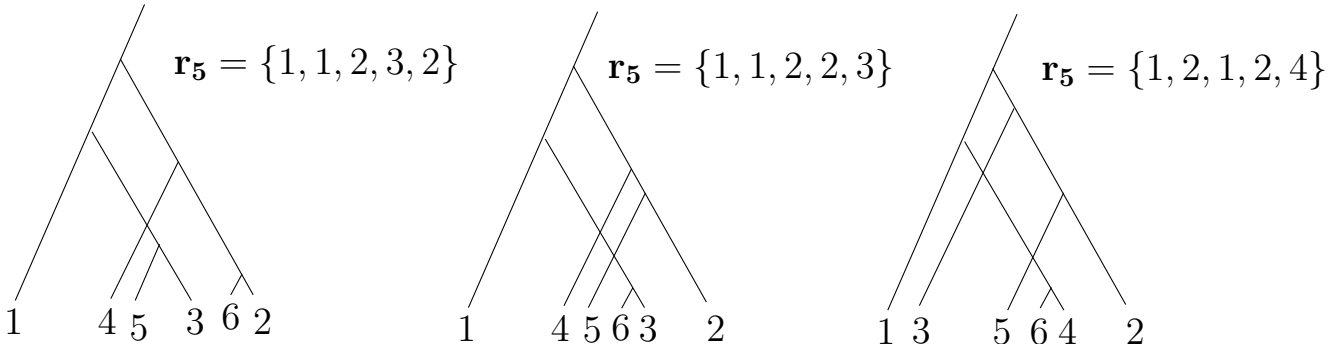



**Рисунок 4.2. – Деревья, соответствующие различным членам ряда, соответствующие одному и тому же частично упорядоченному дереву**

Представление решений кинетических уравнений для твёрдых шаров в виде суммы по историям столкновений (по деревьям) введено в книге [291]. Это представление используется во многих исследованиях [123, 169, 267–270, 289].

Для того чтобы определить решения уравнения Больцмана–Энскога в виде зависящих от времени мер, необходимо провести перегруппировку членов разложения ряда (4.21), введя так называемые частично упорядоченные деревья, в отличие от введённых ранее полностью упорядоченных деревьев или, для краткости, просто «деревьев». Теперь мы будем игнорировать упорядочение времён столкновений в различных ветвях дерева. Иными словами, мы игнорируем упорядочение во времени времён рождений потомков различных родителей.

Например, рассмотрим дерево $\mathbf{r}_5 = \{1, 1, 2, 3, 2\}$ на рисунке 4.1 и два других дерева на рисунке 4.2 с другими упорядочениями столкновений в парах $(t_4, t_5)$ и

$(t_2, t_3)$ (в обозначениях дерева рисунка 4.1). Будем называть «частично упорядоченным деревом» дерево, в котором упорядочены только ветви, созданные одним и тем же родителем. Скажем, в рассматриваемом частично упорядоченном дереве (снова в обозначениях дерева рисунка 4.1) можно сказать, что столкновение частицы 1 с частицей 2 произошло позже столкновения столкновения частицы 1 с частицей 3 ($t_1 > t_2$), но нельзя сказать, какое из двух следующих столкновений произошло раньше: столкновение 1 с 3 или столкновение 2 с 4.

Все три дерева эквивалентны друг другу с точки зрения топологии. Частично упорядоченные деревья как можно определить и как класс эквивалентности полностью упорядоченных деревьев: два полностью упорядоченных дерева соответствуют одному и тому же частично упорядоченному дереву, если они эквивалентны как графы с точки зрения топологии.

### 4.5.2 Поток Больцмана–Энскога

Пусть $\mathbf{z}_{m+1}$ — некоторое начальное состояние $m+1$ твёрдого шара. Для заданных числа столкновений $m$ (т.е. числа операторов $\mathcal{C}$ в (4.21), которое на единицу меньше числа шаров), частично упорядоченного дерева $\mathcal{K}_m$ и знаков $\boldsymbol{\sigma}_m$ определим поток Больцмана–Энскога $\mathbf{z}^{\mathrm{BE}}(s) = (z_i(s))_{i\in\mathcal{I}(s)}$, где $\mathcal{I}(s) \subset \{1, \ldots, m+1\}$ — зависящее от времени подмножество индексов, $s \in [0, t]$. Во-первых, $\mathbf{z}^{\mathrm{BE}}(0) = \mathbf{z}_{m+1}$, $\mathcal{I}(0) = \{1, \ldots, m+1\}$. Далее каждая частица $i$ движется свободно до контакта с некоторой другой частицей $j$, т.е. $\mathbf{z}^{\mathrm{BE}}(s)$ совпадает со свободной динамикой шаров. «Контактом» мы здесь называем конфигурацию, когда частицы расположены друг от друга на расстоянии $a$. Если частица $j$ не является следующим «партнёром по столкновению» частицы $i$ (в соответствии с частично упорядоченным деревом $\mathcal{K}_m$) или частица $i$ не является следующим «партнёром по столкновению» частицы $j$, то они игнорируют друг друга, т.е. проходят сквозь другу друга, несмотря на то что расстояние между ними становится меньше $a$. В противном случае, если эти частицы — партнёры для следующего столкновения, то частица с бóльшим номером удаляется из $\mathcal{I}(s)$. Пусть для определённости $i > j$ и контакт имеет место в момент $\tau$. Тогда

$\mathcal{I}(\tau+0)=\mathcal{I}(\tau-0)\backslash\{i\}$. Далее, если $\sigma_k=-$ (здесь $k$ — индекс, соответствующий данному столкновению), то частица $j$ не меняет своей скорости. Если $\sigma_k=+$, то частица $j$ меняет свою скорость в соответствии с законом упругого соударения (4.3) (где $v_1$ и $v_2$ надо заменить на скорость частиц $j$ и $i$ перед столкновением, а $\omega$ — на единичный вектор, направленный из центра шара $i$ в центр шара $j$).

Обозначим $A_{\mathcal{K}_m\boldsymbol{\sigma}_m}(t)$ множество начальных конфигураций $\mathbf{z}_{m+1}$, совместимых с частично упорядоченным деревом $\mathcal{K}_m$ и знаками $\boldsymbol{\sigma}_m$. Т.е., например, если дерево предписывает, что после некоторого момента $\tau_0$ очередное столкновение частицы $i$ должно произойти с частицей $j$, то начальные условия должны быть таковы, чтоб при описанной динамике контакт $i$ и $j$ на отрезке $[\tau_0,t]$ произошёл. Таким образом, $\mathcal{I}(t)=\{1\}$, $\mathbf{z}^{\mathrm{BE}}(t)=z_1^{\mathrm{BE}}(t)$.

### 4.5.3 Мерозначные микроскопические решения

Пусть $f(r_1,v_1,t)$ — интегрируемая функция, являющаяся мягким решением уравнения Больцмана–Энскога. Обозначим $\mu_t(dr_1dv_1)=f(r_1,v_t,t)dr_1dv_1$ соответствующую меру. Тогда, если проинтегрировать ограниченную функцию $\varphi(r_1,v_1)$ по этой мере и подставить выражение $f(r_1,v_t,t)$ в виде ряда (4.21) (точнее, ряд по частично упорядоченным деревьям, образованный группировкой членов в (4.21), соответствующим одинаковым частично упорядоченным деревьям), то, как можно показать,

$$\int\limits_{\mathbb{T}^3\times\mathbb{R}^3}\varphi(r_1,v_1)\mu_t(dr_1dv_1)$$
$$=\sum_{m=0}^{\infty}n^m\sum_{\mathcal{K}_m}\sum_{\boldsymbol{\sigma}_m\in\{\pm\}^m}\prod_{i=1}^{m}\sigma_i\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_{A^{\varepsilon}_{\mathcal{K}_m\boldsymbol{\sigma}_m}(t)}\varphi\left(z_1^{\mathrm{BE}}(t)\right)\mu_0^{\otimes(m+1)}(d\mathbf{z}_{m+1}).\quad(4.22)$$

Здесь $z_1^{\mathrm{BE}}(t)$ определяется потоком Больцмана–Энскога с начальным состоянием $\mathbf{z}_{m+1}$, частично упорядоченным деревом $\mathcal{K}_m$ и знаками $\boldsymbol{\sigma}_m$. В каждом порядке $m$ берётся сумма по всем частично упорядоченным деревьям $\mathcal{K}_m$ и знакам $\boldsymbol{\sigma}_m$. Также $\mu_0^{\otimes(m+1)}(\mathbf{z}_{m+1})=\mu_0(z_1)\cdots\mu_0(z_{m+1})$,

$$A^{\varepsilon}_{\mathcal{K}_m\boldsymbol{\sigma}_m}(t)=A_{\mathcal{K}_m\boldsymbol{\sigma}_m}(t)\backslash S^{\varepsilon}_{\mathcal{K}_m\boldsymbol{\sigma}_m}(t)\ ,\quad(4.23)$$

где множество $S^{\varepsilon}_{\mathcal{K}_m\boldsymbol{\sigma}_m}(t)$ состоит из всех элементов $\mathbf{z}_{m+1}$ при которых в ходе потока Больцмана–Энского некоторые последовательные столкновения одной и той же частицы происходят с интервалом времени меньше $\varepsilon$. Т.е. $A^{\varepsilon}_{\mathcal{K}_m\boldsymbol{\sigma}_m}(t)$ содержит начальные конфигурации, приводящие только к такой динамике, что после каждого столкновения каждая частица не испытывает столкновений по крайней мере в течение промежутка времени $\varepsilon$.

Данная $\varepsilon$-регуляризация не имеет эффекта, если мера $\mu_t$ регулярная, но важна для обобщения формулы (4.22) на случай сингулярных мер, потому что позволяет избежать патологий, возникающих без этого члена. А именно, если не сделать такую регуляризацию, то подстановка в (4.22) эмпирических мер (4.24) будет приводить к порождению сколь угодно большого количества ветвей в один и тот же момент времени, что образно показано на рисунке 4.3. Условие отделения друг от друга столкновений одной и той же частицы по времени устраняет эту патологию.

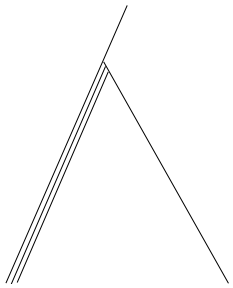


**Рисунок 4.3. – Патология, возникающая без регуляризации (4.23): порождение сколь угодно большого количества ветвей в один и тот же момент времени**

Можно было бы ввести такое разнесение столкновений (рождений ветвей) по времени и в полностью упорядоченном дереве. Но тогда будет невозможно воспроизвести реальную динамику твёрдых шаров, поскольку одновременное рождение частиц в разных ветвях критически важно для этого, пример приведён на рисунке 4.4.

В этом примере шары 3 и 4 сначала сталкиваются друг с другом, а затем — с шарами 1 и 2 соответственно. Но в потоке Больцмана–Энского при каждом столкновении шар с бóльшим номером удаляется из рассмотрения и больше не участвует в динамике. Поэтому для того чтобы описать реальную динамику

твёрдых шаров при помощи потока Больцмана–Энскога, необходимо сопоставить каждому реальному шару 3 и 4 по два «виртуальных» шара (т.е. шара в смысле переменных интегрирования в (4.21)), а реальному столкновению шаров 3 и 4 — два виртуальных столкновения двух пар виртуальных шаров, которые происходят одновременно. Итак, возможность одновременных столкновений шаров в разных ветвях дерева критически важна для правильного воспроизведения реальной динамики твёрдых шаров на языке потока Больцмана–Энскога.

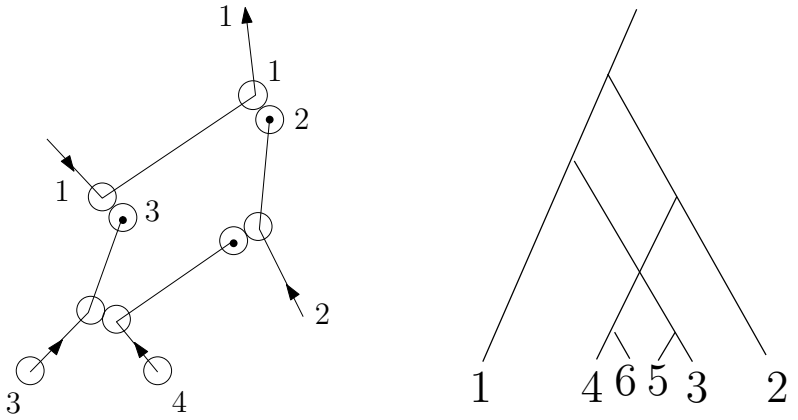



**Рисунок 4.4. – Слева: реальная динамика четырёх шаров. Справа: её представление на языке потока Больцмана–Энскога: «виртуальные» шары 3 и 6 соответствуют одному и тому же реальному шару 3 на картинке слева. Аналогично «виртуальные» шары 4 и 5 соответствуют одному и тому же реальному шару 4 на картинке слева. Тогда столкновения пары 4 и 6 и пары 3 и 5 на дереве справа происходят одновременно, поскольку соответствует одному и тому же реальному столкновению — столкновению шаров 3 и 4 на картинке слева.**

Переход от полностью упорядоченных деревьев к частично упорядоченным (которые первоначально были введены для других целей в [267]) — ключевой приём в [271] по сравнению с более ранними работами, например, [269].

Будем говорить, что $\mu_t$ — мерозначное решение уравнения Больцмана–Энскога, если оно удовлетворяет (4.22) для почти всех $t$.

Перепишем обобщённую функцию (4.4) как меру («эмпирическую меру»):

$$\mu_t(dr_1 dv_1) = n^{-1} \sum_{i=1}^{N} \delta(r_1 - q_i(t), v_1 - w_i(t)) dr_1 dv_1. \tag{4.24}$$

**Теорема 4.3.** *Пусть начальная конфигурация* $\mathbf{z}^0 = (z_1^0, \dots, z_N^0)$, $z_i^0 = (q_i(0), w_i(0))$ *такова, что конфигурации* $\left(z_i^0\right)_{i\in\mathcal{I}}$ *для всех непустых множеств индексов* $\mathcal{I} \subset \{1, \dots, N\}$ *приводят к корректно определённой динамике твёрдых шаров. Тогда эмпирическая мера (4.24) является мерозначным решением уравнения Больцмана–Энскога, т.е. удовлетворяет (4.22) при почти всех* $t$. *А именно, (4.22) выполнено для всех моментов* $t$, *в которые не происходит столкновений.*

# ГЛАВА 5
# ВЫЧИСЛЕНИЕ КВАНТОВЫХ КОГЕРЕНТНОСТЕЙ В ТЕОРИЯХ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЁННОГО СОСТОЯНИЯ

## 5.1 Предварительные замечания

Эта глава посвящена выводу формул для внедиагональных элементов матрицы плотности в рамках двух теорий возмущений для динамики открытых квантовых систем: теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда. Таким образом, устраняется серьёзное ограничение этих теорий. Вывод осуществляется на основе метода проекционных операторов Цванцига, который широко используется для вывода квантовых кинетических уравнений.

Текст этой главы организован следующим образом. Раздел 5.2 посвящён теоретическим основам, которые включают описание гамильтониана (подраздел 5.2.1), вывод общего вида кинетического уравнения с помощью метода проекционных операторов Цванцига (подраздел 5.2.2) и описание теорий возмущения: теории Фёрстера (подраздел 5.2.3) и модифицированной теории Редфилда (подраздел 5.2.4). Область применимости этих теорий возмущения обсуждается в подразделе 5.2.5.

Новые формулы для когерентностей выводятся в разделе 5.3. А именно, подраздел 5.3.1 посвящён случаю равновесного начального состояния резервуара и отсутствию начальных когерентностей. В подразделе 5.3.2 рассматривается случай неравновесного начального состояния резервуара, а в подразделе 5.3.3 — случай неравновесного начального состояния резервуара и начальных когерентностей, т.е. произвольного начального оператора плотности системы. Каждый подраздел включает формулу в рамках общего формализма и её применение к двум рассматриваемым теориям. В разделе 5.4 приводятся результаты численного счёта по выведенным формулам и сравнение с численно точным

(но алгоритмически сложным) методом на основе цепочки уравнений движения (“hierarchical equations of motion — HEOM”) [193].

В разделе 5.5 обсуждаются некоторые вопросы. Разработанных подход позволяет вычислить эволюцию всего оператора плотности системы (а не только её диагональной части) для произвольного начального оператора плотности. Поэтому имеет смысл обсудить свойства соответствующего динамического отображения $\Lambda_t$, которое отображает начальный оператор плотности $\sigma(0)$ в проэволюционировавший $\sigma(t)$. Это делается в подразделе 5.5.1. Также в нём обсуждается вопрос, следует ли классифицировать эту динамику как марковскую или как немарковскую. Немарковская динамика открытых квантовых систем привлекает сейчас большое внимание исследователей. В подразделе 5.5.2 мы обсудим, в каком смысле фёрстеровский механизм переноса энергии возбуждения можно считать процессом «некогерентных скачков», как принято считать в физической литературе. Наконец, в подразделе 5.5.3 приводятся аналитическое оценки когерентностей в теории Фёрстера и обсуждается область применимости этой теории. В частности, показывается, что приближение Фёрстера может при определённых условиях работать даже тогда, когда дипольная связь между молекулами (малый параметр данной теории возмущения) много больше энергии реорганизации (которая характеризует силу взаимодействия системы с резервуаром).

Надо отметить, что, в отличие от теории слабой связи, теория Фёрстера и модифицированная теория Редфилда пока не выведены на математическом уровне строгости. Мы также не решаем эту проблему, но выводим новые формулы в рамках этих теорий, а также приводим некоторые соображения в направлении разработки строгой теории. По этой причине часть изложения в этой главе также будет выполнена на «физическом» уровне строгости. Тем не менее, мы будем следовать определённому строгому методу — методу проекционных операторов Цванцига [327]. В заключительном разделе этой главы мы подытожим полученные формулы в виде теоремы.

## 5.2 Теоретические основы

### 5.2.1 Гамильтониан

Гамильтониан, описывающий процесс переноса энергии возбуждения в молекулярных системах, называемый гамильтонианом экситона Френкеля, имеет следующий вид [245, 284, 319]:

$$H = H^{\mathrm{el}} + H^{\mathrm{Coul}} + H^{\mathrm{ph}} + H^{\text{el-ph}} + H^{\mathrm{reorg}}, \tag{5.1}$$

$$H^{\mathrm{el}} = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\, \varepsilon_n^0\, \langle n|\,, \qquad H^{\mathrm{Coul}} = \sum_{n=1}^{N} \sum_{m>n}^{N} (J_{nm}\, |n\rangle\, \langle m| + \text{э.с.}),$$

$$H^{\mathrm{ph}} = \sum_{n=1}^{N} H_n^{\mathrm{ph}}, \qquad H_n^{\mathrm{ph}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega_n(\xi) c_n^\dagger(\xi) c_n(\xi)\, d\xi,$$

$$H^{\text{el-ph}} = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\, u_n\, \langle n|\,, \qquad u_n = \int_{-\infty}^{+\infty} h_n(\xi)[c_n(\xi) + c_n^\dagger(\xi)]\, d\xi,$$

$$H^{\mathrm{reorg}} = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\, \lambda_n\, \langle n|\,, \qquad \lambda_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{h_n(\xi)^2}{\omega_n(\xi)}\, d\xi,$$

где «э.с.» означает эрмитово сопряжение. Здесь слагаемые $H^{\mathrm{el}}$ и $H^{\mathrm{Coul}}$ представляют электронные степени свободы молекул — открытую квантовую систему: $N$ есть число молекул, $|n\rangle$ соответствует возбуждённому состоянию $n$-й молекулы, тогда как остальные находятся в основном состоянии. Т.е. каждая молекула рассматривается как двухуровневая система, причём в каждый момент времени ровно одна молекула находится в возбуждённом состоянии (разумеется, с точностью до суперпозиций). Таким образом, $H^{\mathrm{el}}$ и $H^{\mathrm{Coul}}$ действуют в пространстве $\mathbb{C}^N$, где векторы $|n\rangle$, $n = 1, \ldots, N$, образуют ортонормированный базис. Далее, $\varepsilon_n^0$ — энергия возбуждения $n$-й молекулы, $J_{nm}$ — дипольная кулоновская связь между $n$-й и $m$-й молекулами. Обычно эти величины вещественны, но мы будем предполагать, что они комплексные, причём $J_{mn} = J_{nm}^*$. Эти дипольные связи отвечают за перенос энергии возбуждения: $H^{\mathrm{Coul}}$ — единственное слагаемое, содержащее внедиагональные элементы в базисе локальных возбуждений $\{|n\rangle\}$.

Электронные степени свободы каждой молекулы взаимодействуют со своим собственным резервуаром, состоящим из континуума одномерных гармонических осцилляторов (индексируемых вещественным параметром $\xi$), которые отражают колебания ядер атомов вокруг своих положений равновесия, а также влияние окружения молекулярной системы. Гильбертово пространство каждого такого резервуара — бозонное фоковское пространство над $L^2(\mathbb{R})$, которое мы обозначим $\mathscr{F}(L^2(\mathbb{R}))$. Соответственно, гильбертово пространство составного резервуара (объединения резервуаров всех молекул) — $\mathscr{F}(L^2(\mathbb{R}))^{\otimes N}$.

Далее, $c_n^\dagger(\xi)$ и $c_n(\xi)$ — операторы рождения и уничтожения кванта (фонона) в моде $\xi$ для резервуара $n$-й молекулы, удовлетворяющие бозонным каноническим коммутационным соотношениям

$$[c_m(\zeta), c_n^\dagger(\xi)] = \delta_{mn}\delta(\xi - \zeta),$$
$$[c_m(\zeta), c_n(\xi)] = 0.$$

Строго говоря, $c_n^\dagger(\xi)$ и $c_n(\xi)$ — это операторнозначные обобщённые функции, действующие на пространстве Шварца гладких быстро убывающих функций $\mathscr{S}(\mathbb{R})$, но $H_n^{\text{ph}}$ и $u_n$ — хорошо определённые операторы в $\mathscr{F}(L^2(\mathbb{R}))$ [20].

Перейдём к рассмотрению гамильтониана взаимодействия системы с резервуаром $H^{\text{el-ph}}$. Взаимодействие электронных и ядерных степеней свободы вызвано тем, что если электрон в той или иной молекуле переходит на более высокую орбиталь, то равновесные положения ядер изменяются. Вещественная величина $h_n(\xi)$ представляет собой обезразмеренное смещение моды $\xi$ резервуара $n$-й молекулы. С формальной точки зрения $h_n(\xi)$ — непрерывная функция, стремящаяся к нулю при $|\xi| \to \infty$, $\omega_n(\xi)$ — гладкая положительная функция, производная которой нигде не обращается в нуль. Взаимодействие электронных и ядерных степеней свободы влечёт за собой появление не только гамильтониана взаимодействия $H^{\text{el-ph}}$, но и смещение энергий возбуждения системы $H^{\text{reorg}}$, где $\lambda_n$ — так называемая энергия реорганизации $n$-й молекулы. Сумму трёх членов $H^{\text{el}} + H^{\text{Coul}} + H^{\text{reorg}}$ будем называть гамильтонианом системы.

**Замечание 5.1.** Физический смысл энергии реорганизации состоит в следующем. Итак, при переходе молекулы из основного в возбуждённое состояние рав-

новесные положения ядер смещаются и ядра начинают колебаться вокруг новых положений равновесия. Постепенно эти колебания затухают и состояние ядер приходит к тепловому равновесному состоянию вокруг новых положений равновесия (слово «равновесие» здесь употреблено в двух разных смыслах: равновесие механическое и равновесие термодинамическое). Энергия, которая при этом рассеивается, и называется энергией реорганизации — энергия, рассеиваемая ядрами в процессе их реорганизации к новой равновесной конфигурации. Как видим из сравнения $H^{\mathrm{el}}$ с $H^{\mathrm{reorg}}$, энергия реорганизации приводит к смещению энергий возбуждения молекул на соответствующую величину за счёт описанного эффекта.

Утверждение о затухании колебаний ядер и диссипации энергии требует отдельного пояснения. Физически колебания ядер затухают из-за взаимодействия с внешней средой. Внешняя среда учтена в гамильтониане посредством того, что резервуар содержит содержит бесконечное число (континуум) колебательных мод. Количество базисных направлений, в которых могут колебаться ядра молекулы, конечно, поэтому наличие в резервуаре бесконечного числа мод объясняется тем, что резервуар содержит не только ядерные степени свободы молекул, но и внешнюю среду. Благодаря тому, что резервуар содержит континуум колебательных мод, затухание колебаний может иметь место в «слабом», «интегральном» (по $\xi$) смысле, однако математических работ со строгим обоснованием и анализом этого пока нет. Таким образом, здесь, на наш взгляд, есть определённый разрыв между формальной математической моделью, заданной гамильтонианом, и физическим объяснением, которое обычно приводится. Но с формальной точки зрения гамильтониан задан корректно. Смысл этого замечания состоит только в пояснении физического смысла его члена $H^{\mathrm{reorg}}$, к которому мы будем обращаться в дальнейшем.

Отметим, что данный гамильтониан не включает электромагнитное поле и не включает основного состояния всех молекул и потому не описывает процесс возбуждения молекулярного комплекса в результате поглощения фотона. Он описывает только дальнейший перенос возбуждённого состояния (которое

задаётся как начальное условие) от одной молекулы к другой.

В дальнейшем мы будем рассматривать состояния в пространстве резервуара, которые условно запишем следующим образом:

$$\rho_g = \frac{e^{-\beta H^{\mathrm{ph}}}}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H^{\mathrm{ph}}}}, \tag{5.2}$$

$$\rho_\alpha = \frac{e^{-\beta H_\alpha}}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H_\alpha}}, \tag{5.3}$$

где $\beta > 0$ — обратная температура резервуара (не путать с нижним индексом $\beta$, который будет возникать далее), $H_\alpha = \langle\alpha|H|\alpha\rangle$, $|\alpha\rangle$ — некоторый вектор в пространстве системы (напомним, что в этом случае $H_\alpha$ — оператор в пространстве резервуара, см. (1.2)). Строго говоря, следы операторов, стоящих в знаменателях, не имеют определённых значений и потому данные состояния не определены как операторы плотности. Однако эти операторы плотности корректно определены, если континуум мод в резервуаре заменить на их конечное число (то есть интегралы по $\xi$ — суммами по конечному числу $\xi$). Тогда гильбертово пространство каждого резервуара — $L^2(\mathbb{R})^{\otimes M}$, где $M$ — число мод. Затем после получения выражений для корреляционных функций (см. ниже) число $M$ следует устремить к бесконечности. Именно в таком предельном смысле следует понимать состояния вида (5.2) и (5.3).

Говоря иначе, состояния, условно записанные в виде (5.2) и (5.3), — не операторы плотности (если количество гармонических осцилляторов — континуум), а линейные функционалы, действующие на $C^*$-алгебре канонических коммутационных соотношений в соответствии с формулами

$$\operatorname{Tr} c_n^\dagger(\xi) c_m(\zeta)\rho_g \equiv \langle c_n^\dagger(\xi) c_m(\zeta)\rangle_g = \delta_{nm}\delta(\xi-\zeta) n_{\mathrm{BE}}(\omega_n(\xi)),$$
$$\operatorname{Tr} c_{n\alpha}^\dagger(\xi) c_{m\alpha}(\zeta)\rho_\alpha \equiv \langle c_{n\alpha}^\dagger(\xi) c_{m\alpha}(\zeta)\rangle_\alpha = \delta_{nm}\delta(\xi-\zeta) n_{\mathrm{BE}}(\omega_n(\xi)),$$

где $c_{n\alpha}(\xi) = c_n(\xi) + |\langle\alpha|n\rangle|^2 h_n(\xi)/\omega_n(\xi)$, $n_{\mathrm{BE}}(\omega) = (e^{\beta\omega}-1)^{-1}$ — среднее число фононов частоты $\omega$ в статистике Бозе–Эйнштейна.

Нам понадобится корреляционная функция

$$\begin{aligned} C_n(t) &= \mathrm{Tr}[u_n(t)u_n\rho_g] \equiv \langle u_n(t)u_n\rangle_g = \\ &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, h_n(\xi)\left\{[n_{\mathrm{BE}}(\omega_n(\xi))+1]e^{-i\omega_n(\xi)t} + n_{\mathrm{BE}}(\omega_n(\xi))e^{i\omega_n(\xi)t}\right\} = \\ &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, h_n(\xi)\left[\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\cos\omega_n(\xi)t - i\sin\omega_n(\xi)t\right] = \\ &= \int\limits_{0}^{\infty} d\omega\, \mathscr{J}_n(\omega)\left[\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\cos\omega t - i\sin\omega t\right]. \end{aligned}$$

где $u_n(t) = e^{iH_n^{\mathrm{ph}}t}u_n e^{-iH_n^{\mathrm{ph}}t}$, $\mathscr{J}_n(\omega)$ — спектральная плотность резервуара $n$-й молекулы, которая определяется как

$$\mathscr{J}_n(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi\, h_n(\xi)^2[\delta(\omega-\omega_n(\xi)) - \delta(\omega+\omega_n(\xi))]. \tag{5.4}$$

Её можно выразить через корреляционную функцию $C_n(t)$ следующим образом:

$$\mathscr{J}_n(\omega) = \frac{i}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t}\,\mathrm{Im}\left[C_n(t)\right].$$

Также нам потребуется функция спектральной линии [248]

$$\begin{aligned} g_n(t) &= \int\limits_0^t d\tau_1 \int\limits_0^{\tau_1} d\tau_2\, C_n(\tau_2) = \\ &= \int\limits_0^{\infty} d\omega\,(1-\cos\omega t)\,\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\frac{\mathscr{J}_n(\omega)}{\omega^2} + i\int\limits_0^{\infty} d\omega\,(\sin\omega t - \omega t)\frac{\mathscr{J}_n(\omega)}{\omega^2}. \end{aligned} \tag{5.5}$$

Действие состояний $\langle\cdot\rangle_g$ и $\langle\cdot\rangle_\alpha$ на наблюдаемые более общего вида даётся теоремой Вика.

Обозначим $\rho^{(\mathrm{S})}(t)$ оператор плотности полной системы, т.е. и электронных, и ядерных степеней свободы, в представлении Шрёдингера (с чем связан верхний индекс (S)). Его динамка задаётся формулой $\rho^{(\mathrm{S})}(t) = e^{-iHt}\rho^{(\mathrm{S})}(0)e^{iHt}$. Если фор-

мально продифференцировать это равенство по времени, то получится уравнение фон Неймана (также иногда называется квантовым уравнением Лиувилля):

$$\dot{\rho}^{(\mathrm{S})}(t) = -i[H, \rho^{(\mathrm{S})}(t)]. \tag{5.6}$$

### 5.2.2 Общий вид кинетического уравнения

Поскольку резервуар включает в себя бесконечное число степеней свободы, даже численное решение уравнения (5.6) представляет большие трудности. Теория возмущений и вывод квантовых кинетических уравнений для конечного числа степеней свободы — это один из основных инструментов теории открытых квантовых систем. Для этого широко используется метод проекционных операторов Цванцига. Он основан на различении «медленных» и «быстрых» степеней свободы. Здесь мы опишем применение этого метода к нашему частному случаю. Мы следуем статьям [319] и [284]. Пусть $\{|\alpha\rangle\}$ — некоторый ортонормированный базис системы (т.е. пространства $\mathbb{C}^N$) и предположим, что внедиагональную часть гамильтониана $\langle\alpha|H|\beta\rangle$, $\alpha \neq \beta$, можно считать малым возмущением. Представим тогда гамильтониан в виде двух слагаемых: базового гамильтониана $H_0$ и возмущения $H'$:

$$H = H_0 + H', \tag{5.7}$$

где

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\, H_\alpha \,\langle\alpha|\,, \qquad H_\alpha = \langle\alpha|H|\alpha\rangle\,, \\ H' &= \sum_{\alpha\neq\beta} |\alpha\rangle\, H'_{\alpha\beta} \,\langle\beta|\,, \quad H'_{\alpha\beta} = \langle\alpha|H|\beta\rangle\,. \end{aligned} \tag{5.8}$$

Предположим, что эволюцию, порождаемую базовым гамильтонианом $H_0$, можно вычислить точно. В представлении взаимодействия относительно $H_0$ имеем

$$\dot{\rho}(t) = -i[H'(t), \rho(t)] \equiv -i\mathcal{L}(t)\rho(t), \tag{5.9}$$

где

$$\begin{aligned} \rho(t) &= e^{iH_0 t}\rho^{(\mathrm{S})}(t)e^{-iH_0 t}, \\ H'(t) &= e^{iH_0 t}H'e^{-iH_0 t}, \end{aligned} \tag{5.10}$$

и $\mathcal{L}(t) = [H'(t), \cdot]$. Выражения (5.10) и представляют собой переход от представления Шрёдингера в представление взаимодействия.

Введём проектор $\mathcal{P}$, действующий на произвольный оператор $X$ в пространстве электронных и ядерных степеней свободы, следующим образом:

$$\mathcal{P}X = \sum_{\alpha} (\mathrm{Tr}\, X_{\alpha\alpha}) \left|\alpha\right\rangle \left\langle\alpha\right| \otimes \rho_{\alpha}, \quad X_{\alpha\alpha} = \left\langle\alpha\right| X \left|\alpha\right\rangle . \tag{5.11}$$

Здесь $\rho_\alpha$ задаётся формулой (5.3) — равновесное состояние резервуара при условии, что система находится в состоянии $\left|\alpha\right\rangle$. Оператор $\mathcal{P}$ удовлетворяет следующим свойствам:

$$[\mathcal{P}, \mathcal{L}_0] = 0, \quad \mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{P} = 0, \tag{5.12}$$

где $\mathcal{L}_0 = [H_0, \cdot]$.

Обозначим также $\mathcal{Q} = \mathrm{Id} - \mathcal{P}$. Тогда представим оператор плотности $\rho(t)$ в виде двух слагаемых:

$$\rho(t) = \mathcal{P}\rho(t) + \mathcal{Q}\rho(t).$$

Вставляя разложение единицы $\mathcal{P} + \mathcal{Q}$ перед $\rho(t)$ в правой части (5.9), получаем

$$\mathcal{P}\dot{\rho}(t) = -i\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}\rho(t), \tag{5.13}$$

$$\mathcal{Q}\dot{\rho}(t) = -i\mathcal{L}(t)\mathcal{P}\rho(t) - i\mathcal{Q}\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}\rho(t), \tag{5.14}$$

где использованы свойства (5.12).

Если мы будем считать $\mathcal{P}\rho(t)$ известной операторной функцией времени, то формальное решение уравнения (5.14) для $\mathcal{Q}\rho(t)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}\rho(t) = {} & \mathrm{T}_+ \exp\left\{ -i \int_0^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(\tau) d\tau \right\} \mathcal{Q}\rho(0) \\ & - i \int_0^t d\tau\, \mathrm{T}_+ \exp\left\{ -i \int_\tau^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(\tau') d\tau' \right\} \mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau), \end{aligned} \tag{5.15}$$

где

$$\mathrm{T}_+ \exp\left\{-i\int\limits_0^t f(\tau)d\tau\right\} = 1+\sum_{n=1}^{\infty}(-i)^n \int\limits_0^t d\tau_1 \int\limits_0^{\tau_1} d\tau_2 \ldots \int\limits_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n f(\tau_1)f(\tau_2)\cdots f(\tau_n) \quad (5.16)$$

— хронологическая экспонента.

Подстановка (5.15) в (5.13) приводит к формально точному уравнению Накажимы–Цванцига для $\mathcal{P}\rho(t)$. Наша цель сейчас состоит в том, чтобы вывести приближённое кинетическое уравнение для $\mathcal{P}\rho$, используя теорию возмущений относительно $H'$.

Если $\mathcal{Q}\rho(0)=0$, то в первом порядке относительно $\mathcal{L}(t)$ имеем

$$\mathcal{Q}\rho(t) = -i\int\limits_0^t \mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau)\,d\tau. \quad (5.17)$$

Подстановка (5.17) в (5.13) даёт

$$\mathcal{P}\dot\rho(t) = -\int\limits_0^t d\tau\,\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau).$$

Замена переменной интегрирования даёт

$$\mathcal{P}\dot\rho(t) = -\int\limits_0^t d\tau\,\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{L}(t-\tau)\mathcal{P}\rho(t-\tau).$$

Используя равенство $[H_0,\mathcal{P}\rho]=0$ и возможность циклической перестановки внутри операции взятия следа, имеем

$$\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{L}(t-\tau)\mathcal{P}\rho(t-\tau) = \mathcal{P}\mathcal{L}(\tau)\mathcal{L}(0)\mathcal{P}\rho(t-\tau)$$

и, следовательно,

$$\mathcal{P}\dot\rho(t) = -\int\limits_0^t d\tau\,\mathcal{P}\mathcal{L}(\tau)\mathcal{L}(0)\mathcal{P}\rho(t-\tau). \quad (5.18)$$

Уравнение (5.18) — это немарковское квантовое кинетическое уравнение для $\mathcal{P}\rho$. Немарковость (см., например, в [22] и [275]) здесь проявляет себя в зависимости правой части не только от текущего состояния $\mathcal{P}\rho(t)$, но и от прошлых состояний $\mathcal{P}\rho(t-\tau)$, а также явная зависимость от времени в верхнем пределе интегрирования.

При определённых условиях можно перейти к марковскому кинетическому уравнению. Оператор $\mathcal{P}$ включает в себя частичный след по резервуару, который содержит бесконечное число степеней свободы. Поэтому подынтегральное выражение в (5.18) отражает быстрый релаксационный процесс в резервуаре и стремится к нулю много быстрее, чем эволюционирует $\mathcal{P}\rho$ (правая часть (5.18) имеет второй порядок малости относительно возмущения $H'$). В этом случае мы можем заменить $\mathcal{P}\rho(t-\tau)$ на $\mathcal{P}\rho(t)$ в правой части (5.18) и расширить верхний предел интегрирования до бесконечности. Это так называемое приближение Борна–Маркова [22, 305], которое приводит к марковскому квантовому кинетическому уравнению

$$\mathcal{P}\dot{\rho}(t) = \left\{ -\int_0^\infty d\tau\, \mathcal{P}\mathcal{L}(\tau)\mathcal{L}(0) \right\} \mathcal{P}\rho(t). \tag{5.19}$$

Обозначим

$$\mathcal{P}\rho(t) = \sum_\alpha p_\alpha(t)\, |\alpha\rangle\, \langle\alpha| \otimes \rho_\alpha, \tag{5.20}$$

где

$$p_\alpha(t) = \langle\alpha|\, \mathrm{Tr}_B\, \rho(t) |\alpha\rangle\, .$$

Здесь $\mathrm{Tr}_B$ означает частичный след по ядерным степеням свободы, т.е. по резервуару. Индекс $B$ связан с тем, что в англоязычной литературе резервуар часто называют “bath”. Тогда уравнение (5.19) для оператора $\mathcal{P}$ вида (5.11) можно записать в виде

$$\dot{p}_\alpha(t) = \sum_{\beta\neq\alpha} [K_{\alpha\beta} p_\beta(t) - K_{\beta\alpha} p_\alpha(t)], \tag{5.21}$$

где $K_{\alpha\beta}$ — скорости переноса:

$$K_{\alpha\beta} = 2\,\mathrm{Re} \int_0^\infty d\tau\ \mathrm{Tr}[e^{iH_\beta\tau} H'_{\beta\alpha} e^{-iH_\alpha\tau} H'_{\alpha\beta} \rho_\beta]. \tag{5.22}$$

Применение этой формулы к теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда будет дано ниже.

Отметим, что условие $\mathcal{Q}\rho(0) = 0$ означает, что начальное состояние имеет вид

$$\rho(0) = \sum_{\alpha} p_{\alpha}(0) \left|\alpha\right\rangle \left\langle\alpha\right| \otimes \rho_{\alpha}, \tag{5.23}$$

т.е. что начальные когерентности (внедиагональные элементы оператора плотности в базисе $\{|\alpha\rangle\}$) отсутствуют и резервуар находится в равновесии (соответствующем состоянию системы). Обобщение этого вывода на случай более реалистичного начального состояния вида

$$\rho(0) = \sum_{\alpha} p_{\alpha}(0) \left|\alpha\right\rangle \left\langle\alpha\right| \otimes \rho_{g}, \tag{5.24}$$

где $\rho_g$ задаётся формулой (5.2), дано в статье [284].

Прокомментируем состояние (5.24). Это равновесное состояние резервуара относительно основного электронного состояния всех молекул, т.е. непосредственно перед возбуждением. Как говорилось выше, гамильтониан (5.1) не описывает процесс возбуждения электронных степеней свободы в результате поглощения фотона, он описывает только дальнейший перенос начального возбуждённого состояния. Поскольку непосредственно перед возбуждением резервуар находился в состоянии $\rho_g$, то начальное условие вида (5.24) более реалистично. Состояние резервуара $\rho_g$ равновесно относительно основного состояния электронных степеней свободы, но неравновесно относительно возбуждённого состояния. Состояние $\rho_\alpha$ — равновесное состояние резервуара относительно состояния системы $|\alpha\rangle$. Причина, по которой резервуар выходит из равновесия при электронном возбуждении, состоит в том, что при переходе одного из электронов на более высокую орбиту смещаются равновесные положения ядер. В гамильтониане это выражается посредством величин $h_n(\xi)$.

Однако, если релаксация резервуара к равновесному состоянию (зависящему от $\alpha$) происходит очень быстро, неравновесными эффектами можно пренебречь и использовать формулу (5.22) даже в случае начального состояния вида (5.24). В большинстве случаев мы это и будем предполагать.

Мы видим, что кинетическое уравнение (5.21) описывает только динамику диагональных элементов («населённостей») $p_\alpha(t)$ оператора плотности системы в базисе $\{|\alpha\rangle\}$. Вычисление внедиагональных элементов («когерентностей») составляет предмет настоящей главы.

Наконец, отметим, что выбор проектора $\mathcal{P}$ и гамильтониана возмущения $H'$ вида

$$\mathcal{P}X = (\mathrm{Tr}_B\, X) \otimes \rho_g, \quad H' = H^{\text{el-ph}}$$

с последующим аналогичным выводом квантового кинетического уравнения [144, 241, 245, 275, 305] приводит к обычной теории предела слабой связи системы с резервуаром для полного оператора плотности системы. В физической литературе соответствующая теория называется *стандартной теорией Редфилда*. А именно, уравнение (5.18) называется в этом случае *немарковским уравнением Редфилда*, (5.19) — *марковским уравнением Редфилда*. Оно не имеет вид ГКСЛ (1.16) и, вообще говоря, не сохраняет положительность. Для перехода к уравнению вида ГКСЛ применяется дополнительное так называемое секулярное приближение, заключающееся в пренебрежении быстро осциллирующими членами в правой части (5.19) [22, 241, 275]. Тогда получается то же уравнение вида ГКСЛ, которое получается в строгой математической процедуре предела слабой связи [89, 144] (с уравнениями этого вида мы работали в главе 1). Это уравнение в физической литературе называется *секулярным уравнением Редфилда*. Соответственно, уравнение (5.19) называют тогда несекулярным марковским (или просто несекулярным) уравнением Редфилда. В этой главе под «уравнением Редфилда» без дополнительных пояснений мы будем понимать несекулярное марковское уравнение Редфилда.

Несмотря на то что несекулярное уравнение Редфилда в общем случае не сохраняет положительность, оно широко используется в физике, поскольку секулярное приближение на практике не всегда оказывается применимым. Уравнение Редфилда может приводить лишь к небольшому нарушению положительности на коротких начальных промежутках времени. Известны средства преодоления этой трудности, заключающиеся в корректировке начальных условий [295] и

в использовании другого приближения на коротком начальном промежутке времени [135]. В литературе ведутся дискуссии по вопросу того, какое из двух марковских уравнений Редфилда — секулярное или несекулярное — следует предпочитать [192, 198, 275]. Предлагаются другие способы получения уравнения вида ГКСЛ из уравнения Редфилда, помимо секулярного приближения [161, 257, 315].

### 5.2.3 Теория Фёрстера

Теория Фёрстера соответствует случаю, когда дипольные связи между молекулами $J_{nm}$ можно считать малыми. Выберем $\{|\alpha\rangle\} = \{|n\rangle\}$, т.е. так называемый локальный базис (базис из возбуждённых состояний отдельных молекул) в качестве базиса, на основе которого строится теория, т.е. определяется проектор $\mathcal{P}$ по формуле (5.11) и выделяется гамильтониан возмущения $H'$ по формуле (5.8), считающийся малым. В этом случае $H' = H^{\mathrm{Coul}}$ и

$$H_n = \langle n|H|n\rangle = \varepsilon_n^0 + \lambda_n + H^{\mathrm{ph}} + u_n. \tag{5.25}$$

Применение общей формулы (5.22) к этому случаю даёт

$$K_{nm} = 2|J_{nm}|^2 \,\mathrm{Re} \int\limits_0^\infty d\tau \,\mathrm{Tr}[e^{iH_m\tau} e^{-iH_n\tau} \rho_m], \tag{5.26}$$

где $\rho_m = e^{-\beta H_m} / \,\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_m}$.

Используя метод разложений по кумулянтам (полуинвариантам) [248], след, стоящий в (5.26), можно явно вычислить [319]:

$$K_{nm} = 2|J_{nm}|^2 \,\mathrm{Re} \int\limits_0^\infty d\tau \, F_m^*(\tau) A_n(\tau), \tag{5.27}$$

$$\begin{aligned} F_m(\tau) &= \exp\{-i(\varepsilon_m^0 + \lambda_m)\tau\} \,\mathrm{Tr}\left(\exp\{-i(H_m^{\mathrm{ph}} + u_m)\tau\} \exp\{iH_m^{\mathrm{ph}}\tau\} \rho_m^{\mathrm{ph,e}}\right) \\ &= \exp\{-i(\varepsilon_m^0 - \lambda_m)\tau - g_m^*(\tau)\}, \end{aligned} \tag{5.28}$$

$$\begin{aligned} A_n(\tau) &= \exp\{-i(\varepsilon_n^0 + \lambda_n)\tau\} \,\mathrm{Tr}\left(\exp\{iH_n^{\mathrm{ph}}\tau\} \exp\{-i(H_n^{\mathrm{ph}} + u_n)\tau\} \rho_n^{\mathrm{ph,g}}\right) \\ &= \exp\{-i(\varepsilon_n^0 + \lambda_n)\tau - g_n(\tau)\}, \end{aligned} \tag{5.29}$$

где

$$\rho_n^{\mathrm{ph,g}} = \frac{\exp\{-\beta H_n^{\mathrm{ph}}\}}{\mathrm{Tr}\exp\{-\beta H_n^{\mathrm{ph}}\}}, \tag{5.30}$$

$$\rho_m^{\mathrm{ph,e}} = \frac{\exp\{-\beta (H_m^{\mathrm{ph}} + u_m)\}}{\mathrm{Tr}\exp\{-\beta (H_m^{\mathrm{ph}} + u_m)\}}, \tag{5.31}$$

$g_n(\tau)$ — функция спектральной плотности (5.5). Отметим, что преобразования Фурье функций $A_n(t)$ и $F_n(t)$ дают соответственно спектры поглощения и испускания $n$-й молекулы. Таким образом, преимуществом теории Фёрстера (как, впрочем, и модифицированной теории Редфилда) является то, что коэффициенты переноса в соответствующем кинетическом уравнении можно получить из экспериментальных данных.

### 5.2.4 Модифицированная теория Редфилда

Обозначим $E_k$ и $|k\rangle = \sum_{n=1}^{N} \varphi_{kn} |n\rangle$ — собственные значения и собственные векторы гамильтониана системы $H^{\mathrm{el}} + H^{\mathrm{reorg}} + H^{\mathrm{Coul}}$. Будем предполагать, что спектр невырожден. Собственные векторы $|k\rangle$, представляющие собой суперпозиции локальных возбуждений, называются экситонами.

Тогда выбор $\{|\alpha\rangle\} = \{|k\rangle\}$, т.е. выбор базиса из делокализованных возбуждений (экситонов), и, соответственно, $H_k = \langle k|H|k\rangle$ и

$$H' = \sum_{k \neq k'} |k\rangle \, H_{kk'}^{\text{el-ph}} \, \langle k'| \,, \tag{5.32}$$

где

$$H_{kk'}^{\text{el-ph}} = \langle k|H^{\text{el-ph}}|k'\rangle = \sum_{n=1}^{N} a_{kk'}(n) u_n, \tag{5.33}$$

$a_{kk'}(n) = \overline{\varphi_{kn}}\varphi_{k'n}$, соответствует модифицированной теории Редфилда. Иными словами, эта теория соответствует случаю, когда взаимодействие между различ-

ными экситонами можно считать малым. Тогда имеем [319]

$$\begin{aligned} K_{kk'} &= 2\,\mathrm{Re}\int\limits_0^\infty d\tau\,\mathrm{Tr}[e^{iH_{k'}\tau}H^{\text{el-ph}}_{k'k}e^{-iH_k\tau}H^{\text{el-ph}}_{kk'}\rho_{k'}] \\ &= 2\,\mathrm{Re}\int\limits_0^\infty d\tau\,F^*_{k'}(\tau)A_k(\tau)N_{kk'}(\tau), \end{aligned} \tag{5.34}$$

где $\rho_k = e^{-\beta H_k}/\,\mathrm{Tr}\,e^{-\beta H_k}$,

$$F_{k'}(\tau) = \exp\{-i(E^0_{k'}-\lambda_{k'})\tau - g^*_{k'}(\tau)\}, \tag{5.35}$$

$$A_k(t) = \exp\{-i(E^0_k+\lambda_k)\tau - g_k(\tau)\}, \tag{5.36}$$

$$N_{kk'}(\tau) = \ddot{g}_{k'kkk'}(\tau)\exp\{2g_{kkk'k'}(\tau)+2i\lambda_{kkk'k'}\tau\} - N^{(1)}_{kk'}(\tau)N^{(2)}_{kk'}(\tau),$$

$$\begin{aligned} N^{(1)}_{kk'}(\tau) &= [\dot{g}_{k'kkk}(\tau)-\dot{g}_{k'kk'k'}(\tau)-2i\lambda_{k'kk'k'}]\exp\{2g_{kkk'k'}(\tau)+2i\lambda_{kkk'k'}\tau\}, \\ N^{(2)}_{kk'}(\tau) &= [\dot{g}_{kk'kk}(\tau)-\dot{g}_{kk'k'k'}(\tau)-2i\lambda_{kk'k'k'}]\exp\{2g_{kkk'k'}(\tau)+2i\lambda_{kkk'k'}\tau\}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_{k_1k_2k_3k_4}(\tau) &= \sum_{n=1}^N a_{k_1k_2}(n)a_{k_3k_4}(n)g_n(\tau), \\ \lambda_{k_1k_2k_3k_4} &= \sum_{n=1}^N a_{k_1k_2}(n)a_{k_3k_4}(n)\lambda_n, \\ g_k(\tau) &= g_{kkkk}(\tau), \quad \lambda_k = \lambda_{kkkk}, \end{aligned}$$

$E^0_k = E_k - \lambda_k$.

### 5.2.5 Об области применимости теории возмущений. Связь с концепцией слабого предела

Оператор $\mathcal{P}$ осуществляет проекцию на подпространство (в пространстве операторов) медленных степеней свободы: как мы видим из (5.13), $\mathcal{P}\rho$ меняется медленно, если возмущение $H'$ мало. Обычно при выводе квантовых кинетических уравнений явно или неявно предполагается, что под действием свободной (невозмущённой) динамики, порождаемой гамильтонианом $H_0$, $\mathcal{Q}\rho$ стремится к

нулю: $e^{-iH_0t}\mathcal{Q}\rho e^{iH_0t} \to 0$ при $t \to \infty$ в некотором смысле. Установление точного математического смысла этого условия и его строгое доказательство остаётся открытым вопросом. Во вводной части этой главы было сказано о том, что кинетические уравнения в рамках теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда пока не выведены на математическом уровне строгости. Поскольку динамика унитарна и обратима, обсуждаемое условие не может быть выполнено в сильном смысле, можно говорить только о каком-то виде слабой сходимости. О взаимосвязи теории слабого предела и необратимости квантовых кинетических уравнений говорилось во введении к настоящей диссертационной работе.

В нашем случае это условие означает, что резервуар релаксирует к состоянию $\rho_\alpha$ при условии, что система находится в состоянии $|\alpha\rangle$ и внедиагональные элементы $\langle\alpha|\rho|\beta\rangle$, $\alpha \neq \beta$, распадаются под действием свободной динамики. Это быстрый релаксационный процесс.

Как мы видим из уравнения (5.14), гамильтониан возмущения $H'$ уводит $\mathcal{Q}\rho(t)$ от нуля. Малость возмущения относительно скорости стремления $\mathcal{Q}\rho(t)$ к нулю обеспечивает малость $\mathcal{Q}\rho(t)$ для сколь угодно больших времён. Это позволяет обрубить ряд теории возмущений (5.15) и оставить только первые один или два члена.

Часто в физической литературе говорят, что операторы $\mathcal{P}$ и $\mathcal{Q}$ проецируют на подпространства «интересных» и «неинтересных» (“relevant” и “irrelevant”) степеней свободы. Однако это не всегда бывает так: в нашем случае, например, $\mathcal{Q}\rho$ включает внедиагональные элементы $\langle\alpha|\rho|\beta\rangle$, $\alpha \neq \beta$, которые на самом деле интересны. С математической точки зрения предпочтительнее говорить о «медленных» и «быстрых» степенях свободы. Разделение между медленным масштабом времени, связанных с эволюцией под действием возмущения $H'$, и быстрой релаксационной динамики, порождаемой свободным гамильтонианом $H_0$, обеспечивает применимость теории возмущений. В разделе 5.5.3 мы обсудим это подробнее.

## 5.3 Динамика когерентностей

### 5.3.1 Случай равновесного начального состояния резервуара

Квантовое кинетическое уравнение описывает динамику «медленных» степеней свободы $\mathcal{P}\rho(t)$. В случае теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда это соответствует населённостям $p_n(t)$ и $p_k(t)$ соответственно. Однако формализм проекционных операторов Цванцига, в частности, формула (5.15) позволяет описать динамику также и «быстрых» степеней свободы. Проблема состоит в том, что $\mathcal{Q}\rho(t)$ содержит бесконечное число степеней свободы, так что выражение (5.15) невозможно вычислить непосредственно. Однако нам достаточно знания среднего значения от некоторого оператора $A$. Поскольку нам интересны когерентности, то в качестве оператора $A$ возьмём

$$A = |\alpha\rangle \langle\beta| , \quad \alpha \neq \beta. \tag{5.37}$$

Обозначим $A(t) = e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t}$, тогда

$$\operatorname{Tr} A(t)\rho(t) = \langle\beta| \operatorname{Tr}_B \rho^{(\mathrm{S})}(t)|\alpha\rangle = \sigma_{\beta\alpha}(t),$$

где мы обозначили $\sigma(t) = \operatorname{Tr}_B \rho^{(\mathrm{S})}(t)$ оператор плотности системы в представлении Шрёдингера, который нас и интересует.

В этом подразделе мы рассмотрим случай $\mathcal{Q}\rho(0) = 0$, т.е. случай равновесного начального состояния резервуара, см. (5.23) и обсуждение после формулы (5.24). Имеем

$$\sigma_{\beta\alpha}(t) = \operatorname{Tr} A(t)\mathcal{P}\rho(t) + \operatorname{Tr} A(t)\mathcal{Q}\rho(t) = \tag{5.38}$$

$$= -i \int_0^t d\tau \operatorname{Tr} A(t)\mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau) = -i \int_0^t d\tau \operatorname{Tr} A(t)\mathcal{L}(t-\tau)\mathcal{P}\rho(t-\tau), \tag{5.39}$$

где мы использовали приближение первого порядка для $\mathcal{Q}\rho(t)$, т.е. формулу (5.17), и $\operatorname{Tr} A\mathcal{P}\rho = \langle\beta|\mathcal{P}\rho|\alpha\rangle = 0$. Для других выборов наблюдаемой $A$ (отличных от (5.37)), член $\operatorname{Tr} A\mathcal{P}\rho$ может быть ненулевым. Но его можно считать известным, поскольку $\mathcal{P}\rho(t)$ известно из решения кинетического уравнения (5.21) или, более общо, (5.18) или (5.19).

Мы предполагаем, что справедливо приближение Борна–Маркова, которое позволило перейти от уравнения (5.18) к уравнению (5.19). Тогда, как и при выводе кинетического уравнения для $\mathcal{P}\rho(t)$, зависимость члена $A(t)\mathcal{L}(t-\tau)$ от $\tau$ в (5.39) отражает быстрые релаксационные процессы в резервуаре, тогда как $\mathcal{P}\rho(t-\tau)$ эволюционирует медленнее. Поэтому мы снова можем заменить $\mathcal{P}\rho(t-\tau)$ на $\mathcal{P}\rho(t)$:

$$\sigma_{\beta\alpha}(t) = -i\int\limits_0^t d\tau\,\mathrm{Tr}\,A(t)\mathcal{L}(t-\tau)\mathcal{P}\rho(t) = -i\int\limits_0^t d\tau\,\mathrm{Tr}\,A(\tau)\mathcal{L}\mathcal{P}\rho(t) =$$

$$= ip_\beta(t)\int\limits_0^t d\tau\ \mathrm{Tr}\{e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta\tau}\rho_\beta H'_{\beta\alpha}\} - ip_\alpha(t)\int\limits_0^t d\tau\ \mathrm{Tr}\{e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta\tau}H'_{\beta\alpha}\rho_\alpha\}. \tag{5.40}$$

Поскольку $p_\alpha(t)$ и $p_\beta(t)$ известны как решения кинетического уравнения, формула (5.40) позволяет вычислить динамику когерентностей.

**Замечание 5.2.** Отметим, что, в отличие от (5.19), здесь мы не заменяем верхний предел интегрирования на бесконечность. Это приближение хорошо работает для больших $t$, но вносит существенную ошибку для малых и, иногда, промежуточных $t$. В самом деле, из формулы (5.40) мы видим, что $\sigma_{\beta\alpha}(0) = 0$, и это находится в согласии с начальным условием $\mathcal{Q}\rho(0) = 0$. Однако замена верхнего предела интегрирования на бесконечность дала бы $\sigma_{\beta\alpha}(0) \neq 0$. В отличие от этого, замена верхнего предела интегрирования на бесконечность в (5.18) порождает ошибку в производной по времени от $\mathcal{P}\rho(t)$, но не в $\mathcal{P}\rho(t)$ напрямую. Поскольку $\mathcal{P}\rho(t)$ эволюционирует медленно, ошибка в производной $\mathcal{P}\dot{\rho}(t)$ для малых $t$ не производит существенную ошибку в $\mathcal{P}\rho(t)$. Иными словами, на малых временах когерентности эволюционируют быстрее населённостей. Также можно отметить, что обсуждаемая ошибка имеет второй порядок малости (относительно $H'$) для $\mathcal{P}\dot{\rho}(t)$, но только первый порядок малости для $\sigma_{\beta\alpha}(t)$.

Для больших времён $t$ значения интегралов (5.40) выходят на постоянные значения, равные соответствующим интегралам с бесконечным верхним пределом интегрирования. Тогда динамика когерентностей полностью управляется динамикой населённостей:

$$\sigma_{\beta\alpha}(t) = c_{\beta\alpha} p_\beta(t) - d_{\beta\alpha} p_\alpha(t), \tag{5.41}$$

где

$$\begin{aligned} c_{\beta\alpha} &= i \int_0^\infty d\tau \ \mathrm{Tr}\{e^{iH_\alpha \tau} e^{-iH_\beta \tau} \rho_\beta H'_{\beta\alpha}\}, \\ d_{\beta\alpha} &= i \int_0^\infty d\tau \ \mathrm{Tr}\{e^{iH_\alpha \tau} e^{-iH_\beta \tau} H'_{\beta\alpha} \rho_\alpha\}. \end{aligned} \tag{5.42}$$

Однако, как мы увидим в разделе 5.5.1, когерентности могут осциллировать вокруг средних значений (5.41) длительное время, сравнимое с характерным временем переноса энергии. Для описания этих осцилляций необходимо пользоваться более общей формулой (5.40).

Из (5.41) мы видим, что когерентности стремятся не к нулю с течением времени (как в упомянутом во введении феноменологическом подходе [190]), а к некоторым ненулевым постоянным значениям, зависящим от стационарных населённостей. Распад когерентностей под действием свободной (невозмущённой) динамики, порождаемой гамильтонианом $H_0$, компенсируется их «накачкой» от населённостей посредством $H'$. Пренебрежение этой накачкой может приводить к существенному искажению динамики когерентностей. С другой стороны, уравнения в [190] всегда сохраняют положительность, тогда как сохранение положительности оператора плотности в рамках нашего подхода при достаточно малых возмущениях $H'$ (т.е. в области применимости соответствующей теории возмущений) — открытый вопрос, см. ниже раздел 5.5.1.

Применим теперь общую формулу (5.40) к теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда. В первом случае имеем $A = |n\rangle\langle m|$ и при помощи метода разложения по кумулянтам получаем

$$\sigma_{mn}(t) = i p_m(t) J_{mn} \int_0^t d\tau \ A_n^*(\tau) F_m(\tau) - i p_n(t) J_{mn} \int_0^t d\tau \ F_n^*(\tau) A_m(\tau). \tag{5.43}$$

В модифицированной теории Редфилда $A = |k\rangle\langle k'|$, имеем

$$\sigma_{k'k}(t) = -p_{k'}(t)\int\limits_0^t d\tau\, A_k^*(\tau)F_{k'}(\tau)N_{kk'}^{(2)}(\tau)^* - p_k(t)\int\limits_0^t d\tau\, F_k^*(\tau)A_{k'}(\tau)N_{k'k}^{(2)}(\tau). \tag{5.44}$$

### 5.3.2 Случай неравновесного начального состояния резервуара

Обобщим теперь результаты на случай неравновесного начального состояния резервуара. Пусть начальное состояние системы и резервуара имеет вид (5.24), т.е. пока всё ещё рассматриваем случай отсутствия начальных когерентностей. Тогда

$$\mathcal{Q}\rho(0) = \sum_\alpha p_\alpha(0)\,|\alpha\rangle\langle\alpha| \otimes (\rho_g - \rho_\alpha) \neq 0$$

и приближение первого порядка для (5.15) (относительно $\mathcal{L}(t)$) имеет вид

$$\mathcal{Q}\rho(t) = \mathcal{Q}\rho(0) - i\int\limits_0^t d\tau\mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau) - i\int\limits_0^t d\tau\mathcal{Q}\mathcal{L}(\tau)\mathcal{Q}\rho(0). \tag{5.45}$$

Подстановка (5.45) в (5.38) даёт

$$\sigma_{\beta\alpha}(t) = -i\int\limits_0^t d\tau\,\mathrm{Tr}\,A(\tau)\mathcal{L}\mathcal{P}\rho(t) - i\int\limits_0^t d\tau\,\mathrm{Tr}\,A(t)\mathcal{L}(t-\tau)\mathcal{Q}\rho(0) \tag{5.46}$$

Первое слагаемое уже вычислено в (5.40). Рассмотрим второе слагаемое:

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\,A(t)\mathcal{L}(t-\tau)\mathcal{Q}\rho(0) &= \mathrm{Tr}\,A(\tau)\mathcal{L}[e^{-iH_0(t-\tau)}\mathcal{Q}\rho(0)e^{iH_0(t-\tau)}] = \\ &= p_\alpha(0)\,\mathrm{Tr}\,e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta\tau}H'_{\beta\alpha}[\rho_g^\alpha(t-\tau) - \rho_\alpha] - \\ &- p_\beta(0)\,\mathrm{Tr}\,e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta\tau}[\rho_g^\beta(t-\tau) - \rho_\beta]H'_{\beta\alpha},\end{aligned} \tag{5.47}$$

где $\rho_g^\alpha(t) = e^{-iH_\alpha t}\rho_g e^{iH_\alpha t}$. То есть $\sigma_{\beta\alpha}(t)$ имеет вид

$$\sigma_{\beta\alpha}(t) = \sigma_{\beta\alpha}^{\mathrm{eq}}(t) + \sigma_{\beta\alpha}^{\mathrm{noneq}}(t), \tag{5.48}$$

где $\sigma_{\beta\alpha}^{\mathrm{eq}}(t)$ — выражение для случая равновесного начального состояния резервуара, вычисляемое по формуле (5.40), а $\sigma_{\beta\alpha}^{\mathrm{noneq}}(t)$ — поправка на неравновесность

начального состояния резервуара:

$$\begin{aligned}\sigma_{\beta\alpha}^{\mathrm{noneq}}(t) = ip_\alpha(0)\int\limits_0^t d\tau\ \mathrm{Tr}\, e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta\tau}H'_{\beta\alpha}\rho_\alpha - \\ - ip_\beta(0)\int\limits_0^t d\tau\ \mathrm{Tr}\, e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta\tau}\rho_\beta H'_{\beta\alpha} - \\ - ip_\alpha(0)\int\limits_0^t d\tau\ \mathrm{Tr}\, e^{iH_\alpha t}e^{-iH_\beta\tau}H'_{\beta\alpha}e^{-iH_\alpha(t-\tau)}\rho_g + \\ + ip_\beta(0)\int\limits_0^t d\tau\ \mathrm{Tr}\, e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta t}\rho_g e^{iH_\beta(t-\tau)}H'_{\beta\alpha}.\end{aligned} \tag{5.49}$$

Эта поправка существенно отличается от нуля только на коротких временах релаксации резервуара. Поскольку населённости эволюционируют медленнее, в (5.49) можно заменить $p_\alpha(0)$ и $p_\beta(0)$ на $p_\alpha(t)$ и $p_\beta(t)$ и получить

$$\begin{aligned}\sigma_{\beta\alpha}(t) = ip_\beta(t)\int\limits_0^t d\tau\ \mathrm{Tr}\, e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta t}\rho_g e^{iH_\beta(t-\tau)}H'_{\beta\alpha} \\ - ip_\alpha(t)\int\limits_0^t d\tau\ \mathrm{Tr}\, e^{iH_\alpha t}e^{-iH_\beta\tau}H'_{\beta\alpha}e^{-iH_\alpha(t-\tau)}\rho_g.\end{aligned} \tag{5.50}$$

Однако такая замена приводит хоть и к малым, но визуально заметным ошибкам, поэтому мы будем использовать более точные формулы (5.48)–(5.49).

**Замечание 5.3.** Подстановка (5.45) в (5.13) приводит к уравнению для диагональных элементов (5.19) с неравеновесными поправками, вычисленными в [284]. Здесь для простоты мы считаем, что резервуар релаксирует много быстрее, нежели диагональные элементы успевают проэволюционировать, так что эта поправка пренебрежимо мала и населённости с высокой точностью описываются кинетическим уравнением (5.21)–(5.22).

Но даже в этом случае неравновесная поправка к когерентностям (5.49) может быть существенна, потому что на малых временах когерентности эволюционируют быстрее населённостей, как мы отметили в замечании 5.2. Отметим

также, что обобщение теории Фёрстера на неравновесный случай впервые было предложено в [197], но компактные выражения, использующие функцию спектральной линии $g_n(t)$, были получены в [284].

Следы от выражений с $\rho_g$, входящих в (5.49) и (5.50) для обеих рассматриваемых теорий были вычислены в [284]. В случае теории Фёрстера выражение (5.49) принимает вид

$$\begin{aligned}\sigma_{mn}^{\mathrm{noneq}}(t) = ip_m(0)J_{mn}\int\limits_0^t d\tau\, A_n^*(\tau)[F_m(\tau,t) - F_m(\tau)] \\ - ip_n(0)J_{mn}\int\limits_0^t d\tau\,[F_n(\tau,t) - F_n(\tau)]^* A_m(\tau),\end{aligned} \tag{5.51}$$

где

$$F_m(\tau,t) = \exp\{-i(\varepsilon_m^0 + \lambda_m)\tau - g_m^*(\tau) - 2i\,\mathrm{Im}[g_m(t) - g_m(t-\tau)]\}. \tag{5.52}$$

Отметим, что $F_m(\tau,t)$ можно заменить на $F_m(\tau)$ в (5.51) для больших $t$, поскольку $\lim_{\tau\to\infty}\dot{g}_m(\tau) = -\lambda_m$ [323], а подынтегральные выражения существенно отличны от нуля только для малых $\tau$. Т.е. поправки на неравновесность начального состояния резервуара, как и следовало ожидать, исчезают при больших временах.

Для модифицированной теории Редфилда выражение (5.49) принимает вид

$$\begin{aligned}\sigma_{k'k}^{\mathrm{noneq}}(t) = -\,p_{k'}(0)\int\limits_0^t d\tau A_k^*(\tau)\left[F_{k'}(\tau,t)N_{kk'}^{(2)}(\tau,t)^* - F_{k'}(\tau)N_{kk'}^{(2)}(\tau)^*\right] - \\ - p_k(0)\int\limits_0^t d\tau\left[F_k(\tau,t)^* N_{k'k}^{(2)}(\tau,t) - F_k(\tau)^* N_{k'k}^{(2)}(\tau)\right] A_{k'}(\tau),\end{aligned} \tag{5.53}$$

где

$$F_k(\tau,t) = \exp\{-i(\varepsilon_k^0 + \lambda_k)\tau - g_k^*(\tau) - 2i\,\mathrm{Im}[g_k(t) - g_k(t-\tau)]\},$$

$$\begin{aligned}N_{kk'}^{(2)}(\tau,t) = [\dot{g}_{kk'kk}(\tau) - \dot{g}_{kk'k'k'}(\tau) + 2i(\mathrm{Im}\,\dot{g})_{kk'k'k'}(t-\tau)]\times \\ \times\exp\{2g_{kkk'k'}(\tau) - 2i\,\mathrm{Im}[g_{kkk'k'}(t) - g_{kkk'k'}(t-\tau)]\},\end{aligned}$$

$$(\operatorname{Im}\dot{g})_{kk'k'k'}(t) = \sum_{n=1}^{N} a_{kk'}(n)a_{k'k'}(n)\operatorname{Im}\dot{g}_n(t).$$

Отметим, что $(\operatorname{Im}\dot{g})_{kk'k'k'}(t) = \operatorname{Im}\dot{g}_{kk'k'k'}(t)$, если $a_{kk'}(n)$ вещественны для всех $n$.

### 5.3.3 Случай начальных когерентностей в системе

Наконец, в этом подразделе мы рассмотрим случай, когда в начальный момент времени в системе могут присутствовать когерентности. Мы рассмотрим начальное состояние вида

$$\rho(0) = \sigma(0) \otimes \rho_g, \tag{5.54}$$

где $\sigma(0)$ — произвольный оператор плотности в $\mathbb{C}^N$. Выделим в $\mathcal{Q}\rho(0)$ диагональную и внедиагональную части:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}\rho(0) &= \mathcal{Q}\rho(0)^{\text{diag}} + \mathcal{Q}\rho(0)^{\text{off-diag}}, \\ \mathcal{Q}\rho(0)^{\text{diag}} &= \sum_{\alpha} p_\alpha(0)\,|\alpha\rangle\langle\alpha| \otimes (\rho_g - \rho_\alpha), \\ \mathcal{Q}\rho(0)^{\text{off-diag}} &= \sum_{\beta\neq\alpha} \sigma_{\beta\alpha}(0)\,|\beta\rangle\langle\alpha| \otimes \rho_g. \end{aligned} \tag{5.55}$$

И в уравнении (5.13), и в выражении (5.38) играет роль только внедиагональная часть $\mathcal{Q}\rho(t)$. Имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}\rho(t)^{\text{off-diag}} &= \mathcal{Q}\rho(0)^{\text{off-diag}} - i\int_0^t d\tau\mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau) - i\int_0^t d\tau\mathcal{L}(\tau)\mathcal{Q}\rho(0)^{\text{diag}} - \\ &- i\int_0^t d\tau\left[\mathcal{L}(\tau)\mathcal{Q}\rho(0)^{\text{off-diag}}\right]^{\text{off-diag}}, \end{aligned} \tag{5.56}$$

где последняя верхняя надпись “off-diag” означает, что у выражения в квадратных скобках берётся только внедиагональная часть. Заметим, что вклад от $\mathcal{Q}\rho(0)^{\text{diag}}$ (третьего слагаемого правой части (5.56)) уже учтено в предыдущем подразделе. Поэтому здесь мы рассмотрим вклад от внедиагональной части $\mathcal{Q}\rho(0)^{\text{off-diag}}$.

Во-первых, начальная когерентность изменяет динамику населённостей на малых временах. Как мы видели ранее, подстановка третьего слагаемого правой части (5.56) в (5.13) даёт поправку в динамику населённостей, связанную с неравновесным начальным состоянием резервуара. Этим эффектом мы пренебрегаем. Влияние последнего слагаемого в (5.56) на динамику населённостей также, в принципе, может быть вычислено, но, как показывают наши численные расчёты, это даёт также пренебрежимо малую поправку к динамике населённостей (они очень точно рассчитываются и без неё), поэтому вкладом этого слагаемого мы также пренебрежём. Но вкладом этого слагаемого в динамику когерентностей уже нельзя пренебречь, и это будет рассмотрено чуть далее в этом подразделе. Итак, остаются первые два слагаемых правой части (5.56). Их подстановка в (5.13) приводит к уравнению (5.19) со следующим дополнительным слагаемым в правой части:

$$-i\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}\rho(0)^{\text{off-diag}} = 2\,\mathrm{Im}\sum_{\alpha<\beta}\sigma_{\alpha\beta}(0)\,\mathrm{Tr}\{H'_{\beta\alpha}(t)\rho_g\}(|\beta\rangle\langle\beta|\,\rho_\beta - |\alpha\rangle\langle\alpha|\,\rho_\alpha),$$

где

$$H'_{\beta\alpha}(t) = e^{iH_\beta t}H'_{\beta\alpha}e^{-iH_\alpha t}.$$

Соответственно, кинетическое уравнение (5.21) также модифицируется, приобретая неоднородный член:

$$\dot{p}_\alpha(t) = \sum_{\beta\neq\alpha}\big(K_{\alpha\beta}p_\beta(t) - K_{\beta\alpha}p_\alpha(t) - 2\,\mathrm{Im}\{\sigma_{\alpha\beta}(0)\,\mathrm{Tr}[H'_{\beta\alpha}(t)\rho_g]\}\big), \tag{5.57}$$

Рассмотрим теперь влияние начальных когерентностей на их дальнейшую динамику. Подстановка (5.56) в (5.38) приводит к выражению $\sigma_{\beta\alpha}(t)$ в виде суммы трёх членов:

$$\sigma_{\beta\alpha}(t) = \sigma^{\text{eq}}_{\beta\alpha}(t) + \sigma^{\text{noneq}}_{\beta\alpha}(t) + \sigma^{\text{init}}_{\beta\alpha}(t), \tag{5.58}$$

где базовый член $\sigma^{\text{eq}}_{\beta\alpha}(t)$ задаётся формулой (5.40), поправка на неравновесность начального состояния резервуара $\sigma^{\text{noneq}}_{\beta\alpha}(t)$ даётся формулой (5.49) и, наконец,

новый член (поправка на начальную когерентность) $\sigma^{\rm init}_{\beta\alpha}(t)$ даётся формулой

$$\begin{aligned}\sigma^{\rm init}_{\beta\alpha}(t) &= \mathrm{Tr}\, A(t)\mathcal{Q}\rho(0)^{\text{off-diag}} - i\int\limits_0^t d\tau\, \mathrm{Tr}\, A(t)\mathcal{L}(t-\tau)\mathcal{Q}\rho(0)^{\text{off-diag}} = \\ &= \sigma_{\beta\alpha}(0)\,\mathrm{Tr}\{e^{iH_\alpha t}e^{-iH_\beta t}\rho_g\} + \\ &+ i\sum_{\gamma\neq\alpha,\beta}\sigma_{\beta\gamma}(0)\int\limits_0^t d\tau\,\mathrm{Tr}\{e^{iH_\gamma(t-\tau)}H'_{\gamma\alpha}e^{iH_\alpha\tau}e^{-iH_\beta t}\rho_g\} - \\ &- i\sum_{\gamma\neq\alpha,\beta}\sigma_{\gamma\alpha}(0)\int\limits_0^t d\tau\,\mathrm{Tr}\{e^{iH_\alpha t}e^{-iH_\beta\tau}H'_{\beta\gamma}e^{-iH_\gamma(t-\tau)}\rho_g\}. \end{aligned} \tag{5.59}$$

Применим теперь общие формулы (5.57) и (5.59) к нашим теориям. В теории Фёрстера следы по резервуару легко вычисляются, что приводит к

$$\dot p_n(t) = \sum_{m\neq n}\left(K_{nm}p_m(t) - K_{mn}p_n(t) - 2\,\mathrm{Im}\{\sigma_{nm}(0)J_{mn}A_n(t)A^*_m(t)\}\right) \tag{5.60}$$

и

$$\begin{aligned}\sigma^{\rm init}_{mn}(t) = \sigma_{mn}(0)A^*_n(t)A_m(t) + i\sum_{l\neq n,m}\int\limits_0^t d\tau\,\{&\sigma_{ml}(0)J_{ln}A^*_n(\tau)A_m(t)A^*_l(t-\tau) - \\ &-\sigma_{ln}(0)J_{ml}A^*_n(t)A_m(\tau)A_l(t-\tau)\}.\end{aligned} \tag{5.61}$$

В модифицированной теории Редфилда след в (5.57) — это частный случай следов, вычисленных в работе [284], а след в (5.59) также можно вычислить, следуя методу этой работы. В результате мы получим

$$\begin{aligned}\dot p_k(t) = \sum_{k'\neq k}\big(&K_{kk'}p_{k'}(t) - K_{k'k}p_k(t) + \\ &+ 2\,\mathrm{Re}\left\{\sigma_{kk'}(0)A_k(t)A^*_{k'}(t)\exp\{2\,\mathrm{Re}\,g_{kkk'k'}(t)\}[\dot g_{k'kkk}(t) - \dot g^*_{kk'k'k'}(t)]\right\}\big)\end{aligned} \tag{5.62}$$

и

$$\sigma^{\mathrm{init}}_{k'k}(t) = \sigma_{k'k}(0)A^*_k(t)A_{k'}(t)\exp\{2\,\mathrm{Re}\,g_{kkk'k'}(t)\} + \\ + \sum_{k''\neq k,k'}\int\limits_0^t d\tau\{\sigma_{k''k}(0)A^*_k(t)A_{k'}(\tau)A_{k''}(t-\tau)N^{(\mathrm{init})}_{kk'k''}(\tau,t) + \\ + \sigma_{k'k''}(0)A^*_k(\tau)A_{k'}(t)A^*_{k''}(t-\tau)N^{(\mathrm{init})}_{k'kk''}(\tau,t)^*\}, \quad (5.63)$$

где

$$N^{(\mathrm{init})}_{kk'k''}(\tau,t) = \exp\{g^*_{kkk'k'}(t) - g^*_{kkk'k'}(t-\tau) + g_{kkk'k'}(\tau)\}\times \\ \times\exp\{g_{k'k'k''k''}(t-\tau) - g_{k'k'k''k''}(t) + g_{k'k'k''k''}(\tau)\}\times \\ \times\exp\{g_{kkk''k''}(t) + g^*_{kkk''k''}(t-\tau) - g_{kkk''k''}(\tau)\}\times \\ \times[\dot g_{kkk'k''}(\tau) - \dot g_{k'k'k'k''}(\tau) + \dot g^*_{kkk''k'}(t-\tau) - \dot g_{k'k''k''k''}(t-\tau)].$$

**Замечание 5.4.** Можно задать вопрос о согласованности наших формул между собой. Допустим, $\mathcal{Q}\rho(0) = 0$. В некоторый момент времени $t_0 > 0$ когерентности отличны от нуля и вычисляются по формуле (5.40). Если мы применим вычисления этого подраздела, взяв $t_0$ в качестве начального момента времени, воспроизведём ли мы формулы (5.21), (5.22) и (5.40) для произвольного момента $t > t_0$? Отвечая на этот вопрос, необходимо заметить, что $\rho(t_0)$ отличается от состояния вида (5.54). А именно,

$$\mathcal{Q}\rho(t_0) = -i\int\limits_0^{t_0} d\tau\mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau) = \sum_{\alpha\neq\beta}|\beta\rangle\langle\beta|\mathcal{Q}\rho(t)|\alpha\rangle\langle\alpha|, \\ \langle\beta|\mathcal{Q}\rho(t)|\alpha\rangle = i\int\limits_0^t d\tau\{p_\beta(t)\rho_\beta e^{iH_\beta(t-\tau)}H'_{\beta\alpha}e^{-iH_\alpha(t-\tau)} - \\ - p_\alpha(t)e^{iH_\beta(t-\tau)}H'_{\beta\alpha}e^{-iH_\alpha(t-\tau)}\rho_\alpha\}. \quad (5.64)$$

Поэтому вычисления этого подраздела должны быть модифицированы для данного $\mathcal{Q}\rho(t_0)$. Если мы сделаем это, то, поскольку $\mathcal{Q}\rho(t)$ можно представить двумя способами как

$$\mathcal{Q}\rho(t) = -i\int\limits_0^{t_0} d\tau\,\mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau) - i\int\limits_{t_0}^t d\tau\,\mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau) = -i\int\limits_0^t d\tau\,\mathcal{L}(\tau)\mathcal{P}\rho(\tau),$$

мы воспроизведём формулы (5.21), (5.22) и (5.40) в первом порядке теории возмущений. Неформально говоря, когерентности и состояние резервуара в состоянии (5.64) не произвольны, а в ходе динамики подстроены друг под друга специальным образом.

**Замечание 5.5.** Формулы (5.62) и (5.63) для модифицированной теории Редфилда следует применять с осторожностью. Здесь мы снова сталкиваемся с тем, что теория пока не имеет математически строгого обоснования, поэтому приходится довольствоваться эвристическими соображениями. Как мы отметили в разделе 5.2.5, наша теория возмущений основывается на предположении, что $\mathcal{Q}\rho(t)$ мало для всех времён за исключением, быть может, короткого начального промежутка времени. Приближение первой хронологической экспоненты в (5.15) (которое описывает влияние $\mathcal{Q}\rho(0)$) конечным числом членов, чем мы воспользовались в (5.56), справедливо только для малых времён. Если каждый член этой хронологической экспоненты существенно отличен от нуля только на малом промежутке времени (иными словами, если $\mathcal{Q}\rho(t)$ быстро стремится к нулю под действием свободной динамики), мы можем оставить в ней конечное число членов. В противном же случае мы не можем пользоваться этим приближением на больших временах.

Поскольку $\operatorname{Re} g_n(t)$ неограниченно растёт при $t \to \infty$, члены вида $A_n(t)A_m^*(t)$ в (5.60) и (5.61), или $A_k(t)A_{k'}^*(t)$ в (5.62) и (5.63) стремятся к нулю на больших временах. Поэтому мы можем использовать формулы (5.60) и (5.61) в рамках теории Фёрстера. Однако в формуле (5.62) член $A_k(t)A_{k'}^*(t) \sim e^{-\operatorname{Re}[g_k(t)+g_{k'}(t)]}$ умножается на экспоненту $e^{2\operatorname{Re} g_{kkk'k'}(t)}$. Поэтому, если величина

$$a_{kk}(n)^2 + a_{k'k'}(n)^2 - 2a_{kk}(n)a_{k'k'}(n) = \left(|\langle k|n\rangle|^2 - |\langle k'|n\rangle|^2\right)^2 \tag{5.65}$$

мала или, тем более, равна нулю для всех $n$, то последний член в (5.62) убывает медленно или не убывает вовсе. Это приводит к нереалистичному эффекту неубывающих или медленно убывающих осцилляций. Та же самая ситуация имеет место в формуле (5.63). Напомним, что величины $a_{kk'}(n)$ определены сразу после (5.33).

Отметим, что подынтегральное выражение в (5.34) также содержит такой неубывающий или медленно убывающий множитель. Однако он умножается либо на убывающий множитель $\ddot{g}(t)$ (индексы опущены), либо на члены более высокого порядка (относительно $\lambda$), пропорциональные $\dot{g}(t)^2$, которые уменьшают амплитуду этих ложных осцилляций. Интегрирование в (5.34) также уменьшает эффект от них. По этой причин модифицированная теория Редфилда без начальных когерентностей по-прежнему работает, но, вообще говоря, в немарковской версии, где верхний предел интегрирования в (5.34) равен $t$ (см. переход от (5.18) к (5.19)).

Малость величины (5.65) означает, что проекции возмущений отдельных молекул $|n\rangle$ на два различных экситона $|k\rangle$ и $|k'\rangle$ приблизительно равны по абсолютному значению. Величина (5.65) может быть мала для всех $n$, если экситоны в высокой степени делокализованные. Например, это может произойти в случае, когда энергии возбуждения отдельных молекул (с учётом энергий реорганизации) $\varepsilon_n^0 + \lambda_n$ совпадают или почти совпадают.

Данное ограничение является не техническим, а фундаментальным для модифицированной теории Редфилда: она справедлива, если $\mathcal{Q}\rho(0)$ мало или $\mathcal{Q}\rho(t)$ быстро убывает. То же верно также и для теории Фёрстера, но условие быстрого убывание $\mathcal{Q}\rho(t)$ там обычно выполнено (см. раздел 5.5.3 далее). Это условие выполнено и для модифицированной теории Редфилда, если экситонные состояния в высокой степени локализованные, так что величины (5.65) достаточно велики. С одной стороны, это ограничение некритично, поскольку в случае высокой степени делокализации экситонов применимость модифицированной теории Редфилда влечёт и применимость стандартной теории Редфилда (см. конец раздела 5.5.3). Иными словами, в этом случае, даже если $\mathcal{Q}\rho(0) = 0$, модифицированная теория Редфилда не намного лучше стандартной, которая не имеет ограничений на начальное состояние электронных степеней свободы. Поэтому в этом случае мы просто можем воспользоваться стандартной теорией Редфилда. С другой стороны, это ограничение сужает способность модифицированной теории Редфилда служить своего рода интерполяцией между различными режи-

мами переноса энергии возбуждения, т.е. теории, которая призвана приемлемо работать для различных режимов (значений параметров).

Это замечание можно сравнить с обсуждением ограничений модифицированной теории Редфилда в работах [253–255]. В них говорится о том, что в случае высокой степени делокализации экситонов пренебрежение когерентностями или переоценка скорости их распада, как в феноменологическом подходе [190], приводит к нереалистично высоким скоростям переноса энергии между молекулами. Здесь мы замечаем, что использование формулы (5.63) для когерентности приводит, напротив, к недооценке скорости декогеренции и, следовательно, к недооценке скорости переноса. В следующем разделе мы рассмотрим пример, иллюстрирующий это ограничение, см. рисунок 5.9.

## 5.4 Вычисления

Для проверки выведенных формул сравним вычисления когерентностей по ним с вычислениями согласно точному (но алгоритмически затратному и потому непригодному для больших систем) методу цепочки уравнений движения (“hierarchical equations of motion” — HEOM) [193].

Мы предполагаем, что для всех молекул спектральная плотность (5.4) имеет вид Друде–Лоренца:

$$\mathscr{J}(\omega) = \frac{2\lambda}{\pi}\frac{\omega\gamma}{\omega^2+\gamma^2}, \tag{5.66}$$

где $\lambda$ и $\gamma$ — энергия реорганизации и частота Дебая, одинаковые для всех молекул. Энергия реорганизации характеризует силу взаимодействия электронных и фононных степеней свободы, а частота Дебая характеризует временной масштаб флуктуаций эффективной энергии возбуждения электронов из-за взаимодействия с фононами и диссипацию энергии реорганизации фононов.

Отметим, что энергия реорганизации $\lambda$ как параметр спектральной плотности находится в согласии с определением энергии реорганизации в гамильтониане (5.1). В самом деле, если воспользоваться определением спектральной

плотности (5.4), то энергию реорганизации можно выразить как

$$\lambda_n = \int\limits_0^\infty \frac{d\omega}{\omega}\, \mathscr{J}_n(\omega).$$

Если вычислить этот интеграл для спектральной плотности (5.66), то получим $\lambda_n = \lambda$.

Также для простоты мы предполагаем, что температура резервуара достаточно высока, так что $\beta\gamma \ll 1$, где $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$ — обратная температура резервуара, $T$ — собственно температура, а $k_{\mathrm{B}}$ — постоянная Больцмана. Тогда $\mathrm{cth}(\beta\omega/2)$ в (5.5) можно заменить на $2/(\beta\omega)$ и функция спектральной линии для каждой молекулы приобретает вид:

$$g(t) = \frac{\lambda}{\gamma}\left(\frac{2}{\beta\gamma} - i\right)\left(e^{-\gamma t} + \gamma t - 1\right). \tag{5.67}$$

Во всех примерах $T = 300$ K (т.е. комнатная, или физиологическая температура) и $\gamma^{-1} = 100$ фс ($\gamma \approx 53.08$ см$^{-1}$). Тогда $\beta\gamma \approx 0.24$.

**Замечание 5.6.** Поясним здесь единицы измерения. Мы рассматриваем значения параметров, близкие к реалистичным параметрам биологических систем, ориентируясь на статью [193]. Как и в этой статье, время мы будем измерять в фемтосекундах. Соответственно, частота $\gamma$ измеряется в обратных единицах, т.е. фс$^{-1}$. Электромагнитная волна в вакууме частоты $\gamma$ будет иметь длину волны, равную $2\pi c/\gamma$, где $c = 3 \cdot 10^8$ м/с $= 3 \cdot 10^{-5}$ см/фс — скорость света в вакууме. По этой формуле единицы, измеряемые в фемтосекундах, можно переводить в единицы, измеряемые в сантиметрах: соответствующую величину надо умножить на $2\pi c$, где $c$ выражено в см/фс.

Далее, частота связана с энергией формулой Планка $E = \hbar\omega$, где $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с. Поэтому единицы энергии можно выражать в единицах фс$^{-1}$ (поделив на постоянную Планка в соответствующих единицах) и, следовательно, в единицах см$^{-1}$.

Выражение энергии в единицах длины волны удобно при описании оптических экспериментов, связанных с поглощением и испусканием фотонов. Так,

например, энергия $2 \cdot 10^4$ см$^{-1}$ соответствует поглощению или испусканию фотона с длиной волны $(2 \cdot 10^4)^{-1} = 5 \cdot 10^{-5}$ см $= 500$ нм.

В подразделах 5.4.1–5.4.3 рассматривается случай димера (на языке квантовой информатики — кубита): $N = 2$. Во всех примерах, кроме последнего примера подраздела 5.4.2, $\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = 100$ см$^{-1}$. Поскольку $J_{12}$ — это единственная дипольная связь в этом случае (с точностью до комплексно сопряжённой $J_{21}$), мы будем её обозначать её просто $J$. Параметры $J$ и $\lambda$ будут варьироваться. В последнем подразделе 5.4.4 мы рассмотрим случай тримера (кутрита) $N = 3$.

Нам необходимо будет различать матричные элементы в локальном базисе (базисе возмущений отдельных молекул) $\sigma_{mn}$ и в экситонном базисе (собственном базисе гамильтониана системы) $\sigma_{k'k}$, когда индексы — это конкретные числа. Для этого мы примем следующее соглашение: матричные элементы в локальном базисе будем обозначать $\sigma_{mn}$, а в экситонном — $\sigma_{k'k}^{\mathrm{ex}}$. Это же правило действует и в отношении дираковских обозначений векторов и равновесных состояний резервуара: $|k\rangle$ и $\rho_k$ переобозначим как, соответственно, $|k\rangle_{\mathrm{ex}}$ и $\rho_k^{\mathrm{ex}}$. Как принято в физической литературе, элементы матрицы плотности в локальном базисе мы будем называть локальными или электронными населённостями и когерентностями, в экситонном базисе — экситонными.

### 5.4.1 Теория Фёрстера

Рассмотрим параметры $J = 10$ см$^{-1}$ и $\lambda = 100$ см$^{-1}$ и начальное состояние

$$\rho(0) = |1\rangle \langle 1| \otimes \rho_g \tag{5.68}$$

(частный случай состояния вида (5.24)). Результаты вычисления электронной когерентности $\sigma_{21}(t)$ в рамках теории Фёрстера по выведенной формуле (5.43) с поправкой на неравновесность начального состояния резервуара (5.51) и без неё в сравнении с точной цепочкой уравнений представлен на рисунке 5.1. Мы видим превосходное совпадение, если учитывается поправка на неравновесность. Вычисление без поправки на неравновесность даёт тот же результат для больших времён, но не описывает правильно динамику на малых временах.

Сравним вычисления по формуле (5.43) без поправок на неравновесность с точной цепочкой уравнений для случая равновесного начального состояния резервуара:

$$\rho(0) = |1\rangle\langle 1| \otimes \rho_1 \tag{5.69}$$

(частный случай состояния вида (5.23)), см. рисунок 5.2. Мы снова видим превосходное соответствие. Рассмотренные параметры соответствуют случаю

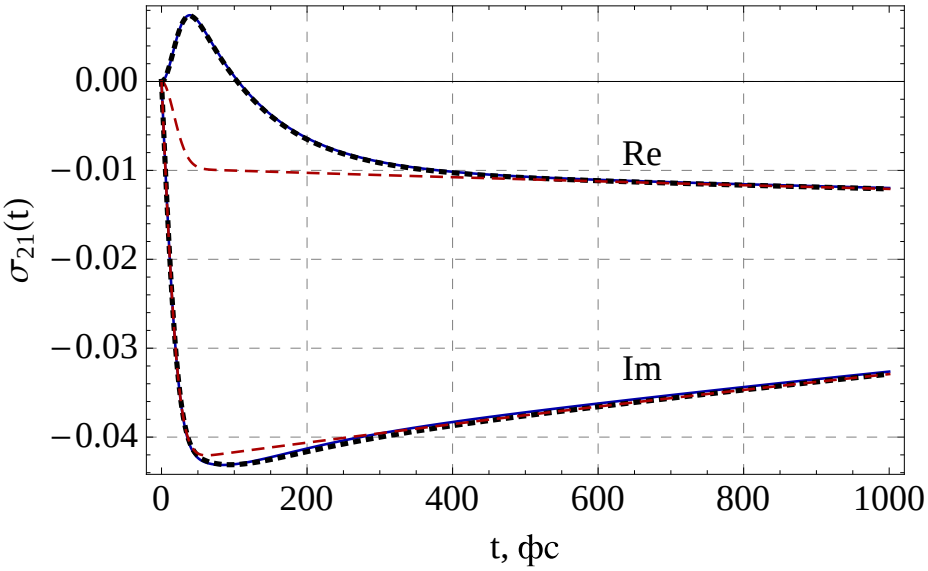



**Рисунок 5.1. – Вычисление электронной когерентности $\sigma_{21}(t)$ в рамках теории Фёрстера с поправкой на неравновесность начального состояния резервуара (5.51) и без неё в сравнении с точной цепочкой уравнений движения для параметров $J = 10$ см$^{-1}$ и $\lambda = 100$ см$^{-1}$ и начального состояния (5.68). Сплошная голубая линия: точная цепочка уравнений движения, жирная пунктирная чёрная линия: теория Фёрстера с поправкой на начальную неравновесность, штриховая красная линия: теория Фёрстера без поправки на неравновесность.**

быстрых колебаний ядер в сравнении со скоростью диссипации энергии реорганизации в них, см. [241, 248], а также раздел 5.5.3 далее. Выберем параметры, соответствующие медленному движению ядер (соответственно, высокой в сравнении с этим скорости диссипации): $J = 10$ см$^{-1}$, $\lambda = 1$ см$^{-1}$. Тогда поправки на начальную неравновесность пренебрежимо малы, как можно видеть на рисунке 5.3: резервуар очень быстро приходит в равновесие, поскольку диссипация энергии в нём происходит быстро. Также мы видим, что теория Фёрстера адекватно описывает динамику, несмотря на режим $\lambda \ll J$, тогда как в физической

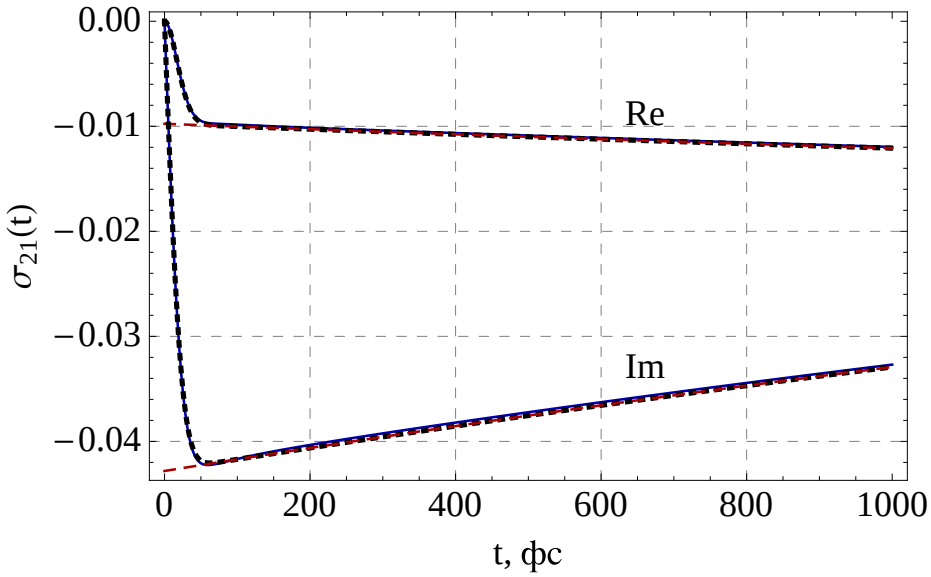



**Рисунок 5.2. – То же, что на рисунке 5.1, но начальное состояние равновесное, вида (5.69). Сплошная голубая линия: точная цепочка уравнений, жирная пунктирная чёрная линия: теория Фёрстера (без поправки на начальную неравновесность), штриховая красная линия: упрощённая («марковская») формула (5.41).**

литературе часто встречается утверждение, что теория Фёрстера верна только в обратном пределе $J \ll \lambda$. Также теория Фёрстера даёт хорошие результаты и для населённостей $\sigma_{11}(t)$ и $\sigma_{22}(t)$: мы не приводим графики, но ошибка в сравнении с точным методом не превосходит 3.5% на всех временах. Поэтому мы обсудим область применимости теории Фёрстера исходя из математических соображений в разделе 5.5.3.

Вернёмся к значениям параметров $J = 10$ см$^{-1}$ и $\lambda = 100$ см$^{-1}$, когда поправка на неравновесность существенна, и рассмотрим случай ненулевых начальных электронных когерентностей. А именно, рассмотрим случай, когда начальное состояние представляет собой не локальное возбуждение, а экситон, т.е. проектор на собственное состояние гамильтониана системы:

$$\rho(0) = |1\rangle_{\,\mathrm{ex}} \langle 1| \, \rho_g. \tag{5.70}$$

Используя выведенные формулы, мы можем вычислить динамику всей матрицы плотности в рамках теории Фёрстера, а не только её диагональной части в локальном базисе. Вычислим поэтому экситонную населённость $\sigma_{11}^{\mathrm{ex}}(t)$ и экситонную когерентность $\sigma_{21}^{\mathrm{ex}}(t)$ и сравним результаты с вычислениями в рамках моди-

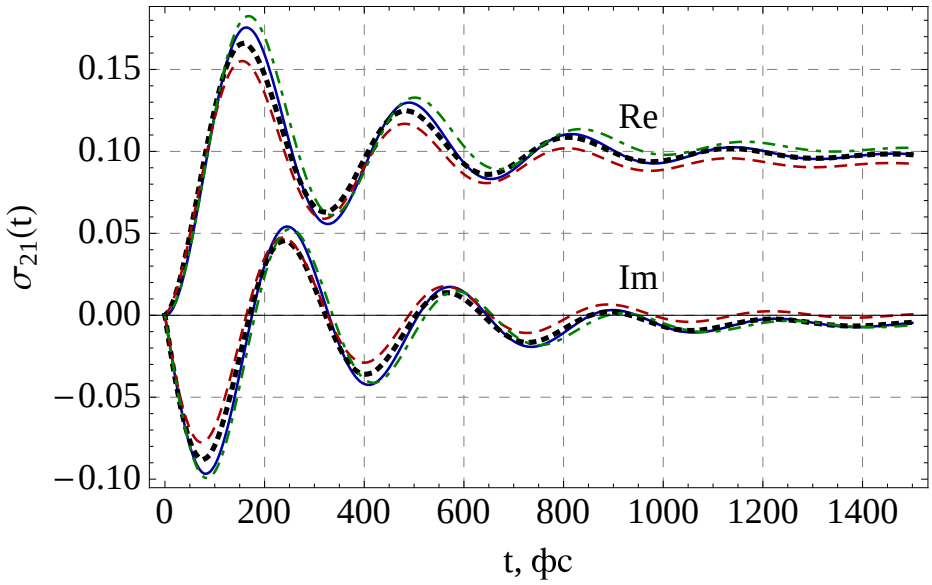



**Рисунок 5.3. – Вычисления электронной когерентности $\sigma_{21}(t)$ в рамках теории Фёрстера (без поправки на начальную неравновесность) и в рамках модифицированной теории Редфилда в сравнении с точной цепочной уравнений и стандартной теорией Редфилда для параметров $J = 10$ см$^{-1}$ и $\lambda = 1$ см$^{-1}$ и начального состояния (5.68). Сплошная голубая линия: точная цепочка уравнений и модифицированная теория Редфилда (между ними нет визуальных различий на данном масштабе), жирная пунктирная чёрная линия: теория Фёрстера, штриховая красная линия: стандартная теория Редфилда без секулярного приближения, штрих-пунктирная зелёная линия: стандартная теория Редфилда с секулярным приближением (уравнение вида ГКСЛ). Мы видим, что в случае быстрых колебаний ядер теория Фёрстера даёт хороший результат даже без поправки на начальную неравновесность. Также важно заметить, что теория Фёрстера здесь даёт хороший результат, несмотря на режим $\lambda \ll J$.**

фицированной теории Редфилда, которая изначально выводится для экситонного базиса. Экситонная населённость представляет собой линейную комбинацию локальных (электронных) населённостей и электронных когерентностей. Поскольку мы используем неравновесные поправки для электронных когерентностей, для честного сравнения различных теорий мы воспользуемся и поправками на начальную неравновесность для коэффициентов $K_{\alpha\beta}$ кинетического уравнения (5.21), привёденными в [284], и для теории Фёрстера, и для модифицированной теории Редфилда. Это единственный случай в этой главе, где коэффициенты кинетического уравнения берутся с поправками на начальную неравновесность резервуара.

Результаты сравнения представлены на рисунке 5.4 для населённости и на рисунке 5.5 для когерентности. Мы видим, что обе теории находятся в хорошем согласии с точным методом и из этих двух хороших результатов в несколько лучшем согласии находится теория Фёрстера.

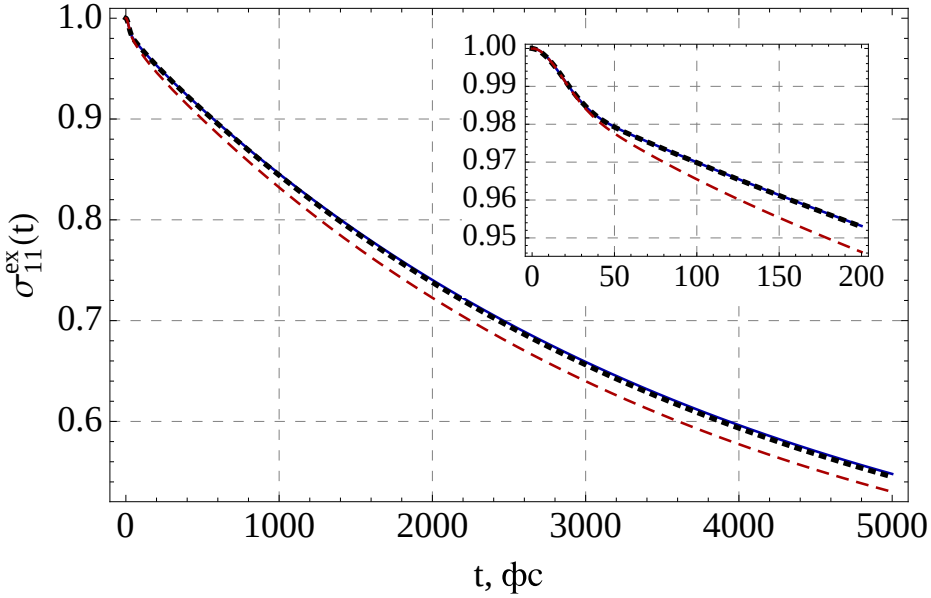



**Рисунок 5.4. – Вычисление экситонной населённости $\sigma_{11}^{\mathrm{ex}}(t)$ в рамках теории Фёрстера в сравнении с точной цепочкой уравнений и с модифицированной теорией Редфилда для параметров $J = 10$ см$^{-1}$ и $\lambda = 100$ см$^{-1}$ и начального состояния (5.70). Сплошные синие линии: точная цепочка уравнений, жирные пунктирные чёрные линии: теория Фёрстера, штриховая красная линия: модифицированная теория Редфилда. Для обеих теорий в коэффициентах кинетических уравнений $K_{\alpha\beta}$ была учтена поправка на начальную неравновесность состояния резервуара.**

### 5.4.2 Модифицированная теория Редфилда

В этом подразделе мы протестируем выведенные в рамках модифицированной теории Редфилда формулы для экситонных когеренностей. На рисунке 5.4, 5.5 и 5.5 уже рассмотрены случаи $\lambda \ll J \ll \gamma$ и $J \ll \lambda \ll \gamma$. В этих случаях результаты вычислений в по модифицированной теории Редфилда можно сравнить не только с точным методом, но и с теорией Фёрстера, которая также работает. Рассмотрим теперь случай $\lambda \ll \gamma \ll J$, который находится за пределами области применимости теории Фёрстера, но в области применимости и стандартной, и модифицированной теории Редфилда (см. далее раздел 5.5.3):

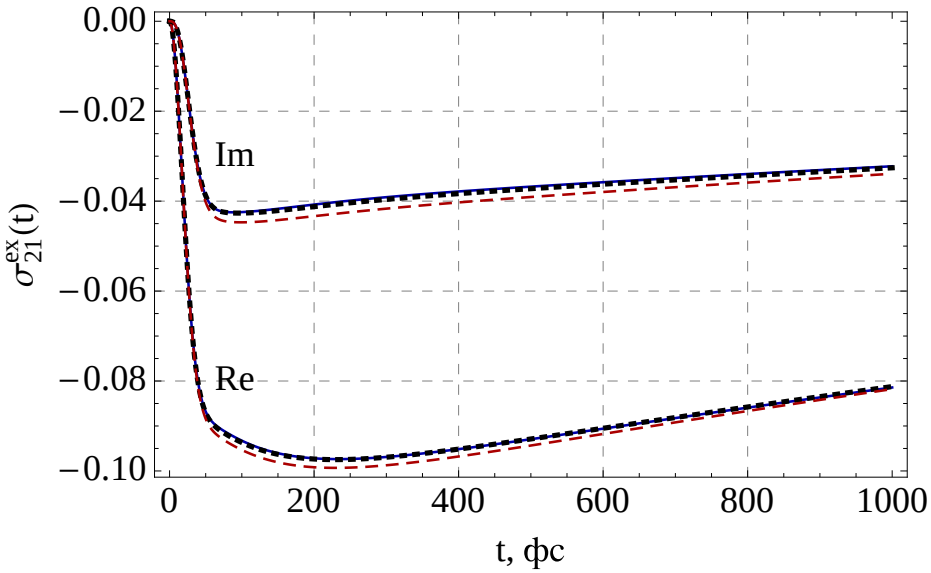



**Рисунок 5.5. – То же, что на рисунке 5.4, но рассматривается внедиагональный элемент (когерентность) $\sigma_{21}^{\mathrm{ex}}(t)$.**

$J = 100$ см$^{-1}$ и $\lambda = 2$ см$^{-1}$. Рассмотрим начальное состояние в виде экситона (5.70). Результаты вычислений по формуле (5.44) (без поправки на начальную неравновесность состояния резервуара) для экситонной когерентности $\sigma_{21}^{\mathrm{ex}}(t)$ в сравнении с точным методом и с решением стандартного несекулярного уравнения Редфилда представлены на рисунке 5.6. Мы видим, что формула (5.44) в рамках модифицированной теории Редфилда находится в значительно лучшем согласии с решением точной цепочки уравнений, нежели решение стандартного уравнения Редфилда. Отметим, что секулярное уравнение Редфилда предсказывает в данном случае нулевую экситонную когерентность, если её не было в начальный момент времени.

Используя предложенный метод, в рамках модифицированной теории Редфилда можно вычислить всю матрицу плотности, а не только её диагональную часть в экситонном базисе. Поэтому вычислим для тех же параметров и начального состояния локальную населённость $\sigma_{11}(t)$, которая является линейной комбинацией экситонных населённостей и экситонных когерентностей. Результаты вычислений представлены на рисунке 5.7. Мы снова видим, что вычисления по нашим формулам в рамках модифицированной теории Редфилда дают существенно лучшее согласие с вычислительно точным методом, нежели решения и секулярного, и несекулярного уравнений Редфилда.

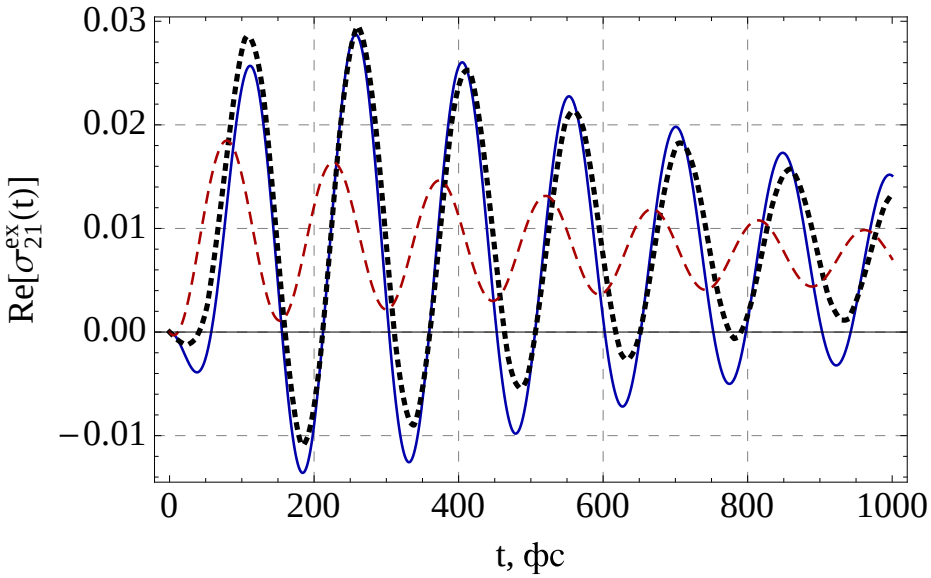



**Рисунок 5.6. – Вычисление экситонной когерентности $\sigma_{21}^{\mathrm{ex}}(t)$ в рамках модифицированной теории Редфилда в сравнении с точной цепочкой уравнений и с решением стандартного несекулярного уравнения Редфилда для параметров $J = 100$ см$^{-1}$ и $\lambda = 2$ см$^{-1}$ и начального состояния (5.70). Сплошная синяя линяя: точная цепочка уравнений, жирная пунктирная чёрная линия: модифицированная теория Редфилда, штриховая красная линия: стандартное несекулярное уравнение Редфилда. Согласно секулярному уравнению Редфилда $\sigma_{21}^{\mathrm{ex}}(t) \equiv 0$. Показана только вещественная часть $\sigma_{21}^{\mathrm{ex}}(t)$, поскольку для мнимой части картина качественно та же.**

Рассмотрим теперь начальное состояние в виде локального возбуждения (5.68), которое имеет ненулевые экситонные когерентности. Результаты вычисления когерентности $\sigma_{21}^{\mathrm{ex}}$ представлены на рисунке 5.8. Здесь все три подхода: точная цепочка уравнений, модифицированная теория Редфилда (формула (5.44)), секулярное и несекулярное уравнения стандартной теории Редфилда дают приблизительно одинаковые результаты.

В качестве последнего примера для случая димера проиллюстрируем фундаментальное ограничение модифицированной теории Редфилда, которое обсуждалось в замечании 5.5 в конце раздела 5.3.3: случай малой величины (5.65) (высокой степени делокализации экситонов). Положим $\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = 5$ см$^{-1}$, $J = 20$ см$^{-1}$ и $\lambda = 25$ см$^{-1}$. Результаты приведены на рисунке 5.9. Феноменологический подход работы [190] переоценивает скорость декогеренции и скорость переноса локального возбуждения (что установлено в работах [253–255]), тогда как полученные нами строгим методом формулы недооценивают их.

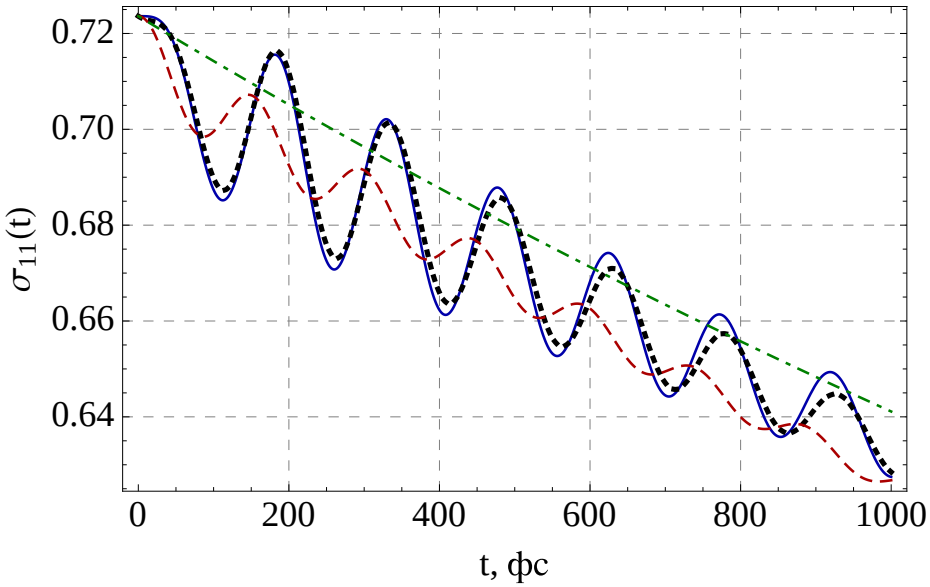



**Рисунок 5.7. – То же, что на рисунке 5.6, но рассматривается локальная населённость $\sigma_{11}(t)$. Дополнительная штрих-пунктирная зелёная линия: секулярное уравнение Редфилда.**

### 5.4.3 Динамика на больших временах

На предыдущих графиках мы рассмотрели динамику на сравнительно коротких временах. В этом разделе мы рассмотрим динамику на больших временах, на которых оператор плотности системы достигает стационарного значения. Поведение на больших временах когерентностей, рассмотренных на рисунке 5.2, 5.6 и 5.8, показано на рисунке 5.10, 5.11 и 5.12 соответственно.

Как мы видим, стационарные значения когерентностей отличаются от нуля, но сравнительно ненамного. Стало быть, стационарный оператор плотности отличается от $e^{-\beta H_0} / \operatorname{Tr} e^{-\beta H_0}$ (от состояния, равновесного относительно невозмущённого гамильтониана $H_0$), но очень близок к нему. Следует отметить, что стационарность этого состояния для диагональной части матрицы плотности в обеих рассматриваемых теориях подтверждается лишь численно, но не доказано аналитически [319].

Также из рисунков 5.11 и 5.12 видно, что, как и ожидается, когерентности в примерах на рисунках 5.6 и 5.8 с одинаковыми значениями параметров, но различными начальными состояниями, как и ожидается, сходятся на больших временах к одинаковым значениям (это не было очевидно из упомянутых гра-

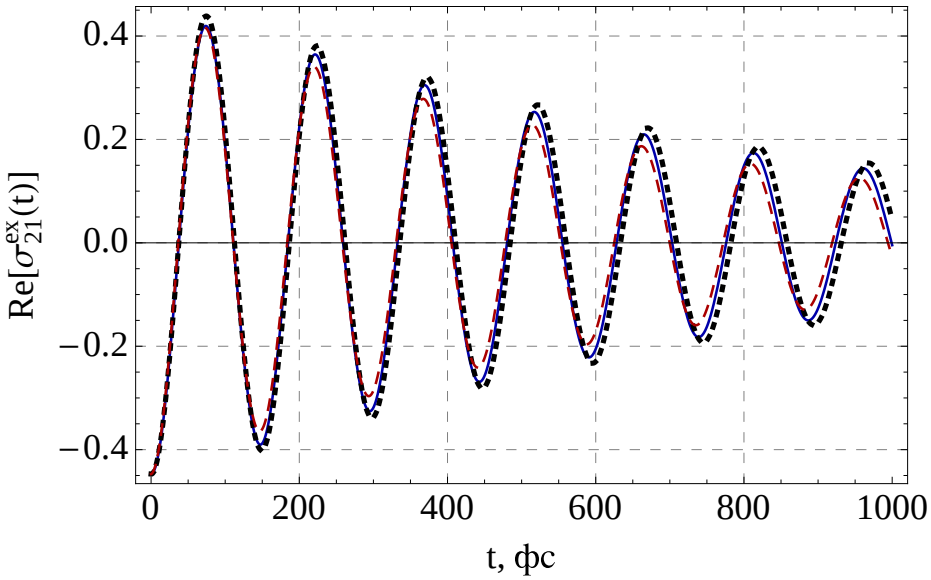



**Рисунок 5.8. – То же, что на рисунке 5.6, но начальное состояние имеет вид локального возбуждения (5.68), т.е. содержит экситонные когерентности. Секулярное уравнение стандартной теории Редфилда даёт почти такие же результаты, что и несекулярное, и не показано здесь. Все три подхода: точная цепочка уравнений, модифицированная теория Редфилда, секулярное и несекулярное уравнения стандартной теории Редфилда дают приблизительно одинаковые результаты.**

фиков предыдущего подраздела).

### 5.4.4 Трёхмерная система

Двухмерная система не позволяет рассмотреть член (5.59) ((5.61) и (5.63)), поскольку он отличен от нуля только для трёх попарно различных индексов $\alpha, \beta$ и $\gamma$. В отличие от димера (кубита), динамика многомерной системы включает в себя не только влияние населённостей друг на друга и населённостей на когерентности и обратно, но и влияние когерентностей друг на друга, которое, собственно, и описывается указанным членом. Поэтому проверим наши формулы для трёхмерной системы.

Для тестирования формул теории Фёрстера возьмём электронный гамильтониан

$$H^{\mathrm{el}} = \begin{pmatrix} 100 & 10 & 5 \\ 10 & 60 & 8 \\ 5 & 8 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.71}$$

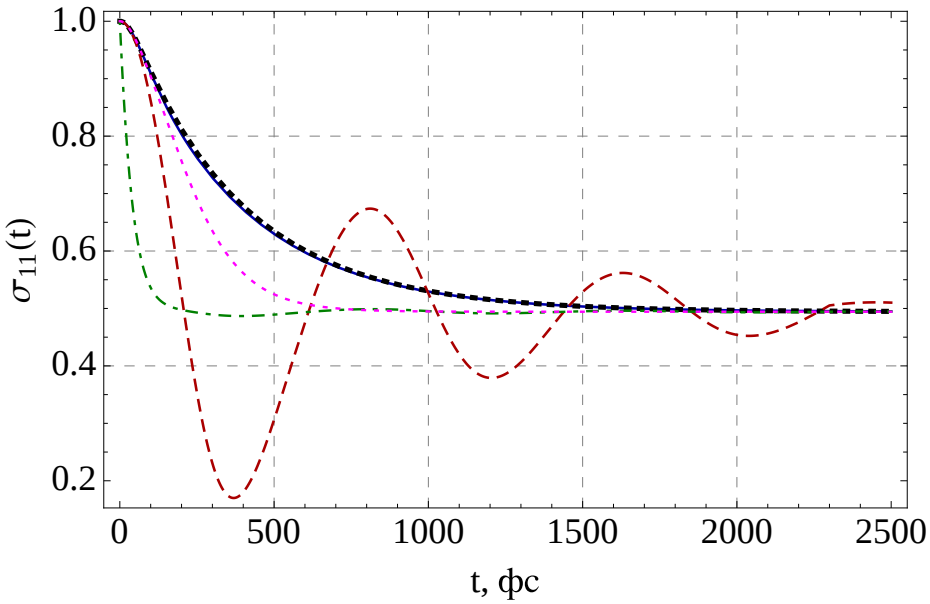



**Рисунок 5.9. – Неадекватность модифицированной теории Редфилда в случае малой величины (5.65) (высокой степени делокализации экситонов), см. замечание 5.5 после раздела 5.3.3). Локальная населённость вычислена на основе точной цепочки уравнений (сплошная линия), теории Фёрстера (жирная пунктирная чёрная линия), формулы (5.58) в рамках модифицированной теории Редфилда (штриховая красная линия), феноменологического подхода [190] в рамках модифицированной теории Редфилда (штрих-пунктирная зелёная линия) и стандартного немарковского уравнения Редфилда (фиолетовая пунктирная линия). Параметры:** $\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = 5$ **см**$^{-1}$, $J = 20$ **см**$^{-1}$, $\lambda = 25$ **см**$^{-1}$. **Начальное состояние задаётся формулой (5.68).**

(в единицах см$^{-1}$), $\lambda = 50$ см$^{-1}$. Результаты вычисления когерентностей приведены на рисунках 5.13–5.15.

Мы видим хорошее согласие с точным методом. Но также заметна ошибка в вычислении когерентности $\sigma_{32}(t)$ на малых временах. Обсудим её причины. Можно заметить, что начальные значения двух других электронных когерентностей, $\sigma_{21}(0)$ и $\sigma_{31}(0)$, много больше, чем $\sigma_{32}(0)$, однако затем они быстро убывают. Вместе с тем, формула (5.59) учитывает только их начальные значения и, таким образом, переоценивает их влияние на когерентность $\sigma_{32}(t)$. Возможно, эту ошибку можно уменьшить, если вывести выражения второго порядка теории возмущений для когерентностей. Напомним, мы пользуемся приближением первого порядка для них.

Увеличим значение энергии реорганизации и возьмём $\lambda = 100$ см$^{-1}$. Из ри-

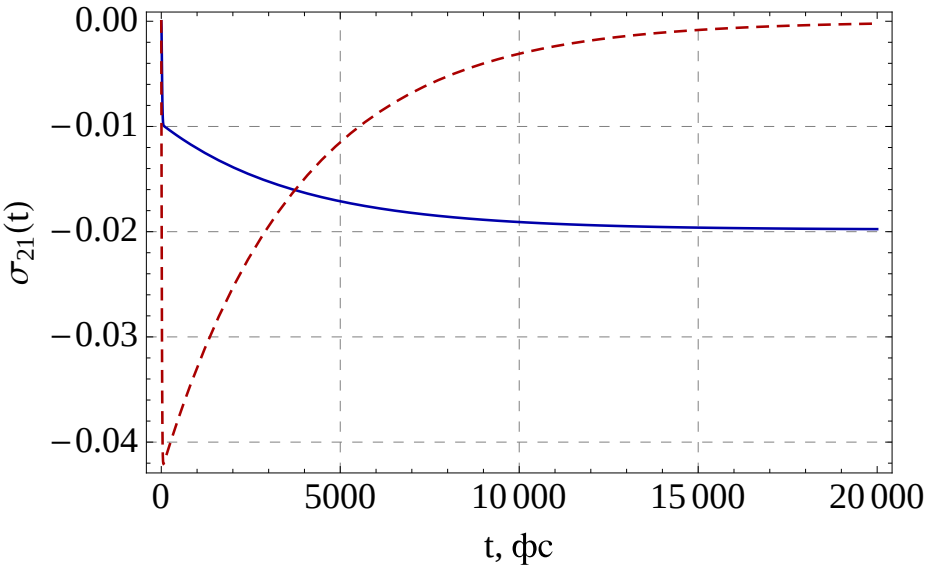



**Рисунок 5.10. – Динамика когерентности на больших временах, вычисленная в рамках теории Фёрстера со значениями параметров и начальным состоянием, как на рисунке 5.2. Сплошная линия: вещественная часть, прерывистая линия: мнимая часть.**

сунка 5.16 мы видим, что в этом случае данная ошибка становится гораздо меньше.

Для тестирования формул для когерентностей в рамках модифицированной теории Редфилда мы возьмём электронный гамильтониан

$$H^{\mathrm{el}} = \begin{pmatrix} 100 & 10 & 40 \\ 10 & 60 & 15 \\ 40 & 15 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.72}$$

(снова в единицах см$^{-1}$), $\lambda = 2$ см$^{-1}$. Результаты вычисления когерентностей приведены на рисунке 5.17–5.19.

Мы снова видим хорошее согласие с точным методом и также снова замечаем некоторую погрешность в вычислении $\sigma_{32}^{\mathrm{ex}}(t)$ на коротких временах. Как и в предыдущем случае, можно полагать, что причина ошибки в том, что формула (5.61) при расчёте влияний когерентностей на динамику друг друга учитывает только их начальные значения, но не последующую динамику. Также вычисления показывают, что стандартная теория Редфилда (в немарковском варианте) даёт в этом случае превосходное согласие с точным методом. Соответствующие линии не показаны на графиках, потому что на данном масштабе они визуально

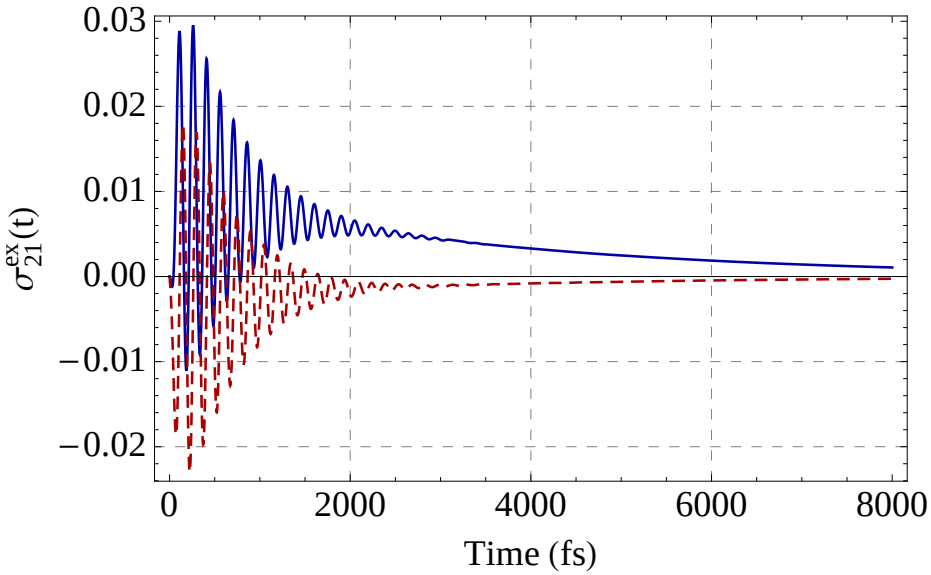



**Рисунок 5.11. – Динамика когерентности на больших временах, вычисленная в рамках модифицированной теории Редфилда со значениями параметров и начальным состоянием, как на рисунке 5.6. Сплошная линия: вещественная часть, прерывистая линия: мнимая часть.**

неотличимы от решения точной цепочки уравнений. Таким образом, в сравнении со стандартной теорией Редфилда модифицированная теория Редфилда более точно описывает влияние населённостей друг на друга, а также даёт достаточно хорошее описание влияния населённостей на когерентности, но менее точна в описании влияния когерентностей друг на друга.

## 5.5 Обсуждение

### 5.5.1 Свойства динамического отображения

Итак, разработанный подход позволяет вычислить эволюцию всей матрицы плотности системы, а не только её диагональных элементов, для любой начальной матрицы плотности, также необязательно диагональной. Если мы рассмотрим начальное состояние системы и резервуара вида (5.54), то эволюцию матрицы плотности системы, задаваемую кинетическим уравнением (5.57) и формулой (5.58), можно представить как действие динамического отображения $\Lambda_t$:

$$\sigma(0) \mapsto \sigma(t) = \Lambda_t(\sigma(0)).$$

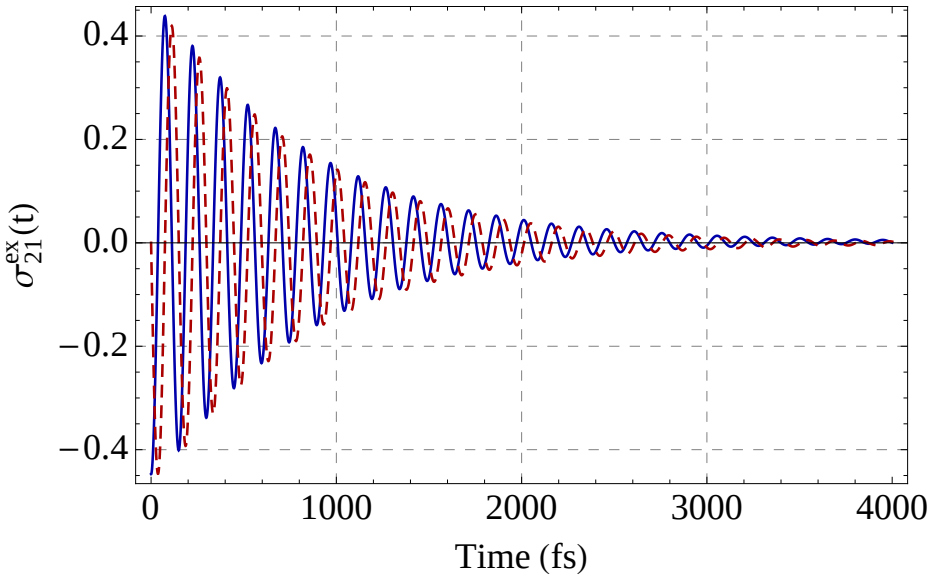



**Рисунок 5.12. – Динамика когерентности на больших временах, вычисленная в рамках модифицированной теории Редфилда со значениями параметров и начальным состоянием, как на рисунке 5.6. Сплошная линия: вещественная часть, прерывистая линия: мнимая часть.**

Удовлетворяет ли это отображение свойствам, предъявляемым к квантовым динамическим отображениям (см. раздел 1.1), т.е. сохранению следа и полной положительности? Это отображение сохраняет след, потому что кинетическое уравнение (5.57), очевидно, сохраняет сумму диагональных элементов неизменной. Можно показать, что отображение $\Lambda_t$ не сохраняет положительность при больших $H'_{\beta\alpha}$, т.е. за пределами области применимости соответствующей теории возмущений. Во всех рассмотренных в предыдущем разделе примерах положительность сохранялась. Но сохраняется ли она в общем случае при достаточно малых $H'_{\beta\alpha}$, остаётся вопросом открытым.

Другой вопрос, касающийся отображения $\Lambda_t$, связан с тем, следует ли классифицировать соответствующую динамику состояния системы как марковскую или как немарковскую. Если в качестве определения марковости использовать полугрупповое свойство $\Lambda_{t+s}(\sigma) = \Lambda_s(\Lambda_t(\sigma))$ [22, 275], то динамика немарковская. Из формул (5.40), (5.49), (5.59) и (5.57) мы видим, что полугрупповое свойство не выполнено и в этом смысле динамика — марковская, зависимая от резервуара.

С другой стороны, рассмотрим большие времена, когда интегралы в (5.40)

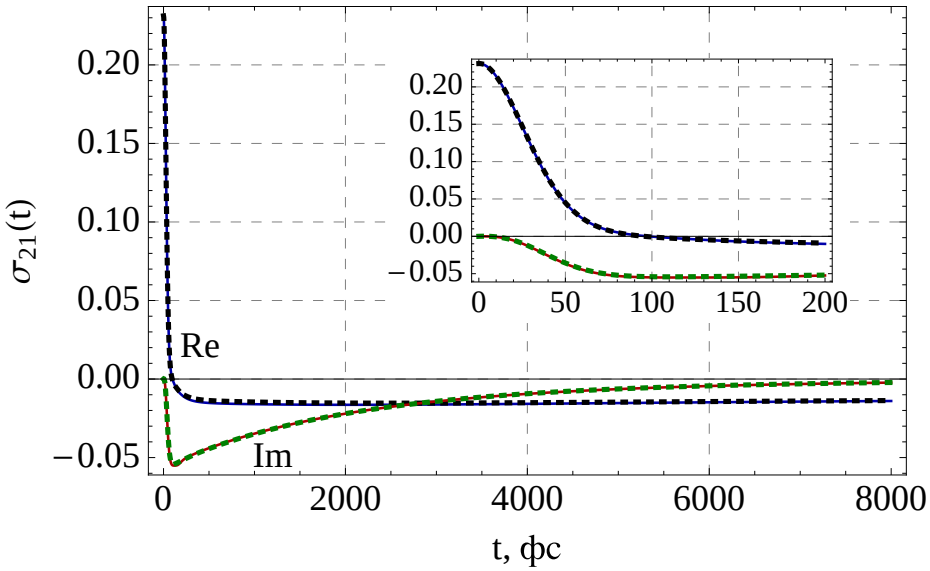



**Рисунок 5.13. – Вычисление электронной когерентности $\sigma_{21}(t)$ для гамильтониана (5.71), $\lambda = 50$ см$^{-1}$, и начального состояния (5.70) в рамках теории Фёрстера в сравнении с точной цепочкой уравнений. Сплошная линия: точная цепочка уравнений, пунктирная линия: теория Фёрстера.**

выходят на постоянные значения, а поправки (5.49), (5.59) и последний член в уравнении (5.57), вызванные начальными условиями, становятся пренебрежимо малыми. Тогда динамика населённостей описывается марковским кинетическим уравнением (5.21), а когерентности полностью определяются населённостями по формуле (5.41). Такую динамику можно считать марковской в том смысле, что знания настоящего состояния системы (без знания явного момента времени $t$) достаточно для предсказания будущей динамики.

Например, как мы видим на рисунке 5.2, «марковская» динамика начинается после начального промежутка времени, который много короче, чем характерное время эволюции диагональных элементов. Поскольку

$$p_\alpha(t) - p_\alpha(\infty) \sim e^{-(K_{21}+K_{12})t}, \quad \alpha = 1, 2, \tag{5.73}$$

характерный масштаб времени эволюции диагональных элементов для параметров на рисунке 5.2 составляет $(K_{12} + K_{21})^{-1} \approx 3800$ фс, что намного больше, чем указанный начальный промежуток времени.

Однако в общем случае масштаб времени, на котором интегралы в (5.40) выходят на постоянные значения и, следовательно, формулу (5.40) можно заменить

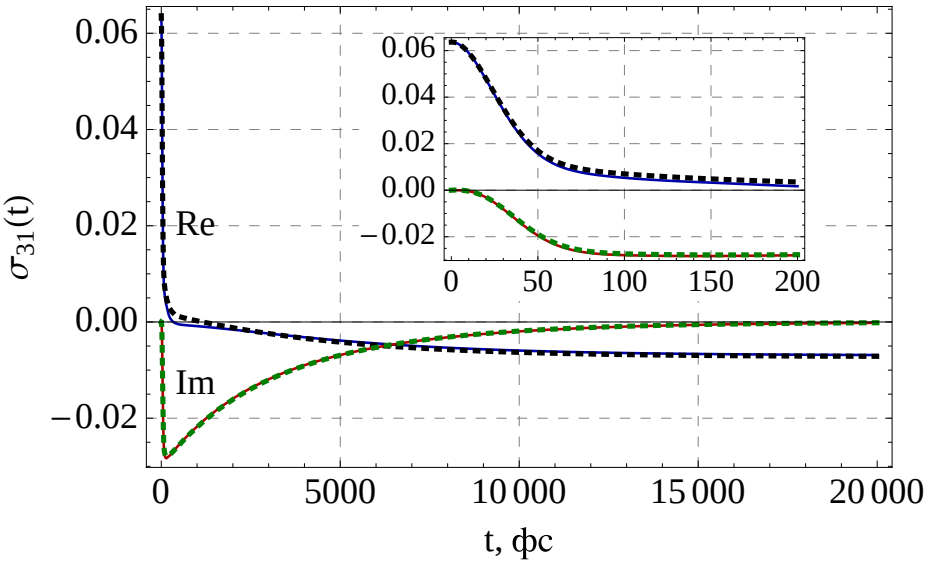



**Рисунок 5.14. – Вычисление электронной когерентности $\sigma_{31}(t)$ для того же случая, что и на рисунке 5.13.**

на (5.41), может быть сравнимым с временем эволюции диагональных элементов. Так, на рисунке 5.20 приводится сравнение вычислений экситонной когерентности в рамках модифицированной теории Редфилда по формуле (5.44) и по формуле (5.41) для значений параметров и начального состояния, как на рисунке 5.6. Мы видим, что затухание осцилляций происходит на масштабе времени, сравнимом с временем релаксации диагональных элементов (которое составляет приблизительно 3500 фс). Поэтому можно говорить о том, что динамика всей матрицы плотности — немарковская, несмотря на то что кинетическое уравнение только для диагональных элементов (5.21) — марковское.

Поясним причины того, как при немарковской динамике всей матрицы плотности может возникать марковская динамика диагональных элементов. Как мы обратили внимание в замечании 5.2, $\mathcal{Q}\rho(t)$ влияет не непосредственно на $\mathcal{P}\rho(t)$, а на производную по времени $\mathcal{P}\dot{\rho}(t)$, см. уравнение (5.13). Если период осцилляций правой части (5.13) (или (5.19)) много меньше, чем время, за которое диагональные элементы ($\mathcal{P}\rho(t)$) успевают проэволюционировать, то такими осцилляциями можно пренебречь и рассматривать только среднее значение. Формализовать это рассуждение можно при помощи теоремы Римана–Лебега. Это и обеспечивает марковское свойство динамики населённостей.

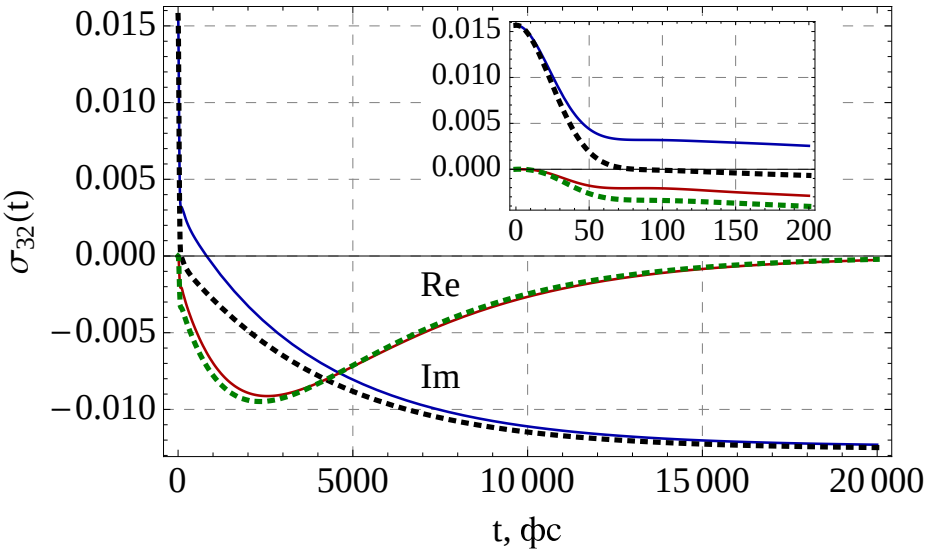



**Рисунок 5.15. – Вычисление электронной когерентности $\sigma_{32}(t)$ для того же случая, что и на рисунке 5.13.**

### 5.5.2 О взаимосвязи между населённостями и когерентностями в механизме переноса энергии возбуждения

В литературе часто встречается утверждение, что фёрстеровский механизм переноса энергии возбуждённого состояния заключается в некогерентном, т.е. классическом скачкообразном процессе [193, 195, 241], описываемом классическим кинетическим уравнением (5.21), хоть константы переноса и рассчитываются квантовомеханически. Полученные результаты позволяют сформулировать это утверждение точнее. Как мы замечали, это утверждение не следует понимать в том смысле, что когерентности отсутствуют, или что влияние когерентностей на динамику населённостей пренебрежимо мала. Уравнение (5.13) в точности и означает то, что динамика населённостей управляется когерентностями: по определению $H'$ и $\mathcal{P}$ только внедиагональная часть $\mathcal{Q}\rho(t)$ присутствует в правой части (5.13).

Как мы видели, утверждение о «некогерентном скачкообразном процессе» означает, что после короткого (по сравнению с временем релаксации населённостей) начального промежутка времени когерентности либо задаются формулой (5.41), т.е. полностью определяется населённостями в данный момент времени, либо быстро осциллируют вокруг среднего значения, задаваемого этой форму-

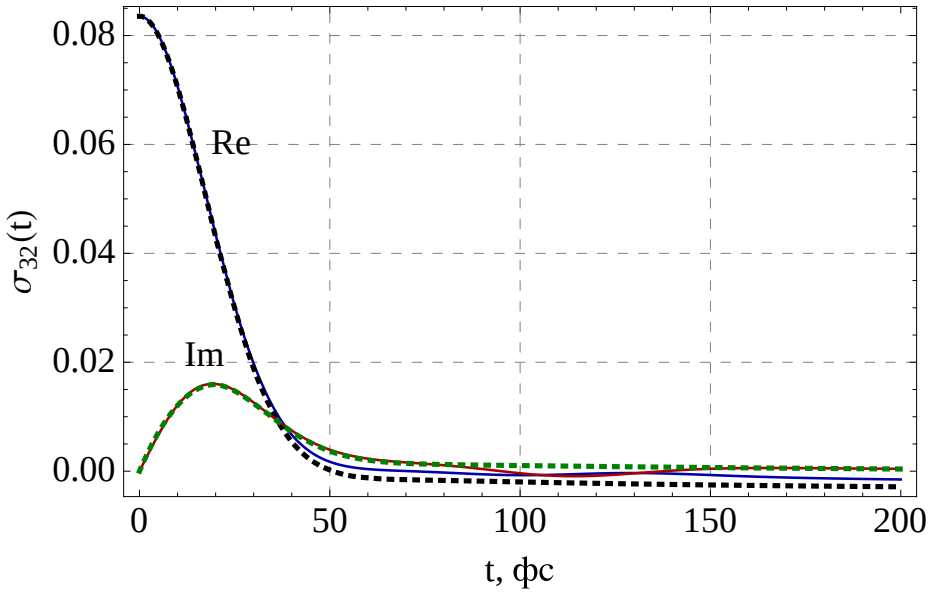



**Рисунок 5.16. – Вычисление электронной когерентности $\sigma_{32}(t)$ для того же случая, что и на рисунке 5.13, кроме значения энергии реорганизации. Здесь $\lambda = 100$ см$^{-1}$.**

лой. Поскольку, как мы говорили, эти осцилляции не влияют на динамику населённостей, в обоих случаях мы получаем замкнутое диффренциальное уравнение для населённостей.

Иными словами, *утверждение о «некогерентном скачкообразном процессе» фактически означает что цикл обратной связи от населённостей к когерентностям и обратно к производной по времени населённостей не имеет задержки по времени.* То же верно и в отношении модифицированной теории Редфилда при рассмотрении взаимодействия между экситонными населённостями и когерентностями.

### 5.5.3 Аналитические оценки когерентностей и область применимости теории Фёрстера

Считается, что теория Фёрстера справедлива в случае $J \ll \lambda$, т.е. когда дипольные связи между электронными возбуждениями молекул должны быть много меньше энергии реорганизации $\lambda$, которая выражает силу взаимодействия системы и электронных и ядерных степеней свободы (системы с резервуаром) [192, 193, 205, 241, 284]. На на рисунке 5.3 мы видим, что теория Фёрстера работает, несмотря на обратный случай $\lambda \ll J$. Поэтому необходимо обсудить

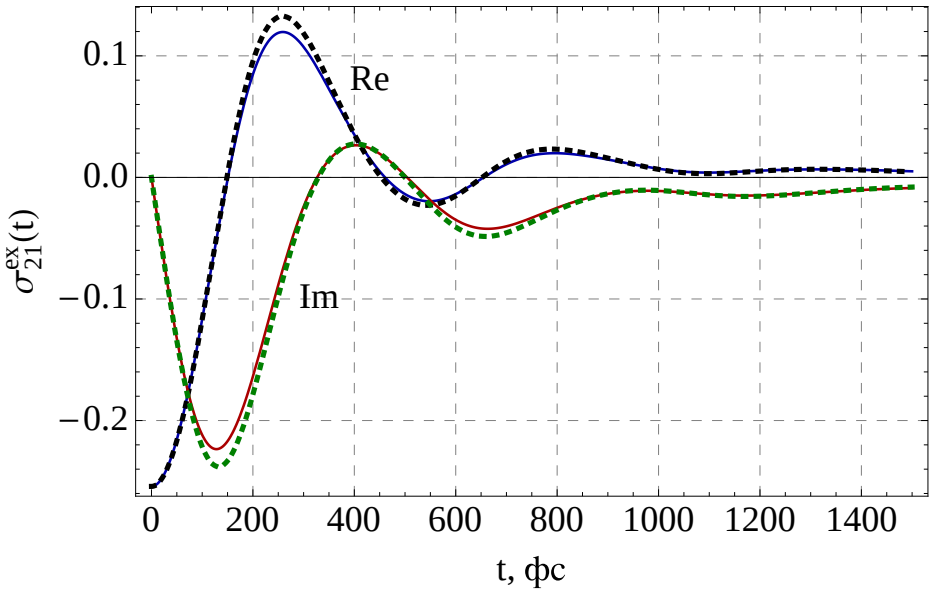



**Рисунок 5.17. – Вычисление экситонной когерентности $\sigma_{21}^{\text{ex}}(t)$ для гамильтониана (5.72), $\lambda = 2$ см$^{-1}$ и начального состояния (5.68) в рамках модифицированной теории Редфилда в сравнении с точной цепочкой уравнений. Сплошные линии: точная цепочка уравнений, пунктирные линии: модифицированная теория Редфилда.**

область применимости теории Фёрстера. Как уже сказано, построение строгого математического обоснования приближений, о которых мы говорили в разделе 5.2.5, остаётся открытой задачей, но всё-таки попытаемся рассмотреть этот вопрос более математически. В ходе нашего анализа мы получим грубые оценки когерентностей в приближении Фёрстера: оценку (5.75) для режима медленных колебаний ядер и оценку (5.76) для режима быстрых колебаний.

На пути от точных уравнений (5.13)–(5.14) к кинетическому уравнению (5.21) с коэффициентами (5.22) мы воспользовались следующими приближениями: а) первый порядок теории возмущений в (5.15), б) замена $\mathcal{P}\rho(t-\tau)$ на $\mathcal{P}\rho(t)$ в (5.18) и в) замена верхнего предела интегрирования в (5.18) на бесконечность. Для вывода формул для когерентностей мы воспользовались приближениями а) и б). Поэтому необходимо установить, при каких условиях все три приближения справедливы.

Как мы уже обсуждали в разделе 5.2.5, мы можем обрубить ряд теории возмущений в (5.15), оставив в нём лишь конечное число членов (в нашем случае — только первый член), если $\mathcal{Q}\rho(t) \ll 1$ для всех времён. В частности, это условие выполнено, если гамильтониан возмущения $H'$ (в теории Фёрстера пропор-

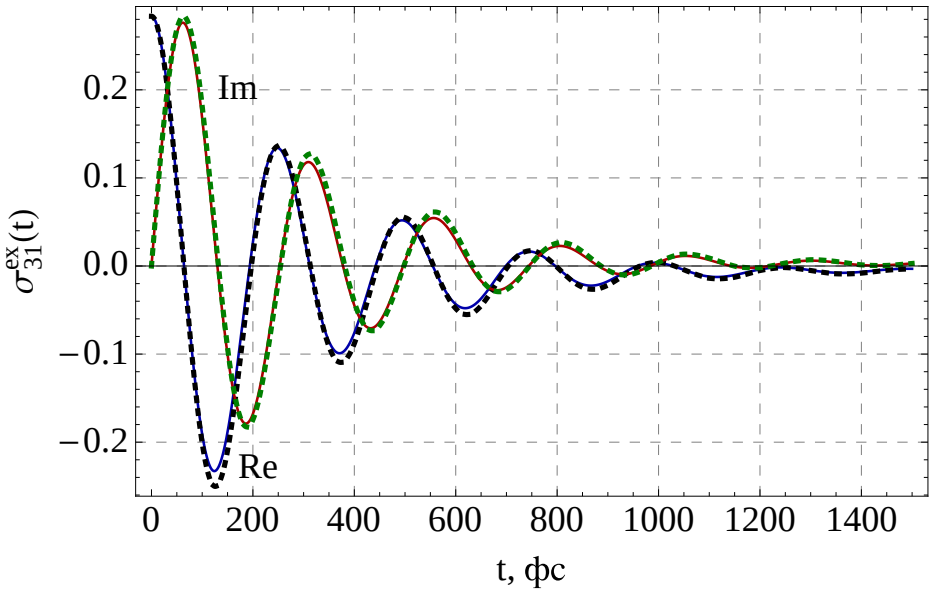



**Рисунок 5.18. – Вычисление экситонной когерентности $\sigma_{31}^{\mathrm{ex}}(t)$ для того же случая, что и на рисунке 5.17.**

циональный $J$, индексы для простоты опускаем) много меньше, чем скорость релаксации $\mathcal{Q}\rho$ под действием свободной эволюции с гамильтонианом $H_0$.

Следовательно, для установления области применимости теории Фёрстера нам надо рассмотреть релаксацию $\mathcal{Q}\rho$. Можно заметить, что релаксация диагональной и внедиагональной частей $\mathcal{Q}\rho^{\text{diag}}$ и $\mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}}$ (см. (5.55)) происходит с разными скоростями. Для случая спектральной плотности Друде–Лоренца (5.66) релаксацию диагональной части $\mathcal{Q}\rho^{\text{diag}}$ можно связать с частотой Дебая $\gamma$. Это можно понять, например, из сравнения функции неравновесного излучения (5.52) с равновесной (5.28) и выражение для функции спектральной линии (5.67): $\mathrm{Im}[g_m(t) - g_m(t-\tau)] - (-\lambda_m) \sim e^{-\gamma t}$. Таким образом, $J \ll \gamma$ есть необходимое условие применимости теории Фёрстера.

Перейдём к рассмотрению внедиагональной части. Из формул (5.41), (5.43), (5.28) и (5.29) мы можем грубо оценить $\mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}}$ как

$$\mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}} \sim J \int_0^\infty e^{i(\Delta\varepsilon^0 - 2\lambda)\tau - 2g(\tau)}\, d\tau, \tag{5.74}$$

где $\Delta\varepsilon^0$ — характерная разность между энергиями возбуждения отдельных молекул. Из этого выражения следует, что $\mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}}$ мало, если велико $\lambda$ (поскольку $g(\tau)$ пропорционально $\lambda$) или велико $\Delta\varepsilon^0 - 2\lambda$, поскольку быстрые осцилляции

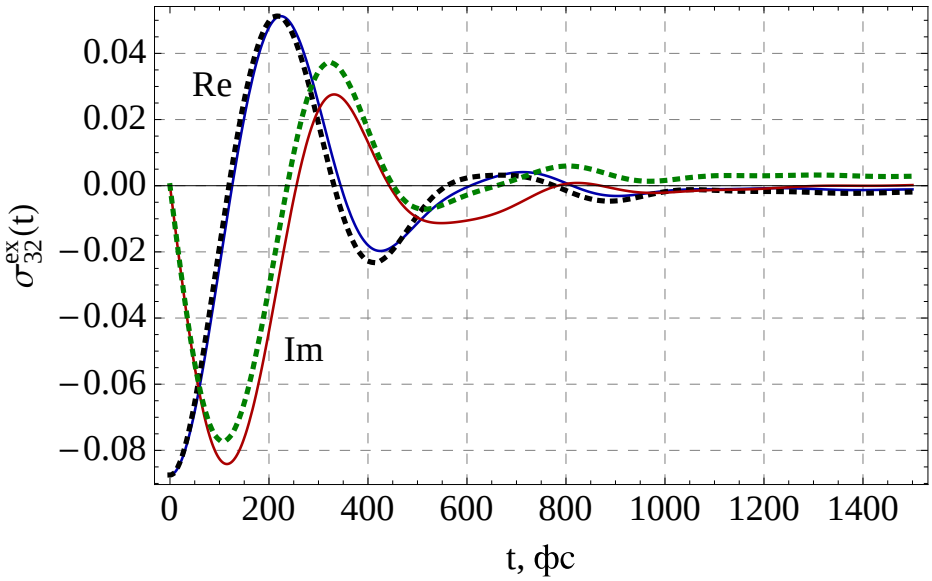



**Рисунок 5.19. – Вычисление экситонной когерентности $\sigma_{32}^{\text{ex}}(t)$ для того же случая, что и на рисунке 5.17.**

подынтегральной функции уменьшают значение интеграла.

Рассмотрим подробнее два предельных случая быстрых и медленных колебаний ядер по сравнению со скоростью диссипации ими энергии реорганизации [241, 248]. Для этого вводится безразмерный параметр $\kappa = \sqrt{\beta\gamma^2/2\lambda}$.

Случай $\kappa \ll 1$ соответствует медленным ядерным колебаниям. Иными словами, $\gamma$ мало в сравнении с $\sqrt{2\lambda/\beta}$ В этом пределе в выражении (5.67) для $g(t)$ можно воспользоваться приближением $e^{-\gamma t} \approx 1 - \gamma t + (\gamma t)^2/2$, пренебречь мнимой частью $g(\tau)$ и получить $g(\tau) \approx \lambda\tau^2/\beta$. Тогда

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}} &\sim J \int_0^\infty e^{i(\Delta\varepsilon^0 - 2\lambda)\tau - \frac{2\lambda t^2}{\beta}} d\tau = \\ &= J\sqrt{\frac{\pi\beta}{8\lambda}} e^{-\frac{\beta(\Delta\varepsilon^0 - 2\lambda)^2}{8\lambda}} + iJ\sqrt{\frac{\beta}{2\lambda}} F\left(\sqrt{\frac{\beta}{2\lambda}}\frac{\Delta\varepsilon^0 - 2\lambda}{2}\right), \end{aligned} \tag{5.75}$$

где $F(x) = e^{-x^2}\int_0^x e^{\tau^2} d\tau$ — функция Доусона [298]. При больших $x$ функция $F(x)$ убывает, как $(2x)^{-1}$. Поскольку мы уже потребовали условие $J \ll \gamma$ и рассматриваем случай $\kappa \ll 1$, имеет место $J\sqrt{\beta/2\lambda} \ll 1$, что влечёт малость $\mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}}$ при уже имеющихся условиях.

Рассмотрим обратный предельный случай $\kappa \gg 1$ — режим быстрых колебаний ядер. Иными словами, $\gamma$ велико в сравнении с $\sqrt{2\lambda/\beta}$. В этом случае можно

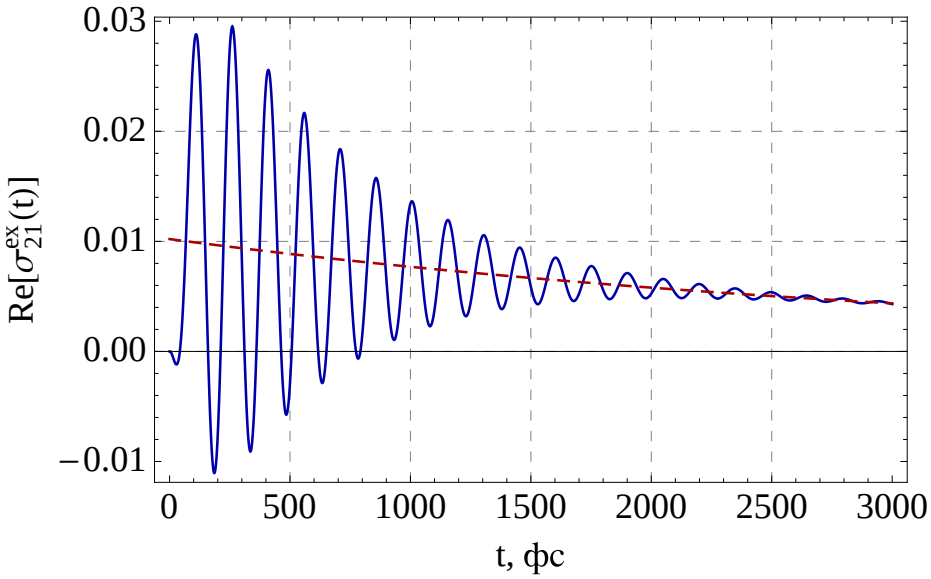



**Рисунок 5.20. – Сравнение вычислений экситонной когерентности в рамках модифицированной теории Редфилда по формуле (5.44) и по упрощённой («марковской») формуле (5.41) для значений параметров и начального состояния, как на рисунке 5.6. Сплошная линия: расчёт по формуле (5.44), прерывистая линия: расчёт по формуле (5.41).**

пренебречь быстро убывающим членом $e^{-\gamma t}$ и слагаемым $-1$ в $g(t)$ и получить

$$\mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}} \sim J \int_0^\infty e^{i\Delta\varepsilon^0\tau - \frac{4\lambda}{\beta\gamma}\tau}\, d\tau = \frac{J}{\frac{4\lambda}{\beta\gamma} - i\Delta\varepsilon^0}. \tag{5.76}$$

Следовательно, $\mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}}$ мало, если $J$ много меньше максимума двух величин $4\lambda/\beta\gamma$ и $\Delta\varepsilon^0$. Пример на рисунке 5.3 соответствует случаю $J \gg \lambda$, но $J \ll \gamma$ и $J \ll \Delta\varepsilon^0$, благодаря чему приближение Фёрстера применимо.

Рассмотрим теперь приближение б): замену $\mathcal{P}\rho(t-\tau)$ на $\mathcal{P}\rho(t)$ в (5.18). $\mathcal{P}\rho(t)$ эволюционирует со скоростью $K_{nm}+K_{mn}$ (см. (5.73)). Рассмотрим снова сначала случай медленных колебаний ядер. Как мы видим из (5.75), характерное время убывания до нуля подынтегрального выражения в (5.18) равно $\sqrt{\beta/4\lambda}$. Как мы заключили выше, $J \ll \sqrt{2\lambda/\beta}$, так что

$$K_{nm} + K_{mn} \sim 4J^2\sqrt{\frac{\pi\beta}{8\lambda}}e^{-\frac{\beta(\Delta\varepsilon^0-2\lambda)^2}{8\lambda}} \ll \sqrt{2\pi}\sqrt{\frac{4\lambda}{\beta}}.$$

Таким образом, время эволюции населённостей $(K_{nm} + K_{mn})^{-1}$ много больше времени распада $\mathcal{Q}\rho^{\text{off-diag}}$, что обосновывает приближение б) для режима медленных ядерных колебаний.

Рассмотрим случай быстрых колебаний ядер. Тогда

$$K_{nm} + K_{mn} \sim \frac{4J^2 \frac{4\lambda}{\beta\gamma}}{\left(\frac{4\lambda}{\beta\gamma}\right)^2 + \left(\Delta\varepsilon^0\right)^2}.$$

Как мы заключили ранее, $J^2$ должно быть много меньше знаменателя, следовательно, скорость эволюции населённостей $K_{nm} + K_{mn}$ много меньше скорости $4\lambda/\beta\gamma$ распада подынтегрального выражения в (5.18) (выражения (5.76)), что обосновывает приближение б) при имеющихся предположениях и для случая быстрых колебаний ядер.

Приближение в) основано на том же допущении, что и приближение б). Но в некоторых случаях, тем не менее, замена верхнего предела интегрирования в (5.18) на бесконечность даёт заметную ошибку. В этих случаях можно оставить верхний предел интегрирования равным $t$.

Отметим, что в нашем анализе мы пользовались упрощённой формулой (5.41) для когерентности, потому что, как мы обсудили в подразделе 5.5.1, осцилляции вокруг среднего значения не влияют существенным образом на динамику населённостей.

Резюмируя, теории Фёрстера адекватна при выполнении следующих условий: $J \ll \gamma$ и, дополнительное условие в случае быстрых колебаний ядер, $J \ll \max\{4\lambda/\beta\gamma, \Delta\varepsilon^0\}$.

Аналогичный анализ для модифицированной теории Редфилда более сложен из-за предэкспоненциальных множителей в (5.34) и (5.44), содержащих производные функции спектральной линии, но тоже может быть проведён. Ограничимся здесь общими замечаниями. По аналогии с теорией Фёрстера малость гамильтониана возмущения $H'$ в сравнении с временем релаксации резервуара $\gamma$ есть необходимое условие адекватности теории. Основное хорошо известное свойство модифицированной теории Редфилда состоит в том, что $H'$ пропорционален $\lambda$ при высокой степени делокализации экситонов и пропорционален $J/\Delta\varepsilon$ при хорошо локализованных экситонах (при $J \ll \Delta\varepsilon$). Следовательно, в случае хорошо локализованных экситонов модифицированная теория Редфилда, в отличие от стандартной, может работать и при большом $\lambda$, если оно ском-

пенсировано большой разностью энергий возбуждения молекул $\Delta\varepsilon^0$. Серьёзное ограничение модифицированной теории Редфилда — системы, в которых локализация экситонов не статическая (т.е. сводящаяся к свойствам собственных векторов гамильтониана системы), а динамическая, возникающая из-за взаимодействия с фононами (поляронный эффект) [253, 255].

Согласно этим рассуждениям, в случае делокализованных экситонов модифицированная теория Редфилда не лучше, чем стандартная, поскольку, так же как и стандартная, она верна в этом случае только при малых $\lambda$. На рисунках 5.6–5.8 мы видим, что модифицированная теория Редфилда по меньшей мере столь же точна, как и стандартная в описании экситонных когерентностей и даже в некоторых случаях более точна, даже если стандартная теория также применима. Но это не всегда бывает так: как мы заметили в конце раздела 5.3.3, случай в высокой степени делокализованных экситонов с начальными большими экситонными когерентностями находится за пределами области применимости теории возмущений модифицированного Редфилда. Также в разделе 5.4.4 мы видели, что в своей области применимости стандартная теория Редфилда лучше описывает влияние когерентностей на динамику друг друга.

Область применимости модфицированной теории Редфилда пересекается с областью применимости теории Фёрстера. Как мы видели из рисунков 5.3, 5.4 и 5.5, модифицированная теория Редфилда даёт более точные результаты, чем теория Фёрстера, для случая $\lambda \ll J \ll \gamma$ (даже если теория Фёрстера тоже применима), но теория Фёрстера точнее в режиме $J \ll \lambda$.

## 5.6 Итог главы

Сформулируем основной результат этой главы в виде теоремы.

**Теорема 5.1.** *Пусть в правой части (5.38) $\mathcal{P}\rho(t)$, $t \geqslant 0$, определяется формулой (5.20) и кинетическим уравнением (5.57), а $\mathcal{Q}\rho(t)$ — формулой (5.45) и начальным состоянием (5.54). Тогда для $\sigma_{\beta\alpha}(t)$ справедлива формула (5.58), где слагаемые правой части даются формулами (5.40), (5.49) и (5.59). В частности, для теории Фёрстера, т.е. случая, когда в качестве базиса $\{|\alpha\rangle\}$ берётся локальный*

*базис* $\{|n\rangle\}$*, слагаемые правой части (5.58) даются формулами (5.43), (5.51) и (5.61), а для модифицированной теории Редфилда, т.е. случая, когда в качестве базиса* $\{|\alpha\rangle\}$ *берётся собственный (экситонный) базис* $\{|k\rangle\}$*, — формулами (5.44), (5.53) и (5.63).*

Модификацию кинетического уравнения, в которых учтена поправка на начальную когерентность, данную в (5.57) (общая формула), (5.60) (теория Фёрстера) и (5.62) (модифицированная теория Редфилда), также можно отнести к основным результатам этой главы.

Итак, описывая перенос энергии возбуждения в рамках широко используемых теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда мы больше не ограничены расчётом только диагональных элементов матрицы плотности и только для диагональных начальных матриц плотности. Разработанный подход позволяет вычислить эволюцию всей матрицы плотности при произвольных начальных условиях. Формулы выведены на основе метода проекционных операторов Цванцига и показывают хорошее соответствие с результатами численного расчёта по точной цепочке уравнений. Единственное фундаментальное ограничение модифицированной теории Редфилда состоит в том, что она не работает в случае больших начальных экситонных когерентностей при высокой степени делокализации экситонов. Однако в этом случае из применимости модифицированной теории Редфилда без начальных когерентностей следует и применимость стандартной теории Редфилда для произвольных начальных состояний. Так что мы можем в этом случае воспользоваться стандартной теорией Редфилда.

К данной главе примыкает статья автора настоящей диссертации [302]. В ней на основе точной цепочки уравнений, расчёт по которой брался за образец в этой главе, выводятся поправки произвольных порядков (по константе взаимодействия системы с резервуаром) к стандартному уравнению Редфилда для случая спектральной плотности вида Друде–Лоренца (5.66).

# ГЛАВА 6

# ПРЕДЕЛЬНАЯ СКОРОСТЬ ГЕНЕРАЦИИ СЕКРЕТНОГО КЛЮЧА В ПРОТОКОЛЕ КВАНТОВОЙ КРИПТОГРАФИИ BB84 ПРИ НЕСОВПАДАЮЩИХ ЭФФЕКТИВНОСТЯХ ДЕТЕКТОРОВ

## 6.1 Предварительные замечания

В этой главе мы докажем теорему о предельной скорости генерации секретного ключа в протоколе квантовой криптографии BB84 при несовпадающих эффективностях однофотонных детекторов. Мы воспользуемся методом, разработанным в [317], который сводит задачу нахождения предельной скорости генерации ключа к задаче выпуклой оптимизации — минимизации квантовой относительной энтропии когерентности при линейных ограничениях. В [317] эта задача решается численно, мы же покажем, как её можно решить аналитически. Поскольку этот метод можно применять и к другим постановкам задач в квантовой криптографии, можно говорить о том, что предложен новый метод доказательства подобных теорем.

Основной результат этой главы — теорема 6.1 — сформулирована в общематематических терминах и не зависит от изложения, связанного с квантовой криптографией, в предшествующих разделах. Минимизация квантовой относительной энтропии объединяет эту главу с главой 1, где неадиабатический вклад в производство энтропии также выражался в монотонном невозрастании квантовой относительной энтропии между состоянием, зависящим от времени, и стационарным состоянием. В этой главе речь будет идти о квантовой относительной энтропии между квантовым состоянием, возникающим в ходе протокола квантовой криптографии, и результатом действия на это состояние неселективного измерения одного из регистров. Эта величина имеет физический смысл, о кото-

ром говорится в замечании 6.1.

Затем в разделе 6.8 с помощью полученной аналитической формулы мы обобщим так называемый метод обманных состояний (“decoy-state method”, другой перевод на русский язык — «метод состояний-ловушек») на случай детекторов с несовпадающими эффективностями. Метод обманных состояний устраняет уязвимости в протоколе, возникающие из-за того, что на практике отправитель посылает не единичные фотоны (что сложно реализовать), а когерентные состояния малой интенсивности (слабые когерентные импульсы). В этом случае гильбертово пространство отправителя — не $\mathbb{C}^2$, а бозонное пространство Фока $\mathscr{F}(\mathbb{C}^2)$. Теорема 6.2 сводит ситуацию, когда гильбертово пространство отправителя — $\mathscr{F}(\mathbb{C}^2)$, к однофотонному случаю $\mathbb{C}^2$ и вместе с другими результатами раздела 6.8 и теоремой 6.1 доказывает стойкость протокола и в случае слабых когерентных импульсов. Формула (6.71) даёт предельную скорость генерации ключа в этом случае.

В этой главе мы будем обозначать энтропию фон Неймана $H(\rho)$ (а не $S(\rho)$, как было в главе 1), что более принято в литературе по квантовой криптографии, а также использовать в определении энтропии двоичный логарифм вместо натурального, что, опять же, более естественно в задачах, связанных с квантовой информацией:

$$H(\rho) = -\operatorname{Tr}\rho\log_2\rho.$$

Аналогично переопределим квантовую относительную энтропию, заменив натуральный логарифм на двоичный:

$$D(\rho\|\sigma) = \operatorname{Tr}\rho\log_2\rho - \operatorname{Tr}\rho\log_2\sigma.$$

В дальнейшем мы будем опускать основание логарифма и писать просто $\log$.

Напомним (см. 1.10), что энтропия фон Неймана выражается через собственные значения $\{p_i\}_{i=1}^n$ оператора плотности $\rho$ в пространстве $\mathbb{C}^n$ следующим образом:

$$H(\rho) = -\sum_{i=1}^{n} p_i\log p_i.$$

Выражение совпадает с энтропией Шеннона классической случайной величины, принимающей $n$ значений с вероятностями $\{p_i\}_{i=1}^n$. В двухмерном случае обозначим $p_1 = p$, $p_2 = 1 - p$, тогда выражение для энтропии принимает вид

$$h(p) = -p \log p - (1-p) \log(1-p).$$

Эта функция называется двоичной энтропией.

Введём также соглашение, касающееся обозначений состояния подсистемы составной системы. Пусть дана составная квантовая система $\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B$, находящаяся в состоянии $\rho_{AB}$. Тогда запись, например, $\rho_A$ означает, что рассматривается состояние только первой подсистемы: $\rho_A = \mathrm{Tr}_B\, \rho_{AB}$.

Также в этой главе нам потребуется понятие *квантовой условной энтропии*. Продолжим рассмотрение составной системы, находящейся в состоянии $\rho_{AB}$. Условной энтропией подсистемы $A$ при условии владения подсистемой $B$ называется величина

$$H(A|B) = H(\rho_{AB}) - H(\rho_B) = -D(\rho_{AB} \| I_A \otimes \rho_B), \tag{6.1}$$

где, как мы условились, $\rho_B = \mathrm{Tr}_A\, \rho_{AB}$. Чтобы обозначить, для какого именно составного состояния считается условная энтропия, иногда мы будем писать $H(A|B)_{\rho_{AB}}$ или просто $H(A|B)_\rho$.

Пусть спектральные разложения $\rho_A$, $\rho_B$ и $\rho_{AB}$ имеют вид

$$\rho_A = \sum_i p_i \left|e_i\right\rangle \left\langle e_i\right|, \quad \rho_B = \sum_j q_j \left|h_j\right\rangle \left\langle h_j\right|,$$
$$\rho_{AB} = \sum_{ij} r_{ij} \left|e_i\right\rangle \left\langle e_i\right| \otimes \left|h_j\right\rangle \left\langle h_j\right|,$$

где $\{|e_i\rangle\}$ и $\{|h_j\rangle\}$ — ортонормированные базисы в соответствующих пространствах, $p_i = \sum_j r_{ij}$, $q_j = \sum_i r_{ij}$. Тогда квантовая условная энтропия сводится к выражению для классической условной энтропии с совместным распределением двух случайных величин $\{r_{ij}\}$ и частичными распределениями $\{p_i\}$ и $\{q_j\}$:

$$H(A|B) = \sum_{ij} r_{ij} \log \frac{q_j}{r_{ij}}. \tag{6.2}$$

Состояние $\rho_{AB}$ называется классически-квантовым, если оно имеет вид

$$\rho_{AB} = \sum_i p_i \left|e_i\right\rangle \left\langle e_i\right| \otimes \rho_B^{(i)}.$$

Для классически-квантового состояния имеет место $H(A|B) \geqslant 0$ (в общем случае это не так).

Также в этом разделе мы будем иногда расширительно толковать понятие квантового канала: некоторые квантовые каналы вместо условия сохранения следа будут удовлетворять более общему условию неувеличения следа, т.е. $\operatorname{Tr}\Phi(\rho) \leqslant \operatorname{Tr}\rho$. Уменьшение следа будет происходить при отбрасывании части результатов измерений. Примером такого квантового канала является проецирование на некоторое подпространство: $\rho \mapsto P\rho P$, где $P$ — проектор. Подобные квантовые каналы часто рассматриваются в работах по квантовой криптографии. Результат применения такого канала к квантовому состоянию, т.е. положительный оператор со следом, меньшим единицы, мы также будем иногда называть квантовым состоянием.

## 6.2 Протокол BB84 при несовпадающих эффективностях детекторов

Этот раздел посвящён описанию модели измерений при детекторах с разными эффективностями и описанию протокола BB84. Сторону связи, которая отправляет квантовые состояния, будем называть «отправителем», приёмную сторону — «получателем». Их вместе мы будем называть «легитимными сторонами». Прослушивающую сторону назовём «противником».

До раздела 6.8 мы предполагаем, что отправляемые по каналу состояния — однофотонные. Тогда информация кодируется в некоторую двоичную переменную, относящуюся к состоянию единичного фотона, например (что для определённости и будем предполагать), в поляризацию фотона. Гильбертово пространства отправителя тогда — $\mathscr{H}_A = \mathbb{C}^2$. В протоколе используются два ортонормированных базиса этого пространства: стандартный ($z$-базис) $\{\left|0\right\rangle, \left|1\right\rangle\}$ и базис

Адамара ($x$-базис) $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, $|\pm\rangle = (|0\rangle \pm |1\rangle)/\sqrt{2}$. В каждом базисе первый элемент кодирует классический бит 0, другой — классический бит 1. Векторы $|0\rangle$ и $|1\rangle$ могут соответствовать, например, горизонтальной и вертикальной поляризациям, $|+\rangle$ и $|-\rangle$ — двум диагональным поляризациям, повёрнутым относительно горизонтального направления на 45 и 135 градусов соответственно.

Получатель измеряет сигналы в бесконечномерном фоковском пространстве $\mathscr{F}(\mathbb{C}^2)$ без ограничений на количество фотонов. Противник может использовать это для проведения атаки: может послать такое количество фотонов, какое пожелает. Анализ стойкости с бесконечномерным пространством получателя сложен. Если детекторы имеют одинаковую эффективность, то существует методика сведения бесконечномерного пространства к двухмерному. В англоязычной литературе она называется “squashing model” [175], что можно перевести как «модель редукции». Однако для детекторов с неравными эффективностями модели редукции не существует, что делает необходимым явное рассмотрение бесконечномерного пространства получателя. В данной работе (как и в [168, 317]) мы вводим дополнительное ограничение на действия противника: предполагаем, что он может посылать получателю не более одного фотона. Это делает гильбертово пространство получателя трёхмерным: $\mathscr{H}_B = \mathbb{C}^3$, натянутым на вектора $|0\rangle, |1\rangle$ и $|\mathrm{vac}\rangle$ (вакуумный вектор, соответствующий тому, что получатель не получил фотон вследствие естественных потерь в канале связи или действий противника).

Для того чтобы обеспечить выполнение указанного дополнительного предположения, можно использовать технику обманных состояний на приёмной стороне [247], когда получатель в некоторых случаях ослабляет входящий сигнал и обнаруживает тем самым манипуляции противника с количеством фотонов.

Для измерения поляризации фотона получатель использует однофотонные детекторы. При так называемом активном выбор базиса, который мы и будем рассматривать, приёмная сторона использует два детектора, один из которых регистрирует состояния, кодирующие бит 0, другой — бит 1. Существуют также реализации с пассивным выбором базиса, в котором используются четыре де-

тектора (для каждого базиса — своя пара детекторов).

В идеале детектор должен срабатывать, если в него попадает по крайней мере один фотон. Но в реальности срабатывание происходит в этом случае только с некоторой вероятностью $0 < \eta < 1$, которая и называется квантовой эффективностью детектора. В большинстве практических систем квантового распределения ключей используются однофотонные детекторы, основанные на лавинных фотодиодах, с типичным значением квантовой эффективности порядка $0.1$. Существуют детекторы с эффективностью $\eta \approx 0.9$, основанные на сверхпроводниках, но они требуют криогенных температур для своего функционирования.

Если оба детектора имеют одинаковую эффективность $\eta$, то несрабатывание детекторов в $1 - \eta$ доли случаев можно присоединить к потерям в канале, так что стандартные доказательства стойкости по-прежнему применимы. Однако на практике практически невозможно изготовить два детектора с абсолютно одинаковыми эффективностями. Это влияет на стойкость реализации протокола, ведь несовпадение эффективностей означает, что, например, нули регистрируются несколько чаще единиц, что уже даёт постороннему человеку даже без осуществления прослушивания некоторую априорную информацию о ключе. В предельном случае $\eta_0 = 1$, $\eta_1 = 0$ ключ, разумеется, становится полностью ненадёжным, потому что регистрируются только нули. При неравных эффективностях стандартные доказательства стойкости неприменимы.

Обозначим квантовые эффективности детекторов, регистрирующих нули и единицы, через $\eta_0$ и $\eta_1 \neq \eta_0$ соответственно. Пусть для определённости $1 \geqslant \eta_0 > \eta_1 > 0$. Тогда эффективности детекторов можно перенормировать как $\eta_0' = 1$ и $\eta_1' = \eta = \eta_1/\eta_0$, а общий множитель $\eta_0$ присоединить к коэффициенту пропускания линии связи $t$ (т.е. заменить $t$ на $t\eta_0$). Возможность такой замены строго обоснована в [324]. Таким образом, один детектор можно считать идеальным (с эффективностью единица), второй имеет эффективность $\eta$. Параметр $\eta$, который и выражает степень различия эффективностей детекторов, предполагается постоянным и известным как легитимным сторонам связи, так и противнику.

Измерение с одним неидеальным детектором в пространстве получателя $\mathbb{C}^3$ может быть описано как действие затухания на одно из состояний с последующим измерением, соответствующим двум идеальным детекторам.

Измерению в базисе $z$ с двумя идеальными детекторами соответствует вероятностная проекторнозначная мера $\{P^B_{z,b} = |b\rangle\langle b|\}_{b=0,1,\mathrm{vac}}$. Вероятность получения результата $b \in \{0, 1, \mathrm{vac}\}$ (срабатывания детектора 0, срабатывания детектора 1 и несрабатывания ни одного из детекторов соответственно), если подсистема получателя находилась до измерения в состоянии $\rho_B$, а детектор 1 имеет эффективность $\eta$, равна

$$\operatorname{Tr} P^B_{z,b}\mathscr{D}_z(\rho_B) = \operatorname{Tr} \mathscr{D}^*_z(P^B_{z,b})\rho_B, \tag{6.3}$$

где $\mathscr{D}_z$ — канал, описывающий затухание состояния $|1\rangle$:

$$\mathscr{D}_z(\rho_B) = D_{z,0}\rho_B D^\dagger_{z,0} + D_{z,1}\rho_B D^\dagger_{z,1},$$

где

$$D_{z,0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\eta} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| + \sqrt{\eta}\,|1\rangle\langle 1| + |\mathrm{vac}\rangle\langle \mathrm{vac}|,$$

$$D_{z,1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\eta} & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{1-\eta}\,|\mathrm{vac}\rangle\langle 1|,$$

$\mathscr{D}^*_z$ — сопряжённый канал (канал в пространстве наблюдаемых), см. (1.4) и (1.5).

Аналогично, измерению в базисе $x$ с двумя идеальными детекторами соответствует вероятностная проекторнозначная мера $\{P^B_{x,0} = |+\rangle\langle +|, P^B_{x,1} = |-\rangle\langle -|, P^B_{x,\mathrm{vac}} = |\mathrm{vac}\rangle\langle \mathrm{vac}|\}$. Вероятность получения результата $b \in \{0, 1, \mathrm{vac}\}$, если детектор 1 имеет эффективность $\eta$, равна

$$\operatorname{Tr} P^B_{x,b}\mathscr{D}_x(\rho_B) = \operatorname{Tr} \mathscr{D}^*_x(P^B_{x,b})\rho_B, \tag{6.4}$$

где $\mathscr{D}_x$ и $\mathscr{D}^*_x$ — канал (в картине Шрёдингера и в картине Гейзенберга соответ-

ственно), описывающий затухание состояния $|-\rangle$:

$$\mathscr{D}_x(\rho_B) = D_{x,0}\rho_B D_{x,0}^\dagger + D_{x,1}\rho_B D_{x,1}^\dagger,$$

где $D_{x,b} = HD_{z,b}H$ $(b = 0, 1)$,

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

— преобразование Адамара в двухмерном подпространстве, натянутом на векторы $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Здесь и далее матрицы линейных операторов выписываются в стандартном базисе $\{|0\rangle, |1\rangle, |\mathrm{vac}\rangle\}$.

Теперь опишем протокол BB84.

1. Отправитель генерирует случайное, с равными вероятностями $(1/2, 1/2)$, значение бита $a \in \{0, 1\}$.
2. Отправитель случайным образом, с вероятностями $(p_z, p_x = 1 - p_z)$, выбирает базис: $z$ или $x$. Мы предполагаем, что $p_z \approx 1$, $p_x \approx 0$. Только $z$-базис используется для генерации ключа, тогда как $x$-базис используется только для обнаружения прослушивания.
3. Получатель также выбирает базис для измерения: $z$ или $x$, также с вероятностями $(p_z, p_x = 1 - p_z)$, независимо от отправителя.
4. Отправитель посылает фотон в состоянии, зависящем от базиса и значения бита $a$: если $a = 0$, то посылается фотон в состоянии $|0\rangle$ или $|+\rangle$ в зависимости от выбранного базиса, если $a = 1$, то посылается фотон в состоянии $|1\rangle$ или $|-\rangle$. Получатель измеряет этот фотон в выбранном базисе и, если хотя бы один детектор сработал, получает значение бита $b$.
5. Стороны повторяют шаги 1–3 большое количество раз $N$. Вероятностный выбор бита отправителем и базисов обеими сторонами осуществляется в каждой позиции независимо. В результате легитимные стороны получают двоичные строки, называемые *сырыми ключами*.

6. *Раскрытие информации.* Получатель объявляет номера позиций, в которых у него сработал хотя бы один из детекторов, по открытому аутентифицированному каналу. Далее стороны объявляют базисы, которые они использовали, а также значения битов для позиций, в которых обе стороны использовали базис $x$. «Открытый аутентифицированный канал» означает, что сообщения, передаваемые по этому каналу, противник может свободно слушать, но не может изменять сообщения, передаваемые по этому каналу, а также посылать свои. На практике аутентификация канала осуществляется сторонами при помощи так называемых кодов аутентификации сообщений. Коды аутентификации сообщений с безусловной стойкостью существуют и требуют для своей работы, чтобы стороны имели перед началом протокола короткий общий секретный ключ.
7. *Просеивание.* Стороны сохраняют позиции в сырых ключах, в которых обе стороны использовали базис $z$ и у получателя сработал хотя бы один из детекторов. Остальные позиции отбрасываются. Получившиеся ключи называются *просеянными ключами*. Итак, позиции, в которых хотя бы одна из сторон выбрала $x$-базис, не участвуют в генерации ключа. Но они участвуют в оценке степени вмешательства противника.
8. *Исправление ошибок.* Вследствие естественных ошибок и действий противника просеянные ключи отправителя и получателя могут различаться. Отправитель отправляет получателю по открытому каналу синдром (информацию специального вида) для исправления ошибок, получатель исправляет ошибки и получает ключ, идентичный с ключом отправителя. Но противник всё ещё может иметь некоторое количество информацию об этом ключе, которое на этом этапе только увеличивается, поскольку противнику также становится известным синдром.
9. *Оценка степени вмешательства противника.* Стороны анализируют объявленные данные и оценивают количество информации, которое потенциально может иметь противник о просеянном ключе отправителя. В основе квантовой криптографии лежит тот факт, что информацию, закодирован-

ную в неортогональные квантовые состояния, невозможно прочитать третьей стороне (которая не знает, в каком базисе закодирован бит ключа в данной позиции), не «испортив» эти состояния. Изменение состояний в результате вмешательства противника будет вести к повышению уровня ошибок у легитимных сторон, т.е. несовпадающих позиций в просеянных ключах. Количество информации о просеянном ключе у противника оценивается главным образом по уровню ошибок в $x$-базисе. Напомним, биты, закодированные в $x$-базисе, открыто объявляются. Если уровень ошибок в $x$-базисе и, соответственно, количество информации у противника больше определённого порога, при котором создание секретного ключа становится невозможным, то протокол прерывается. В противном случае стороны переходят к последнему шагу. Таким образом, в квантовой криптографии невозможно осуществить прослушивание, оставшись незамеченным.

10. *Усиление секретности* (перевод с английского “privacy amplification”). Отправитель случайным образом генерирует так называемую хеш-функцию из некоторого семейства универсальных хеш-функций 2-го порядка и отправляет её получателю по открытому каналу. Затем оба вычисляют значение хеш-функции на своих (одинаковых) просеянных ключах. В результате они получают общий более короткий ключ (*конечный ключ*, *секретный ключ*), но информация противника о котором очень мала (при достаточно больших $N$ может быть сделана сколь угодно малой).

Полученный ключ можно использовать для шифрования секретных сообщений (уже в рамках обычной, классической криптографии) или в любых других криптографических задачах. Таким образом, ключевым свойством квантовой криптографии является то, что попытка перехвата обнаруживается ещё до передачи секретных сведений.

Формально передача квантовых состояний по физическому каналу связи описывается как действие математического квантового канала: $\rho_B = \Lambda(\rho_A)$, где $\Lambda\colon \mathfrak{S}(\mathscr{H}_A) \to \mathfrak{S}(\mathscr{H}_B)$ — квантовый канал в смысл определения, данного в разделе 1.1. Напомним, в данном случае $\mathscr{H}_A = \mathbb{C}^2$, $\mathscr{H}_B = \mathbb{C}^3$. В естественных

условиях (т.е. в отсутствие перехвата) шум и потери в канале описываются при помощи деполяризующего кубитного канала с потерями:

$$\Lambda\colon \mathfrak{S}(\mathbb{C}^2) \to \mathfrak{S}(\mathbb{C}^3), \quad \Lambda(\rho_A) = \mathscr{D}(\mathscr{E}(\rho_A)), \tag{6.5}$$

$$\mathscr{E}\colon \mathfrak{S}(\mathbb{C}^2) \to \mathfrak{S}(\mathbb{C}^2), \quad \mathscr{E}(\rho_A) = (1-2Q)\rho_A + 2Q(I_2/2), \tag{6.6}$$

$$\mathscr{D}\colon \mathfrak{S}(\mathbb{C}^2) \to \mathfrak{S}(\mathbb{C}^3), \quad \mathscr{D}(\rho_A) = D_0\rho_A D_0^\dagger + D_1\rho_A D_1^\dagger + D_2\rho_A D_2^\dagger, \tag{6.7}$$

где

$$D_0 = \begin{pmatrix} \sqrt{t} & 0 \\ 0 & \sqrt{t} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{t}\,(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|),$$

$$D_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ \sqrt{1-t} & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{1-t}\,|\mathrm{vac}\rangle\langle 0|\,,$$

$$D_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-t} \end{pmatrix} = \sqrt{1-t}\,|\mathrm{vac}\rangle\langle 1|\,,$$

$Q$ — коэффициент ошибок, а $t$ — пропускание линии связи ($1-t$ — коэффициент потерь). На языке вероятностей $t$ — вероятность того, что фотон дойдёт до измерительного прибора получателя, $Q$ — вероятность возникновения ошибки в передаваемом состоянии, т.е. замены $|0\rangle$ на $|1\rangle$, $|+\rangle$ на $|-\rangle$ и наоборот. $\mathscr{E}$ называется деполяризующим каналом с параметром $2Q$.

Роль противника состоит в том, что он контролирует канал, т.е. может заменить канал (6.5)–(6.7) на свой собственный. Это означает, что канал $\Lambda$ легитимным сторонам неизвестен. Более того, противник может отводить часть информации себе, поэтому правильнее говорить о «расширенном» квантовом канале

$$\widetilde{\Lambda} : \mathfrak{S}(\mathscr{H}_A) \to \mathfrak{S}(\mathscr{H}_B \otimes \mathscr{H}_E), \tag{6.8}$$

где $\mathscr{H}_E$ — гильбертово пространство системы противника (размерности, также

априори неизвестной легитимным сторонам), причём

$$\mathrm{Tr}_E \widetilde{\Lambda}(\rho_A) = \Lambda(\rho_A)$$

для любого $\rho_A \in \mathscr{H}_A$. Отметим, что общепринятое обозначение индекса, относящегося к противнику, буквой $E$ связано с английским словом “eavesdropper” — «подслушиватель».

## 6.3 Эквивалентная формулировка протокола BB84 в терминах сцепленных состояний

Мы только что описали реализацию протокола BB84, в котором одна сторона отправляет квантовые состояния, а другая принимает их. Общепринятый математический приём состоит в переходе к эквивалентной формулировке протокола, основанной на сцепленных (“entangled”, другие распространённые переводы — «зацепленных», «запутанных») состояниях. В этой версии протокол формулируется так, как если бы между отправителем и получателем находился источник сцепленных состояний.

А именно, случайная генерация отправителем бита и базиса и приготовление соответствующего состояния могут быть эквивалентно представлены как приготовление сцепленного состояния

$$\rho_{AA'} = |\Phi\rangle_{AA'} \langle\Phi| , \tag{6.9}$$

где

$$|\Phi\rangle_{AA'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A \otimes |0\rangle_{A'} + |1\rangle_A \otimes |1\rangle_{A'}),$$

в пространстве $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ (подсистеме $A'$ соответствует гильбертово пространство $\mathscr{H}_{A'}$, изоморфное $\mathscr{H}_A$, т.е. тоже $\mathbb{C}^2$), последующее измерение подсистемы $A$ в базисе $z$ с вероятностью $p_z$ и в базисе $x$ с вероятностью $p_z$ и отправкой подсистемы $A'$ получателю. Вероятностные операторнозначные меры, соответствующие из-

мерениям в каждом из этих двух базисов имеют следующий вид:

$$P^A_{z,0} = |0\rangle\langle 0|\,, \qquad P^A_{z,1} = |1\rangle\langle 1|\,,$$
$$P^A_{x,0} = |+\rangle\langle +|\,, \quad P^A_{x,1} = |-\rangle\langle -|\,.$$

Здесь первая строчка задаёт вероятностную операторнозначную меру, соответствующую измерению в $z$-базисе, вторая строчка — в $x$-базисе. Второй нижний индекс обозначает исход измерения: 0 и 1. Поскольку это измерение не происходит в реальности, а вводится только как математический приём, оно соответствует детекторам с эффективностью единица, поэтому подсистема $A$ при измерении не подвергается предварительному затуханию.

Такая процедура математически эквивалентна вероятностной схеме приготовления состояний отправителем, описанной в предыдущем разделе: параметры $p_z$ и $p_x$ по-прежнему определяют выбор базиса, а внутри каждого базиса вероятности исходов при состоянии (6.9) равны 1/2. При проведении измерения в базисе $z$ и получении результатов 0 и 1 состояние системы $AA'$ меняется на $|0\rangle \otimes |0\rangle$ и $|1\rangle \otimes |1\rangle$ соответственно. При проведении измерения в базисе $z$ состояние системы $AA'$ меняется на $|+\rangle \otimes |+\rangle$ и $|-\rangle \otimes |-\rangle$ соответственно. Подсистема $A'$ отправляется по квантовому каналу. Мы видим, что отправляются те же состояния с теми же вероятностями, а результат измерения отправителем подсистемы $A$ содержит информацию о том, какое именно состояние отправлено.

Можно представлять себе, что источник сцепленных состояний находится в лаборатории отправителя. Тогда, если лабораторию отправителя воспринимать как «чёрный ящик», то неважно, как именно внутри него происходит приготовление состояния: измерение подсистемы, находящейся в сцепленном состоянии с другой подсистемой — это один из способов приготовления состояния для отправки.

Состояние $A'$ подвергается действию квантового канала $\Lambda$ или $\widetilde{\Lambda}$, о которых шла речь в конце предыдущего раздела. Следующий шаг рассуждений состоит в том, что для получателя и противника совершенно неважно, в какой именно момент отправитель проведёт измерение своей подсистемы $A$: до или после от-

правки системы $A'$ по каналу, до или после того, как свою подсистему измерит получатель. То есть неважно, в какой именно момент происходит редукция состояния, описанная выше, поскольку подсистема $A$ не взаимодействует с подсистемой $A'$ после генерации состояния (6.9). Допустим, что отправитель измеряет свою подсистему уже после получения подсистем $B$ и $E$ получателем и противником. Тогда мы можем говорить о том о трёхчастичном квантовом состоянии

$$\rho_{ABE} = (\mathrm{Id}_A \otimes \widetilde{\Lambda})(|\Phi\rangle\langle\Phi|), \tag{6.10}$$

которое разделяют отправитель, получатель и противник непосредственно перед измерениями отправителя и получателя. Здесь $\mathrm{Id}_A$ — тождественный канал в подсистеме $A$, т.е. $\mathrm{Id}_A(\rho_A) = \rho_A$, $\widetilde{\Lambda}\colon \mathfrak{S}(\mathscr{H}_{A'}) \to \mathfrak{S}(\mathscr{H}_B \otimes \mathscr{H}_E)$.

Выбор противником канала $\widetilde{\Lambda}$ эквивалентен тогда выбору им состояния $\rho_{ABE}$, но с фиксированным $\rho_A = \mathrm{Tr}_{BE}\,\rho_{ABE}$. В случае (6.9) $\rho_A = I_2/2$.

Итак новой формулировке протокола шаги 1 и 4 протокола, приведённого выше, изменяются следующим образом:

1′. Источник состояний генерирует состояние $\rho_{ABE}$ в пространстве $\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B \otimes \mathscr{H}_E$ и посылает подсистему $A$ отправителю, подсистему $B$ — получателю, а подсистему $E$ — противнику.

4′. Отправитель и получатель выполняют измерение своих подсистем в выбранном базисе.

## 6.4 Скорость генерации секретного ключа

Неформально говоря, скорость генерации секретного ключа определяется как отношение длины конечного ключа к количеству посылок $N$ при $N \to \infty$. Для того чтобы дать формальное определение, нам необходимо формально описать преобразования трёхчастичного состояния $\rho_{ABE}$. Преобразования осуществляют легитимные стороны, поэтому временно будем рассматривать состояние только подсистем легитимных сторон: $\rho_{AB} = \mathrm{Tr}_E\,\rho_{ABE}$.

Рассмотрим модель измерения, которая включает регистры (формально — дополнительные квантовые подсистемы), куда записываются результаты изме-

рения каждой из сторон (см. (1.7)–(1.8)). Обозначим эти регистры $\overline{A}$ (двухмерный) и $\overline{B}$ (трёхмерный). Тогда, если обе стороны проводят измерение в $z$-базисе (только такие позиции участвуют в генерации ключа), то квантовое состояние преобразуется следующим образом:

$$\rho_{AB} \mapsto (M_A \otimes M_B)\mathscr{D}_z(\rho_{AB})(M_A \otimes M_B)^\dagger = \rho^{(2)}_{A\overline{A}B\overline{B}},$$

где

$$M_A = \sum_{a\in\{0,1\}} P^A_{z,a} \otimes |a\rangle_{\overline{A}}\,, \qquad M_B = \sum_{b\in\{0,1,\mathrm{vac}\}} P^B_{z,b} \otimes |b\rangle_{\overline{B}}\,.$$

В генерации ключа участвуют только те позиции, в которых у получателя сработал один из детекторов. Позиции, в которых не произошло срабатывание ни одного из детекторов, отбрасываются. Это соответствует действию проектора

$$\Pi' = I_{A\overline{A}B} \otimes (|0\rangle_{\overline{B}}\langle 0| + |1\rangle_{\overline{B}}\langle 1|),$$

где $I_{A\overline{A}B}$ — тождественный оператор в пространствах регистров $A$, $\overline{A}$ и $B$, т.е. в пространстве $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$,

$$\begin{aligned}\rho^{(2)}_{A\overline{A}B\overline{B}} \mapsto \frac{1}{p_{\mathrm{det}}}\Pi'\rho^{(2)}_{A\overline{A}B\overline{B}}\Pi' = \\ = \frac{1}{p_{\mathrm{det}}}\Pi'(M_A \otimes M_B)\mathscr{D}_z(\rho_{AB})(M_A \otimes M_B)^\dagger\Pi' = \rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}},\end{aligned}$$

где $p_{\mathrm{det}} = \operatorname{Tr}\Pi'\rho^{(2)}_{A\overline{A}B\overline{B}}$ есть вероятность срабатывания детектора для данной позиции. Легко видеть, что $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}}$ можно также представить в виде

$$\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}} = \frac{1}{p_{\mathrm{det}}}(M_A \otimes M_B)\Pi\mathscr{D}_z(\rho_{AB})\Pi(M_A \otimes M_B)^\dagger, \tag{6.11}$$

где

$$\Pi = I_A \otimes (|0\rangle_B\langle 0| + |1\rangle_B\langle 1|)$$

— проектор в пространстве $\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^3$. Величину $p_{\mathrm{det}}$ можно эквивалентно выразить как

$$p_{\mathrm{det}} = \operatorname{Tr}\Pi\mathscr{D}_z(\rho_{AB}) = \operatorname{Tr}\mathscr{D}^*_z(\Pi)\rho_{AB}. \tag{6.12}$$

Мы ограничим наш анализ случаем, когда противник приготавливает $N$ одинаковых копий $\rho_{ABE}$. Общий случай можно свести к этому частному случаю при помощи техники накопления энтропии [154].

Будем рассматривать асимптотический случай бесконечно большого количества квантовых посылок $N \to \infty$. В этом пределе вероятность выбора $x$-базиса $p_x$ можно сделать бесконечно малой: $x$-базис не участвует в генерации секретного ключа, он нужен только для получения статистических оценок, которые возникнут далее. В пределе бесконечного количества квантовых состояний сколь угодно малая их доля достаточна, чтобы собрать надёжную статистику. Поэтому в дальнейшем мы положим $p_z = 1$ и $p_x = 0$.

По закону больших чисел в пределе $N \to \infty$ получатель регистрирует $n = p_{\text{det}} N$ посылок. То есть между сторонами возникает состояние $(\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}E})^{\otimes n}$, где $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}E}$ получается из $\rho_{ABE}$ применением преобразования (6.11) к подсистеме $AB$ и тождественного преобразования к подсистеме $E$. Обозначим двоичные строки длины $n$, складывающиеся из регистров $\overline{A}$ и $\overline{B}$ в каждой зарегистрированной посылке, через $\overline{A}^n$ и $\overline{B}^n$.

Дальнейшие шаги протокола, связанные с классическими операциями и общением сторон по классическому каналу (исправление ошибок и усиление секретности) также может быть описано на языке квантовых каналов. Подробное формальное описание можно найти в [300]. В результате получается квантовое состояние вида

$$\rho^{(\text{fin})}_{KK'ESH} = \sum_{k,k' \in \{0,1\}^l} p_{kk'} \left|k\right\rangle_K \left\langle k\right| \otimes \left|k'\right\rangle_{K'} \left\langle k'\right| \otimes \rho^{(k,k')}_{EST}. \tag{6.13}$$

Здесь $K$ и $K'$ — классические регистры размерности $2^l$, в которых записаны конечные ключи отправителя и получателя соответственно, $l \geqslant 0$ — длина конечного ключа. Нулевая длина ключа $l = 0$ означает отказ от распределения ключей, формально — регистры размерности единицы, т.е. регистры с фиксированной информацией (об отказе от распределения ключей). $K$ — функция от $\overline{A}^n$ и хеш-функции $T$, используемой в усилении секретности (выбирается случайным образом непосредственно перед её использованием и объявляется по открытому каналу), $K'$ — функция $\overline{B}^n$, синдрома для исправления ошибок $S$ (двоичной строки некоторой длины $m$, на квантовом языке — регистр размерности $2^m$), который посылает отправитель получателю, и той же хеш-функции $T$. Также в состоянии

(6.13) участвует регистр подсистемы противника $E$. По регистрам $\overline{A}^n$ и $\overline{B}^n$ взят след. Тогда назовём протокол исправления ошибок и усиления секретности (при фиксированном $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}}$) $(n, l, \varepsilon)$-протоколом, если

$$\frac{1}{2}\|\rho^{(\mathrm{fin})}_{KK'ESH} - \rho^{(\mathrm{ideal})}_{KK'ESH}\|_1 \leqslant \varepsilon, \tag{6.14}$$

где

$$\rho^{(\mathrm{ideal})}_{KK'ESH} = 2^{-l} \sum_{k\in\{0,1\}^l} |k\rangle_K \langle k| \otimes |k\rangle_{K'} \langle k| \otimes \rho_{ESH},$$

$\rho_{ESH} = \mathrm{Tr}_{KK'}\, \rho^{(\mathrm{fin})}_{KK'ESH}$, а $\|\sigma\|_1 = \mathrm{Tr}\,\sqrt{\sigma\sigma^\dagger}$ — следовая норма произвольного оператора $\sigma$. Её также можно выразить как сумму модулей собственных значений $\sigma$. Величина $\frac{1}{2}\|\sigma - \sigma'\|_1$ называется следовым расстоянием между двумя состояниями $\sigma$ и $\sigma'$. Состояние $\rho^{(\mathrm{ideal})}$ соответствует идеальной ситуации, когда ключи отправителя и получателя совпадают с вероятностью единица, равномерно распределены и состояние противника (регистр $E$ и все регистры с информацией, объявленной в ходе протокола по открытому каналу) не коррелирует с ключом, т.е. противник не имеет о ключе никакой информации. Выражение, стоящее в левой части (6.14) представляет собой расстояние между реальным получившимся в ходе протокола состоянием и идеальным.

Причины, почему именно эта мера степени секретности, т.е. связанная со следовым расстоянием до идеального состояния, оказывается наиболее подходящей, изложены, например, в [266]. Кратко говоря, эта мера является *универсально компонуемой* (“universally composable”), т.е. применимой в любом контексте. Неидеальная секретность ключа, выражаемая неравенством (6.14), повышает вероятность взлома криптографического протокола, в котором этот ключ будет использоваться (протокола-приложения), например, протокола передачи зашифрованного при помощи этого ключа секретного сообщения. При этом протокол-приложение также может быть неидеальным. Другие меры секретности ключа (например, основанные на количестве информации по Шеннону) приводят к тому, что совмещение двух небольших неидеальностей может приводить к полной компрометации протокола-приложения. Мера же, основанная на следовой норме, и неравенство (6.14) гарантируют, что, каков бы ни был протокол-приложение,

вероятность его успешного взлома повышается вследствие неидеальности ключа не более, чем на $\varepsilon$.

Число $R$ назовём *достижимой скоростью генерации секретного ключа для состояния* $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}E}$, если существует такое семейство $(n, l_n, \varepsilon_n)$-протоколов, зависящих от $n$, что $\varepsilon_n \to 0$ и $p_{\mathrm{det}} l_n/n \to R$ при $n \to \infty$. Точную верхнюю грань достижимых скоростей назовём *предельной* (или *предельно достижимой*) *скоростью генерации секретного ключа для состояния* $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}E}$. По теореме И. Деветака (I. Devetak) и А. Винтера (A. Winter) [147] предельная скорость генерации секретного ключа для состояния $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}E}$ равна

$$R = p_{\mathrm{det}} \left[ H(\overline{A}|E)_{\rho^{(3)}} - H(\overline{A}|\overline{B})_{\rho^{(3)}} \right], \tag{6.15}$$

где энтропии, как указывает нижний индекс, рассчитываются для состояния $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}E}$. Первое слагаемое в квадратных скобках характеризует *степень незнания*, или *нехватку информации* противника о бите ключа отправителя, второе слагаемое — степень незнания (нехватку информации) получателя о том же бите. Второе слагаемое также связано с минимальной длиной синдрома, который отправитель должен отправить получателю для того, чтобы последний смог исправить все ошибки и получить ключ, совпадающий с ключом отправителя. А именно, второе слагаемое — это отношение минимальной длины синдрома к $n$ в пределе $n \to \infty$. Мы предполагаем, что используется оптимальный (по Шеннону) код исправления ошибок. В противном случае перед вторым слагаемым необходимо добавить множитель $f > 1$. Так, например, значение множителя $f = 1.22$ достижимо для современных кодов, исправляющих ошибки.

Второе слагаемое в правой части (6.15) ограничено сверху величиной $h(Q_z)$, где $Q_z$ — доля ошибок в $z$-базисе (в англоязычной литературе — QBER — “quantum bit error rate” — «квантовая доля двоичных ошибок»). Отметим, что вследствие неравенства эффективностей детекторов классический канал от $\overline{A}$ к $\overline{B}$ — несимметричный двоичный канал. Тем не менее, в нашем случае второй член можно взять равным $h(Q_z)$, см. раздел 6.7 ниже.

Поскольку легитимные стороны знают, синдром какой длины они использовали, второе слагаемое в правой части (6.15) легитимным сторонам известно. Но

первое слагаемое — степень незнания противника — непосредственно легитимным сторонам не дано. Поэтому они должны оценить его снизу, т.е. в предположении наихудшего для них случая минимально возможной степени незнания противника. Согласно [136, теорема 1],

$$H(\overline{A}|E)_{\rho^{(3)}} = p_{\mathrm{det}}^{-1} D\big(\mathscr{G}(\rho_{AB}) \| \mathscr{Z}(\mathscr{G}(\rho_{AB}))\big), \tag{6.16}$$

где

$$\begin{aligned}
&\mathscr{G}(\rho_{AB}) = \Pi \mathscr{D}_z(\rho_{AB})\Pi = G\rho_{AB}G,\\
&G = I_A \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\eta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = I_A \otimes (|0\rangle\langle 0| + \sqrt{\eta}\,|1\rangle\langle 1|),\\
&\mathscr{Z}(\rho_{AB}) = \sum_{a\in\{0,1\}} (|a\rangle_A \langle a| \otimes I_B)\,\rho_{AB}\,(|a\rangle_A \langle a| \otimes I_B),\\
&p_{\mathrm{det}} = \mathrm{Tr}\,\mathscr{G}(\rho_{AB}) = \mathrm{Tr}\,\mathscr{Z}(\mathscr{G}(\rho_{AB})).
\end{aligned} \tag{6.17}$$

Как видим, $\mathscr{G}$ — преобразование квантового состояния, выражающее затухание при измерении в базисе $z$ (без самого измерения) и отсеивание вакуумной компоненты после этого, $\mathscr{Z}$ — канал, соответствующий неселективному измерению регистра $A$ в базисе $z$. Здесь $D(\sigma\|\tau)$ — квантовая относительная энтропия. Преимущество формулы (6.16) по сравнению с (6.15) состоит в том, что она не задействует дополнительную подсистему $E$ неизвестной размерности.

**Замечание 6.1.** Отметим, что поскольку канал $\mathscr{Z}$ осуществляет частичную декогеренцию, величина (6.16) представляет собой обобщение меры когерентности, предложенной в [113], которая называется относительной энтропией когерентности. Она показывает расстояние между квантовым состоянием $\mathscr{G}(\rho_{AB})$, возникающим в результате работы протокола квантового распределения ключей, и его «частично классическим» аналогом. Таким образом, в квантовой криптографии степень незнания противника — это «степень квантовости» распределённого между легитимными сторонами квантового состояния.

Состояние $\rho_{AB}$ выбирается противником и, следовательно, неизвестно легитимным сторонам. *Предельной (предельно достижимой) скоростью генерации*

*секретного ключа* называется минимальное значение предельной скорости генерации секретного ключа для состояния $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}E}$ по всем состояниям $\rho_{AB}$ (от которого состояние $\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}E}$ зависит как от аргумента).

Итак, легитимные стороны должны минимизировать величину (6.16) по всем возможным квантовым состояниям на $\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B$, удовлетворяющим определённому множеству ограничений. Мы получаем следующую задачу оптимизации:

$$\min_{\rho_{AB}\in\mathbf{S}} D\big(\mathscr{G}(\rho_{AB})\|\mathscr{Z}(\mathscr{G}(\rho_{AB}))\big), \tag{6.18}$$

$$\mathbf{S} = \{\rho \geqslant 0 \text{ на } \mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B \parallel \operatorname{Tr}\Gamma_i\rho = \gamma_i \text{ для всех } i\}. \tag{6.19}$$

Тогда, исходя из (6.15) и (6.16), предельная скорость генерации секретного ключа равна

$$R = \min_{\rho_{AB}\in\mathbf{S}} D\big(\mathscr{G}(\rho_{AB})\|\mathscr{Z}(\mathscr{G}(\rho_{AB}))\big) - p_{\mathrm{det}}h(Q_z). \tag{6.20}$$

Операторы $\Gamma_i$ задают ограничения. В первую очередь, поскольку оператор плотности должен иметь единичный след, то $\Gamma_i = I_A\otimes I_B$ и $\gamma_i = 1$ (для некоторого $i$) соответствует ограничению на след. Другие ограничения связаны со статистикой регистраций, наблюдаемой легитимными сторонами. Мы будем использовать не все возможные ограничения, а только следующие три (выбор именно этих ограничений будет объяснён ниже в замечании 6.2):

- Вероятность срабатывания детектора 0 при измерении в $z$-базисе (см. (6.3)), соответствует оператору

$$\Gamma_0 = I_A \otimes \mathscr{D}_z^*(P^B_{z,0}) = I_A \otimes |0\rangle_B \langle 0| . \tag{6.21}$$

- Вероятность срабатывания детектора 1 при измерении в $z$-базисе, соответствует оператору

$$\Gamma_1 = I_A \otimes \mathscr{D}_z^*(P^B_{z,1}) = \eta I_A \otimes |1\rangle_B \langle 1| . \tag{6.22}$$

- Взвешенное среднее коэффициентов ошибок в $x$-базисе (см. (6.4)), соответствует оператору

$$\begin{aligned}\Gamma_2 &= P^A_{x,0} \otimes \mathscr{D}_x^*(P^B_{x,1}) + \eta P^A_{x,1} \otimes \mathscr{D}_x^*(P^B_{x,0}) \\ &= \eta(|+-\rangle\langle+-| + |-+\rangle\langle-+|).\end{aligned} \tag{6.23}$$

Величины $\gamma_i$ в (6.19) — наблюдаемые легитимными сторонами средние значения наблюдаемых. Обозначение $\gamma_i$ хорошо для общей формулы, но для наших конкретных наблюдаемых мы подберём более осмысленные обозначения. Так, наблюдаемые значения вероятности срабатывания детекторов в $z$-базисе мы обозначим $p_0$ и $p_1$, т.е.

$$\operatorname{Tr}\Gamma_0\rho = p_0, \qquad \operatorname{Tr}\Gamma_1\rho = p_1.$$

Здесь же заметим, что по определению $p_{\text{det}} = p_0 + p_1$, т.е. наблюдаемые значения $p_0$ и $p_1$ фиксируют и $p_{\text{det}}$. Но $p_0$ и $p_1$ по отдельности содержат более подробную информацию: они также фиксирует пропорцию нулей и единиц в просеянном ключе получателя. Если вероятность ошибки в канале (при отсутствии перехвата) не зависит от значения бита, то $p_1/p_0 = \eta$. Ограничения $\Gamma_0$ и $\Gamma_1$ не позволяют противнику изменить это отношение. Также важную роль будет играть величина

$$t = p_0 + p_1/\eta = \operatorname{Tr}\{[I_A \otimes (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|)]\rho_{AB}\}. \tag{6.24}$$

Обозначим

$$Q_x = \operatorname{Tr}\Gamma_2\rho_{AB}/(\eta t). \tag{6.25}$$

В случае одинаковых эффективностей детекторов, т.е. $\eta = 1$, это обычная доля ошибок в $x$-базисе. Таким образом, ограничения выглядят следующим образом:

$$\operatorname{Tr}[(I_A \otimes |0\rangle_B\langle 0|)\rho_{AB}] = p_0, \tag{6.26}$$

$$\operatorname{Tr}[(I_A \otimes |1\rangle_B\langle 1|)\rho_{AB}] = p_1/\eta, \tag{6.27}$$

$$\operatorname{Tr}[(|+-\rangle\langle +-| + |-+\rangle\langle -+|)\rho_{AB}] = tQ_x, \tag{6.28}$$

Величины $p_0$, $p_1$ и $Q_x$ принадлежат отрезку $[0, 1]$, причём $0 < p_0 + p_1 \leqslant 1$.

Отметим также, что коэффициент ошибок в $z$-базисе $Q_z$ в последнем слагаемом (6.20) (не участвующем в задаче оптимизации) формально определяется как

$$Q_z = \operatorname{Tr}\Gamma_3\rho_{AB}/(t\eta), \tag{6.29}$$

где

$$\Gamma_3 = P^A_{z,0} \otimes \mathscr{D}^*_z(P^B_{z,1}) + \eta P^A_{z,1} \otimes \mathscr{D}^*_z(P^B_{z,0}) = \\ = \eta(|01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10|).$$

Но это ограничение не используется в задаче оптимизации.

**Замечание 6.2.** «Максимальное» множество ограничений $\Gamma_i$ в (6.19) — это все комбинации вида $P^A_{\alpha,a} \otimes P^B_{\beta,a}$, $\alpha, \beta \in \{z, x\}$, $a \in \{0, 1\}$, $b \in \{0, 1, \mathrm{vac}\}$ и ограничения, связанные с равенством следа единице и фиксацией $\rho_A = \mathrm{Tr}_B \rho_{AB}$. Напомним, что $\rho_A$ фиксированно — см. конец раздела 6.3. Фиксацию $\rho_A$ можно осуществить при помощи матриц Паули [317]. Можно задаться вопросом, не позволит ли наложение дополнительных ограничений по сравнению с (6.21)–(6.23) получить более точные оценки на степень незнания противника и, стало быть, обеспечить более высокую предельную скорость генерации секретного ключа. Ответ зависит от модели шума в канале. Рассмотрим случай, когда естественный шум и потери в канале связи описываются при помощи канала (6.5)–(6.7). Соответственно, сцепленное состояние, распределяемое между отправителем и получателем, в случае отсутствия перехвата имеет вид

$$\rho^0_{AB} = (\mathrm{Id}_A \otimes \Lambda)(|\Phi\rangle_{AB} \langle\Phi|) \tag{6.30}$$

где $\mathrm{Id}_A$ — тождественный оператор в пространстве отправителя. Тогда наблюдаемые значения ограничений и величины $Q_z$ составят:

$$\mathrm{Tr}[(I_A \otimes |0\rangle_B \langle 0|)\rho^0_{AB}] = p_0 = t/2, \tag{6.31}$$

$$\mathrm{Tr}[(I_A \otimes |1\rangle_B \langle 1|)\rho^0_{AB}] = p_1/\eta = t/2, \tag{6.32}$$

$$\mathrm{Tr}[(|+-\rangle \langle +-| + |-+\rangle \langle -+|)\rho^0_{AB}] = t\eta Q_x = t\eta Q, \tag{6.33}$$

$$\mathrm{Tr}[(|01\rangle \langle 01| + |10\rangle \langle 10|)\rho^0_{AB}] = t\eta Q_z = t\eta Q, \tag{6.34}$$

где $t$ и $Q$ — параметры канала (6.5)–(6.7). В этом случае, как будет показано в замечании 6.3 в конце раздела 6.6, дополнительные ограничения по сравнению с (6.21)–(6.23) не меняют решение оптимизационной задачи (6.18)–(6.19) и, следовательно, не увеличивают предельную скорость генерации секретного ключа. В некоторых других случаях дополнительные ограничения могут увеличить предельную скорость генерации секретного ключа [313].

Заметим также, что определение $t$ по формуле (6.24) согласовано с определением $t$ как параметра затухания в канале.

Монотонное невозрастание квантовой относительной энтропии на решениях уравнения ГКСЛ (см. (1.24)) и минимизация квантовой относительной энтропии в квантовой криптографии объединяет эти две, казалось бы, несвязанные тематики. Линейные ограничения в главе 1 в явном виде не возникали, но также могли бы быть рассмотрены: это законы сохранения, симметрии уравнения ГКСЛ [93].

Наконец, отметим, что задача (6.18)–(6.19) также близка к задаче квантовой томографии, которая заключается в восстановлении неизвестного квантового состояния по наблюдаемым данным. Томография двухкубитных квантовых систем при реализации кубита в виде поляризации фотона рассматривалась, например, в [14, 121]. Отличие задачи, возникающей в квантовом распределении ключей, заключается в том, что здесь не требуется полностью восстановить состояние, а требуется только найти минимальное значение определённой информационной характеристики (в задаче (6.18)–(6.19) — квантовой относительной энтропии) на множестве состояний, не противоречащих наблюдаемым данным.

## 6.5 Теорема о предельной скорости генерации секретного ключа

Теперь можно сформулировать основную теорему этой главы.

**Теорема 6.1.** *Задача оптимизации (6.18) на множестве положительных операторов с линейными ограничениями (6.26)–(6.28) имеет допустимые решения (т.е. решения, удовлетворяющие ограничениям) тогда и только тогда, когда*

$$Q_x \geqslant \frac{1}{2} - \frac{1}{t}\sqrt{\frac{p_0 p_1}{\eta}}, \tag{6.35}$$

*где $t$ определяется формулой (6.24). В этом случае оптимальное значение целевой функции есть*

$$p_{\mathrm{det}} \left[ h\left(\frac{1-\delta_z}{2}\right) - h\left(\frac{1-\sqrt{\delta_z^2+\delta_x^2}}{2}\right)\right], \tag{6.36}$$

*где*

$$p_{\text{det}} = p_0 + p_1, \tag{6.37}$$

$$\delta_z = \frac{p_0 - p_1}{p_{\text{det}}}, \tag{6.38}$$

$$\delta_x = \frac{(1 - 2Q_x)t\sqrt{\eta}}{p_{\text{det}}}. \tag{6.39}$$

Доказательство теоремы приводится далее в разделе 6.6. Из формулы (6.20) тогда следует, что предельная скорость генерации секретного ключа составляет

$$R = p_{\text{det}} \left[ h\left(\frac{1-\delta_z}{2}\right) - h\left(\frac{1-\sqrt{\delta_z^2+\delta_x^2}}{2}\right) - h(Q_z) \right]. \tag{6.40}$$

Условие (6.35) означает, что не существует положительного оператора $\rho_{AB}$, удовлетворяющего ограничениям (6.26)–(6.28), если неравенство (6.35) не выполнено. Иными словами, значения $p_0$, $p_1$ и $Q_x$, не удовлетворяющие (6.35), не могут быть получены.

Выражение $p_{\text{det}}$ через $p_0$ и $p_1$ по формуле (6.37) эквивалентно приведённому ранее выражению (6.12) в силу того, что $\Pi = P^B_{z,0} + P^B_{z,1}$, и определения $p_0$ и $p_1$.

Подчеркнём важность формулы (6.36) для произвольных $p_0$, $p_1$ и $Q_x$, а не только для значений, заданных в (6.31)–(6.33), даже если канал связи в естественных условиях (при отсутствии перехвата) и задаётся формулами (6.5)–(6.7). В асимптотическом случае бесконечно большого количества посылок $N \to \infty$ противник не может нарушить ограничения (6.31)–(6.33), поскольку в противном случае его атака будет обнаружена именно благодаря нарушению равенств, которые должны выполняться в естественных условиях. Т.е. противник ограничен атаками, не нарушающими равенства (6.31)–(6.33).

Однако не в асимптотическом случае, а при конечных $N$, то есть на практике, статистические флуктуации даже в естественных условиях будут приводить к отклонениям $p_0$, $p_1$ и $Q_x$ от значений, заданных в (6.31)–(6.33). Поскольку мы не можем отличить малые статистические отклонения от малых отклонений, вызванных вмешательством противника, мы должны иметь оценку знания противника для произвольных $p_0$, $p_1$ и $Q_x$ в малой окрестности значений (6.31)–(6.33).

Такую оценку и даёт формула (6.36), поэтому именно она должна использоваться в качестве отправной точки для анализа случая конечного $N$. Имея эту формулу, анализ случая конечного $N$ не представляет принципиальных трудностей, поэтому далее в этой главе мы анализируем асимптотический случай. Тогда равенства (6.31)–(6.33) можно считать выполненными.

Рассмотрим следующий случай: $p_0 = t/2$, $p_1 = \eta t/2$, где $0 < t \leqslant 1$. Это несколько обобщает случай (6.31)–(6.34): выполнены только первые два равенства, но $Q_x$ и $Q_z$ необязательно совпадают. В случае обоих идеальных детекторов, т.е. $\eta = 1$, формула (6.40) сводится к хорошо известному результату [286]:

$$R = t[1 - h(Q_x) - h(Q_z)]. \tag{6.41}$$

Если $Q_x = Q_z = Q$, то решение неравенства $1 - 2h(Q) > 0$ определяет максимальный уровень шума $Q \approx 0.11$, при котором распределение ключей возможно (что соответствует положительному $R$).

В другом частном случае $Q_x = Q_z = 0$ (бесшумный канал), формула (6.40) приводит к другому известному результату, полученному в [168]:

$$R = p_{\text{det}} h\left(\frac{p_0}{p_0 + p_1}\right) = p_{\text{det}} h\left(\frac{1}{1+\eta}\right). \tag{6.42}$$

Эта формула выражает то, что если в канале нет шума, то нет и активного вмешательства противника. В этом случае частичная информация противника о бите просеянного ключа связана только с неравномерностью его распределения.

Сравним формулу (6.40) с двумя формулами, полученными в [168]:

$$R = p_{\text{det}} \left\{ \frac{2\eta}{1+\eta}[1 - h(Q_x)] - h(Q_z) \right\}, \tag{6.43}$$

$$R = p_{\text{det}} \frac{2\eta}{1+\eta}[1 - h(Q_z) - h(Q_x)]. \tag{6.44}$$

Первая формула получена в результате более общего анализа, который включает случай, когда параметр $\eta$ находится под частичным контролем противника, применённого к частному случаю фиксированного $\eta$. Вторая формула получена путём следующего аргумента. Простейшее решение проблемы различия эффективностей детекторов — это искусственно выровнять эффективность детекторов,

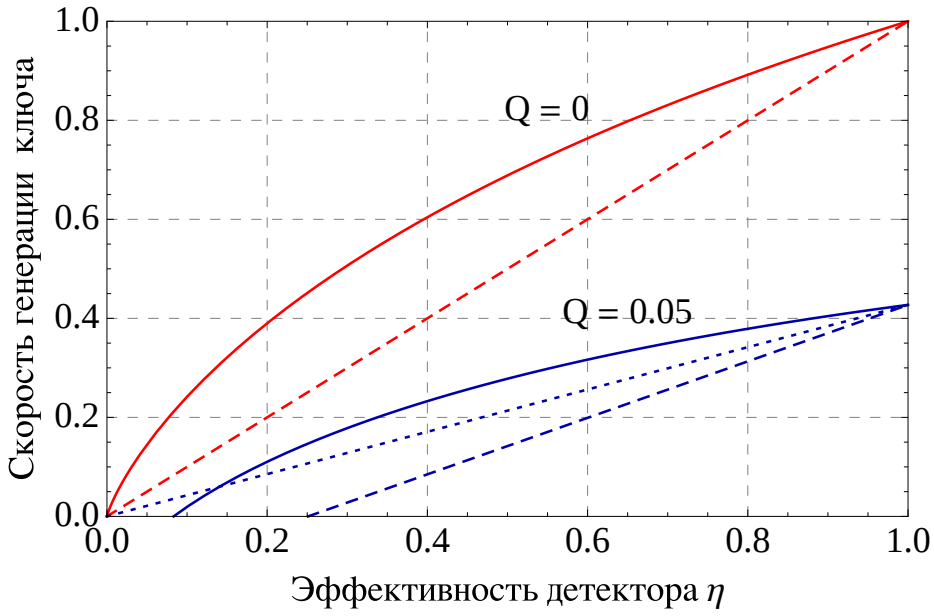



**Рисунок 6.1. – Предельная скорость генерации секретного ключа $R$ для протокола BB84 в зависимости от эффективности одного из детекторов $\eta$ при идеальной эффективности другого детектора и канала (6.5)–(6.7) с $t = 1$. Красные линии: бесшумный случай $Q = 0$, синие линии: случай $Q = 0.05$. Сплошные линии: формула (6.40), штриховые линии: формула (6.43), пунктирная линия: формула (6.44) (совпадает с (6.43) для бесшумного случая).**

вручную удаляя (случайным образом) часть срабатываний детектора с большей эффективностью. А именно, в нашем случае получатель должен с вероятностью $1 - \eta$ удалять каждый нуль из просеянного ключа, что выровняет распределение числа нулей и единиц в просеянном ключе. Тогда предельная скорость генерации ключа равна правой части (6.41), умноженной на $\eta$, что и даёт формулу (6.44).

Сравнение этих формул приведено на рисунке 6.1. Мы видим, что формула (6.40) даёт всегда более высокие скорости, нежели формула (6.43). Также она даёт более высокие скорости и по сравнению с (6.44) для большей части значений $\eta$. Только в случае малых $\eta$, что соответствует большому различию в эффективностях детекторов, искусственное выравнивание эффективностей даёт более высокие скорости. Это не противоречит точности оценки (6.40) (т.е. тому, что это именно предельно достижимая скорость генерации), поскольку возможность выбрасывания части значений (т.е. предобработки данных) сразу после передачи квантовых состояний не была предусмотрена в математической модели

протокола. Также построенные на графике по формуле (6.40) кривые совпадают с кривыми, построенными в [317] численно.

Можно модифицировать протокол, чтобы устранить ограничение математической модели протокола и формулы (6.40), заключающейся в отсутствии предобработки. Пусть получатель выбрасывает каждый исход измерения «нуль» с некоторой вероятностью $1-\eta_1 \leqslant 1-\eta$. После этого оставшееся несовпадение эффективностей соответствует параметру $\eta_2 = \eta/\eta_1 \geqslant \eta$ и мы можем воспользоваться формулой (6.40), если заменить в ней $\eta$ на $\eta_2$. Далее можно выполнить оптимизацию по $\eta_1$. В результате мы получаем формулу

$$R = \max_{\substack{\eta_1\eta_2=\eta \\ \eta_1\geqslant\eta}} \eta_1 p_{\mathrm{det}}^{(2)} \left[ h\left(\frac{1-\delta_z^{(2)}}{2}\right) - h\left(\frac{1-\sqrt{\left(\delta_z^{(2)}\right)^2+\left(\delta_x^{(2)}\right)^2}}{2}\right) - h(Q_z)\right], \tag{6.45}$$

где $p_{\mathrm{det}}^{(2)}$, $\delta_z^{(2)}$ и $\delta_x^{(2)}$ определяются формулами (6.37)–(6.39) с заменой $p_0$, $p_1$ и $Q_x$ на $p_0^{(2)}$, $p_1^{(2)}$ и $Q_x^{(2)}$, которые, в свою очередь определяются, как и прежде, т.е. по формулам (6.21)–(6.23), но с заменой $\eta$ на $\eta_2$ в этих формулах. Результаты вычислений по формуле (6.45) показаны на рисунках 6.2 и 6.3. Мы видим, что скорость генерации ключа по формуле (6.45) превосходит скорость генерации ключа по формулам (6.43) и (6.44), а также превосходит скорость генерации по формуле (6.40) в случае большого различия между эффективностями детекторов. На практике различие между эффективностями детекторов не бывает большим, а именно, $\eta \geqslant 0.9$. Даже для высокого уровня шума ($Q = 0.10$, что близко к критическому значению 11%) при $\eta \geqslant 0.9$ в предобработке нет необходимости, как мы видим из рис. 6.3.

Уменьшение скорости генерации ключа при убывании $\eta$, показанное на рисунках 6.1–6.3, вызвано двумя эффектами: уменьшением средней эффективности детектора $(1+\eta)/2$ и собственно несовпадением эффективностей. Чтобы разделить эти два эффекта и исследовать уменьшение скорости генерации секретного ключа только вследствие несовпадения эффективностей, сравним предельные скорости генерации секретного ключа для случая детекторов с эффективностями 1 и $\eta$ и детекторов с двумя одинаковыми эффективностями, равными $(1+\eta)/2$. В

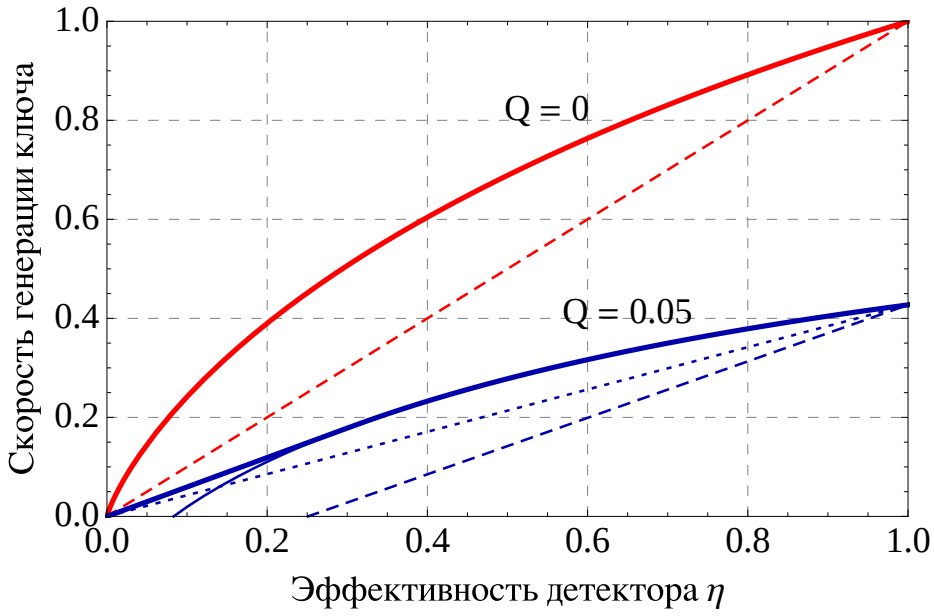



**Рисунок 6.2. – То же, что на рисунке 6.1, но добавлена дополнительная жирная сплошная линия. Она соответствует расчётам по формуле (6.45), что даёт лучшие результаты, нежели формула (6.40) (тонкие сплошные линии) для случая малых $\eta$ и наличия шума (ошибок).**

последнем случае предельная скорость генерации секретного ключа даётся формулой (6.41), где к правой части надо приписать множитель $(1+\eta)/2$ — долю посылок, регистрируемых получателем.

Графики отношения предельной скорости генерации при детекторах с разными эффективностями 1 и $\eta$ к предельной скорости генерации при детекторах с одинаковой эффективностью $(1+\eta)/2$ при различных уровнях ошибок $Q$ приведены на рисунке 6.4. Мы видим, что различие в эффективностях детекторов снижает скорость сильнее при больших $Q$. Также мы видим, что если различие в эффективностях невелико (как мы указали выше, на практике $\eta \geqslant 0.9$), то оно несильно снижает скорость даже при высоких уровнях ошибок. Например, скорость генерации ключа даже при $\eta = 0.7$ и $Q = 0.09$ составляет более 90% от скорости генерации ключа при том же $Q$ в случае детекторов с одинаковыми эффективностями, равными среднему от 0.7 и 1, т.е. 0.85.

Мы рассмотрели случай, когда эффективность одного из детекторов идеальна. Но мы уже отмечали, что это не ограничивает общность: если оба детектора неидеальны и имеют эффективности $\eta_0$ и $\eta_1$, то $\eta = \min(\eta_0, \eta_1)/\max(\eta_0, \eta_1)$

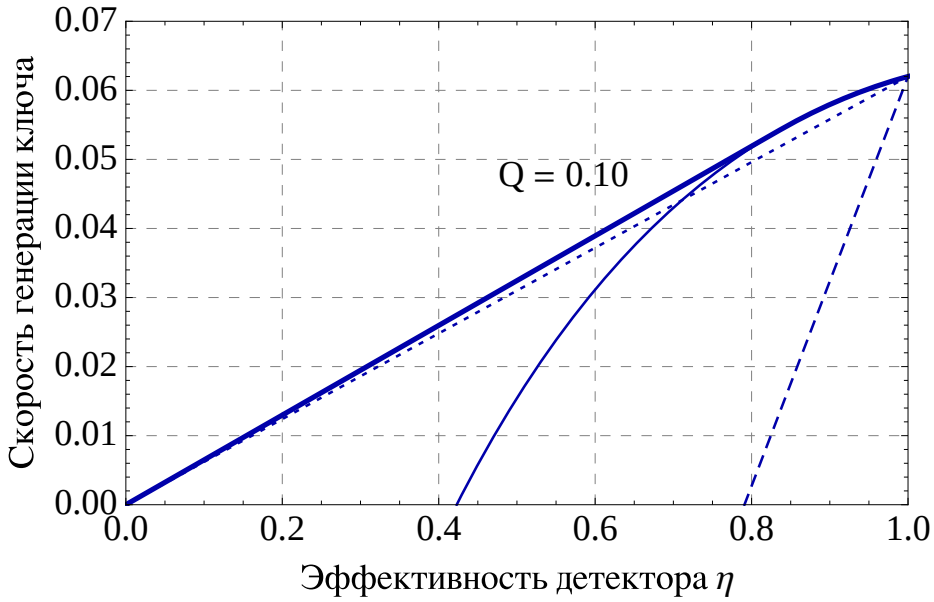



**Рисунок 6.3. – То же, что на рисунке 6.2, но рассмотрен более высокий уровень ошибок.**

и выражение для предельной скорости генерации (6.40) следует умножить на $\max(\eta_0, \eta_1)$.

## 6.6 Доказательство теоремы о предельной скорости генерации

**1. Предварительные сведения.** Определим функцию

$$D\Big(\mathscr{G}(\rho_{AB})\|\mathscr{Z}\big(\mathscr{G}(\rho_{AB})\big)\Big) = f(\rho_{AB}). \tag{6.46}$$

Иногда мы будем опускать индексы $AB$ в $\rho_{AB}$. Градиент этой функции имеет вид [317]

$$\nabla f(\rho) = \mathscr{G}^*\Big(\log\mathscr{G}(\rho) - \log\mathscr{Z}\big(\mathscr{G}(\rho)\big)\Big)^T. \tag{6.47}$$

Поскольку $\rho$ задаётся конечным числом вещественных чисел, градиент можно понимать как обычный градиент функции нескольких вещественных переменных. Приведём выражение для действия сопряжённого канала $\mathscr{G}^*$ на произвольный оператор $C \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$:

$$\mathscr{G}^*(C) = \sum_{i,j,k,l=0}^{1} \eta^{(j+l)/2} \langle ij|C|kl\rangle \, |ij\rangle \langle kl| \,, \tag{6.48}$$

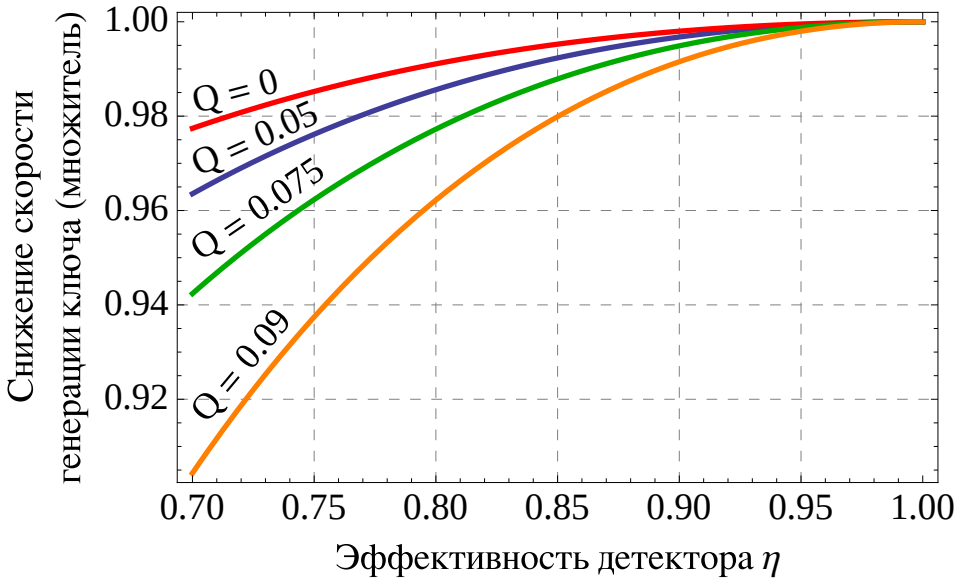



**Рисунок 6.4. – Снижение скорости генерации секретного ключа при детекторах с разными эффективностями по сравнению с детекторами одинаковой эффективности: отношение предельной скорости генерации при детекторах с разными эффективностями 1 и $\eta$ к предельной скорости генерации при детекторах с одинаковой эффектиностью $(1+\eta)/2$ для различных значений уровня шума $Q = Q_x = Q_z$. Если различие в эффективностях невелико (типичные значения на практике: $\eta = 0.9, 0.95$), то оно несильно снижает скорость даже при высоких уровнях ошибок.**

Если проекции градиента (6.47) на все разрешённые направления движения из $\rho$ (т.е. направления, которые не нарушают положительность $\rho$ и все ограничения) неотрицательны, то $\rho$ доставляет локальный минимум целевой функции (6.46). Благодаря совместной выпуклости квантовой относительной энтропии (см. (1.14)) и выпуклости множества $\mathbf{S}$ допустимых решений в (6.18)–(6.19), локальный минимум является и глобальным. Следовательно, неотрицательность проекций градиента на все разрешённые направления — это достаточное условие глобального минимума целевой функции.

Однако это, вообще говоря, может не быть необходимым условием, потому что градиент (6.47) может не иметь определённого значения в оптимальной точке. Во-первых, градиент не определён, если $\rho$ лежит на границе множества $\mathbf{S}$. Во-вторых, спектр оператора $\mathscr{G}(\rho_{AB})$ может быть вырожден. Это не представляет проблемы для выражения квантовой относительной энтропии (6.16) благодаря соглашению $0 \log 0 = 0$ и тому факту, что ядро оператора $\mathscr{Z}(\mathscr{G}(\rho))$ лежит в ядре

оператора $\mathscr{G}(\rho)$. Но вырожденность может представлять проблему для выражения для градиента (6.47), если ядро оператора $\mathscr{G}(\rho)$ не лежит в ядре оператора $\mathscr{G}(\rho+\Delta\rho)$ при бесконечно малых $\Delta\rho$. В этом случае градиент может быть бесконечным, что связано с бесконечностью производной от $x\log x$ в точке $x=0$. Мы предъявим состояние, в котором градиент определён корректно, т.е. выполнено достаточное условие минимума.

Для простоты изложения мы разобьём последующий ход доказательства теоремы 6.1 на две части. В первой части мы предположим, что ${}_B\langle \mathrm{vac}|\rho_{AB}|\mathrm{vac}\rangle_B = 0$, так что пространство получателя можно считать двухмерным, натянутым на векторы $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Во второй части мы покажем, что использование вакуумной компоненты пространства получателя не даёт противнику преимущества.

**2. Случай двухмерного пространства получателя**: $\mathscr{H}_B = \mathbb{C}^2$. Будем выписывать матрицы линейных операторов в базисе $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ пространства $\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$. Матрицы $\Gamma_i$ имеют вид:

$$\Gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \eta \end{pmatrix} \quad \Gamma_2 = \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{6.49}$$

Заметим, что

$$\operatorname{Tr}\Gamma_i\rho = \sum_{j,k,l,m=0}^{1} \Gamma_i^{lm,jk}\rho_{jk,lm} = \sum_{j,k,l,m=0}^{1} \left(\Gamma_i^{jk,lm}\right)^*\rho_{jk,lm}, \tag{6.50}$$

где $\Gamma_i^{jk,lm}$ и $\rho_{jk,lm}$ — элементы соответствующих матриц. То есть каждое ограничение $\Gamma_i$ фиксирует некоторую взвешенную сумму элементов $\rho$.

Докажем необходимость условия (6.35) для существования допустимых решений оптимизационной задачи. Вследствие положительности $\rho$ имеем

$$\begin{aligned} |\rho_{00,11}| &\leqslant \sqrt{\rho_{00,00}\rho_{11,11}}, \\ |\rho_{01,10}| &\leqslant \sqrt{\rho_{01,01}\rho_{10,10}}. \end{aligned} \tag{6.51}$$

В соответствии с (6.26) и (6.27) можно записать

$$\begin{aligned} \rho_{00,00} &= \frac{p_0 + \Delta_0}{2}, \qquad \rho_{01,01} = \frac{p_1 + \Delta_1}{2\eta}, \\ \rho_{10,10} &= \frac{p_0 - \Delta_0}{2}, \qquad \rho_{11,11} = \frac{p_1 - \Delta_1}{2\eta}, \end{aligned} \tag{6.52}$$

где $\Delta_0$ и $\Delta_1$ — некоторые вещественные числа. Тогда из (6.24), (6.28), (6.49), (6.51) и (6.52) получаем

$$\operatorname{Tr} \Gamma_2 \rho = \eta t Q_x = \eta t/2 - \eta(\operatorname{Re} \rho_{00,11} + \operatorname{Re} \rho_{01,10}),$$

откуда

$$\begin{aligned} 1 - 2Q_x &= t^{-1}(2 \operatorname{Re} \rho_{00,11} + 2 \operatorname{Re} \rho_{01,10}) \leqslant \\ &\leqslant (t\sqrt{\eta})^{-1} \left[ \sqrt{(p_0 + \Delta_0)(p_1 - \Delta_1)} + \sqrt{(p_0 - \Delta_0)(p_1 + \Delta_1)} \right] \leqslant \\ &\leqslant 2(t\sqrt{\eta})^{-1} \sqrt{p_0 p_1}, \end{aligned}$$

где последнее неравенство выполнено ввиду совместной вогнутости функции среднего геометрического. Следовательно, неравенство (6.35) — необходимое условие существования неотрицательно определённого оператора $\rho_{AB}$, удовлетворяющего ограничениям (6.26)–(6.28).

Рассмотрим следующий оператор:

$$\overline{\rho}_{AB} = (1-Q_z) \begin{pmatrix} p_0 & 0 & 0 & t(\frac{1}{2} - Q_x) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ t(\frac{1}{2} - Q_x) & 0 & 0 & p_1/\eta \end{pmatrix} + Q_z \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_1/\eta & t(\frac{1}{2} - Q_x) & 0 \\ 0 & t(\frac{1}{2} - Q_x) & p_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.53}$$

Обозначение $Q_z$ здесь согласуется с формулой (6.29). Если выполнено неравенство (6.35), то этот оператор неотрицательно определён и удовлетворяет ограничениям (6.26)–(6.28), что доказывает достаточность условия (6.35) для суще-

ствования решения. Как мы увидим, (6.53) — оптимальное решение. Имеем

$$\mathscr{G}(\overline{\rho}_{AB}) = (1-Q_z)\begin{pmatrix} p_0 & 0 & 0 & (\frac{1}{2}-Q_x)t\sqrt{\eta} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (\frac{1}{2}-Q_x)t\sqrt{\eta} & 0 & 0 & p_1 \end{pmatrix} + Q_z \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_1 & (\frac{1}{2}-Q_x)t\sqrt{\eta} & 0 \\ 0 & (\frac{1}{2}-Q_x)t\sqrt{\eta} & p_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

и $\mathscr{Z}\big(\mathscr{G}(\overline{\rho}_{AB})\big)$ — это диагональная часть $\mathscr{G}(\overline{\rho}_{AB})$. Иными словами, чтобы получить $\mathscr{Z}\big(\mathscr{G}(\overline{\rho}_{AB})\big)$, надо в формуле для $\mathscr{G}(\overline{\rho}_{AB})$ положить $Q_z = 1/2$. Собственные значения $\mathscr{G}(\overline{\rho}_{AB})$ таковы:

$$\lambda_{1,2} = (1-Q_z)p_{\mathrm{det}}\lambda_{\pm}, \quad \lambda_{3,4} = Q_z p_{\mathrm{det}}\lambda_{\pm},$$

где

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}\left(1 \pm \sqrt{\delta_z^2 + \delta_x^2}\right).$$

Тогда прямое вычисление выражения (6.16) приводит к (6.36).

**2. Доказательство оптимальности** $\overline{\rho}_{AB}$. Мы получили, что подстановка состояния $\overline{\rho}_{AB}$ в целевую функцию даёт искомую формулу (6.36). Осталось показать, что состояние $\overline{\rho}_{AB}$ оптимально. Будет показано, что градиент $\nabla f(\overline{\rho}_{AB})$ ортогонален всем разрешённым направлениям движения из $\overline{\rho}_{AB}$, что и будет означать оптимальность $\overline{\rho}_{AB}$.

Пусть условие существования допустимого решения (6.35) выполнено как строгое неравенство. В этом случае оператор (6.53) невырожден и градиент хорошо определён. Случай, когда (6.35) выполнено как равенство, может быть получен как предельный случай по непрерывности. Непрерывность целевой функции доказана в [317].

Рассмотрим собственные векторы $(\cos\theta, \sin\theta)$ и $(-\sin\theta, \cos\theta)$,

$\theta = \frac{1}{2}\operatorname{arctg}\frac{t\sqrt{\eta}(1-2Q_x)}{p_0-p_1} = \frac{1}{2}\operatorname{arctg}(\delta_x/\delta_z)$, матрицы

$$\begin{pmatrix} p_0 & (\frac{1}{2}-Q_x)t\sqrt{\eta} \\ (\frac{1}{2}-Q_x)t\sqrt{\eta} & p_1 \end{pmatrix}$$

отвечающие собственным значениям $\lambda_\pm$. Тогда непосредственное вычисление градиента по формулам (6.47) и (6.48) даёт

$$\nabla f(\overline{\rho}_{AB}) = \begin{pmatrix} d_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta d_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \eta d_1 \end{pmatrix} + \sqrt{\eta}\sin\theta\cos\theta\log\frac{\lambda_+}{\lambda_-}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.54)$$

где

$$\begin{aligned} d_0 &= \cos^2\theta\log\lambda_+ + \sin^2\theta\log\lambda_-, \\ d_1 &= \sin^2\theta\log\lambda_+ + \cos^2\theta\log\lambda_- - \log\eta. \end{aligned}$$

Мы видим, что градиент ортогонален всем направлениям движения, кроме изменения главной диагонали матрицы $\rho_{AB}$ и направлений, меняющих сумму побочной диагонали. Однако сумма побочной диагонали зафиксирована ограничениями $\Gamma_0$, $\Gamma_1$ и $\Gamma_2$. В соответствии с ограничениями $\Gamma_0$ и $\Gamma_1$, разрешённые направления изменений главной диагонали $(\Delta\rho_{00}, \Delta\rho_{01}, \Delta\rho_{10}, \Delta\rho_{11})$ удовлетворяют соотношениям $\Delta\rho_{00} = -\Delta\rho_{10}$ и $\Delta\rho_{01} = -\Delta\rho_{11}$. Следовательно,

$$\operatorname{Tr}[\nabla f(\overline{\rho}_{AB})\operatorname{diag}(\Delta\rho_{00},\ldots,\Delta\rho_{11})] = d_0(\Delta\rho_{00}+\Delta\rho_{10}) + \eta d_1(\Delta\rho_{01}+\Delta\rho_{11}) = 0$$

и, таким образом, градиент ортогонален всем разрешённым направлениям. Это означает, что $\overline{\rho}_{AB}$ доставляет минимум целевой функции (6.18) в случае двухмерного пространства получателя.

**3. Случай трёхмерного пространства получателя.** Обратимся теперь к случаю трёхмерного пространства получателя. Можно заметить, что вакуумная компонента $\rho_{AB}$ не вносит вклад ни в целевую функцию, ни в градиент (см. (6.47) и (6.48)), ни в ограничения. Поэтому состояние $\overline{\rho}_{AB} \oplus 0 + t' I_2/2 \otimes |\mathrm{vac}\rangle\langle\mathrm{vac}|$, где $\overline{\rho}_{AB}$ — матрица, заданная формулой (6.53) на 4-мерном подпространстве, а

$\oplus 0$ обозначает её вложение в 6-мерное пространство $\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$, оптимально при произвольном $t' \geqslant 0$ (условие $\operatorname{Tr} \overline{\rho}_{AB} = 1$ влечёт $t' = 1 - t$, но формально мы не включили это условие в список ограничений задачи оптимизации) и оптимальное значение целевой функции даётся формулой (6.36). Иными словами, использование вакуумной компоненты и потерь в канале связи не даёт противнику никакого преимущества: его удельная информация на один бит просеянного ключа остаётся той же.

**Замечание 6.3.** В замечании 6.2 мы обещали показать, что включение дополнительных ограничений не меняет решение оптимизационной задачи, если естественный шум в канале описывается каналом (6.5)–(6.7). В самом деле, рассмотрим максимальное множество ограничений $\{\Gamma_i\}$, которое описано в начале замечания 6.2, и рассмотрим значения $\gamma_i = \operatorname{Tr} \Gamma_i \rho^0_{AB}$, где $\rho^0_{AB}$ задано формулой (6.30). Тогда нетрудно показать, что $\overline{\rho}_{AB}$ со значениями $p_0$, $p_1$ и $Q_x$, заданными (6.31)–(6.33), удовлетворяет всем ограничениям, т.е. $\operatorname{Tr} \Gamma_i \overline{\rho}_{AB} = \gamma_i$. Иными словами, $\overline{\rho}_{AB}$ — допустимое решение. Оно же и оптимально: если градиент (6.54) ортогонален всем направлениям движения, разрешённым определённым множеством ограничений, то он ортогонален и более узкому множеству разрешённых направлений (при большем числе ограничений).

Можно рассмотреть следующую задачу: как можно выбрать минимальное множество ограничений, которое не уменьшает оптимальное значение целевой функции по сравнению с задачей с максимальным множеством ограничений. Наше множество $\{\Gamma_0, \Gamma_1, \Gamma_2\}$ — это один из таких выборов. Матрицы этих операторов имеют простой вид и выбраны так, чтобы с ними было легко работать с градиентом $\nabla f(\overline{\rho}_{AB})$.

## 6.7 Утечка информации при исправлении ошибок в случае различных эффективностей детекторов

Рассмотрим величину $H(\overline{A}|\overline{B})_{\rho^{(3)}}$ в (6.15). Поскольку в данном случае регистры $\overline{A}\,\overline{B}$ суть копии $AB$, то

$$H(\overline{A}|\overline{B})_{\rho^{(3)}} = H(A|B)_{\rho^{(4)}},$$

где $\rho^{(4)}_{AB} = \mathrm{Tr}_{\overline{A}\,\overline{B}}\,\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}}$. В самом деле,

$$H(\overline{A}|\overline{B})_{\rho^{(3)}} = H(\mathrm{Tr}_{AB}\,\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}}) - H(\mathrm{Tr}_{A\overline{A}B}\,\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}}),$$
$$H(A|B)_{\rho^{(4)}} = H(\mathrm{Tr}_{\overline{A}\,\overline{B}}\,\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}}) - H(\mathrm{Tr}_{A\overline{A}\,\overline{B}}\,\rho^{(3)}_{A\overline{A}B\overline{B}}).$$

Поскольку $\overline{A}\,\overline{B}$ — копии $AB$, то нет разницы, брать ли частичный след по первой паре регистров или по второй, поэтому эти два выражения равны. Этот приём позволяет нам рассматривать состояние, определённое только на регистрах $AB$, т.е. в пространстве меньшей размерности.

Поскольку регистры $\overline{A}$ и $\overline{B}$ сдержат результаты измерений, то взятие частичного следа по ним соответствует неселективному измерению по $A$ и по $B$ (см. также (1.9)):

$$\rho^{(4)}_{AB} = p^{-1}_{\mathrm{det}} \sum_{a,b=0}^{1} |ab\rangle\,\langle ab|\Pi\mathscr{D}_z(\rho_{AB})\Pi|ab\rangle\,\langle ab|\,,$$

поэтому матрица оператора $\rho^{(4)}$ диагональна в базисе $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ (базисный элемент $|\mathrm{vac}\rangle$ в пространстве получателя можно не рассматривать, поскольку носитель $\rho^{(4)}$ лежит в подпространстве, натянутом на указанные четыре вектора). Иными словами, состояние $\rho^{(4)}$ — классическое в том смысле, что квантовая условная энтропия $H(A|B)_{\rho^{(4)}}$ сводится к формуле для классической условной энтропии (6.2). Хорошо известно (легко показать), что она оценивается сверху как $h(Q_z)$, где $Q_z$ — вероятность ошибки (т.е. события $A \neq B$).

Однако в нашем случае, когда $\overline{\rho}_{AB}$ имеет вид (6.53), что соответствует оптимальной атаке противника, $H(A|B)$ в точности равна $h(Q_z)$, если выполнены равенства (6.31)–(6.33). В самом деле, диагональная часть $\overline{\rho}_{AB}$ в этом случае имеет вид $((1-Q_z)p_0, Q_z p_1/\eta, Q_z p_0, (1-Q_z)p_1/\eta)$. Далее, диагональная часть $\rho^{(4)}_{AB}$

имеет вид $p_{\det}^{-1}((1-Q_z)p_0, Q_z p_1, Q_z p_0, (1-Q_z)p_1)$. Это совместное распределение $AB$. Непосредственным вычислением устанавливается, что $H(A|B) = h(Q_z)$.

Если равенства (6.31)–(6.33) нарушаются, то $H(A|B)$ меньше, чем $h(Q_z)$. Однако мы предполагаем, что нарушение этих равенств может быть вызвано лишь статистическими флуктуациями или вмешательством противника такого же порядка (см. обсуждение после теоремы 6.1) и, стало быть, отклонение от них бесконечно мало в пределе $N \to \infty$. Следовательно, разница между $H(A|B)$ и $h(Q_z)$ также бесконечно мала.

## 6.8 Метод обманных состояний при несовпадающих эффективностях детекторов

### 6.8.1 Общее описание метода

В этом разделе мы адаптируем известный метод обманных состояний (состояний-ловушек) для случая детекторов с несовпадающими эффективностями. До сих пор мы предполагали, что отправитель отправляет однофотонные состояния. Это соответствовало тому, что его гильбертово пространство — $\mathbb{C}^2$. Теперь примем во внимание, что на практике отправитель отправляет не истинные однофотонные состояния, а слабые когерентные импульсы. Это означает, что гильбертово пространство отправителя — не $\mathbb{C}^2$, а $\mathscr{F}(\mathbb{C}^2)$ (бозонное пространство Фока над $\mathbb{C}^2$). Ортонормированный базис в этом пространстве составляют векторы $|\mathrm{vac}\rangle$ и $|j_0, j_1\rangle_z$, где $|\mathrm{vac}\rangle$ — вакуумный вектор, $|j_0, j_1\rangle_z = (a_0^\dagger)^{j_0}(a_1^\dagger)^{j_1}|\mathrm{vac}\rangle$, $j_0, j_1 \geqslant 0$ ($|0,0\rangle_z = |\mathrm{vac}\rangle$), $a_0^\dagger$, $a_1^\dagger$, $a_0$, $a_1$ — операторы рождения и уничтожения фотона с горизонтальной и вертикальной поляризациями.

Другой ортонормированный базис составляют векторы $|\mathrm{vac}\rangle$ и $|j_0, j_1\rangle_x$, $n_0, n_1 \geqslant 0$, где $|j_0, j_1\rangle_x = (a_+^\dagger)^{j_0}(a_-^\dagger)^{j_1}|\mathrm{vac}\rangle$, $a_\pm = (a_0 \pm a_1)/\sqrt{2}$ — операторы уничтожения фотона с двумя перпендикулярными друг другу диагональными поляризациями. В частности, векторы в однофотонном подпространстве, с которыми мы имели дело в предыдущих разделах, суть $a_u^\dagger|\mathrm{vac}\rangle = |u\rangle$, $u \in \{0, 1, +, -\}$.

Тогда отправляемые состояния имеют вид

$$|\alpha, u\rangle = e^{-\mu/2} |\mathrm{vac}\rangle + e^{-\mu/2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\alpha^j}{\sqrt{j!}} |\psi_{ju}\rangle ,$$

где

$$|\psi_{j,0}\rangle = |j,0\rangle_z , \quad |\psi_{j,0}\rangle = |0,j\rangle_z ,$$
$$|\psi_{j,+}\rangle = |j,0\rangle_x , \quad |\psi_{j,-}\rangle = |0,j\rangle_x ,$$

$\alpha \in \mathbb{C}$ — параметр когерентного состояния, $\mu = |\alpha|^2$ — интенсивность импульса, $\alpha = \sqrt{\mu} e^{i\theta}$. Протокол требует, чтобы фаза когерентного состояния $\theta$ менялась случайно от посылки к посылке. Это обеспечивается либо режимом работы лазера (пассивная рандомизация), либо введением в оптическую схему отправителя дополнительного элемента, который подключён к генератору случайных чисел и рандомизирует фазу (активная рандомизация). Тогда противник «видит» не чистое когерентное состояние, а смешанное — оператор плотности

$$\rho_{\mu u} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \; |\sqrt{\mu} e^{i\theta}, u\rangle \langle \sqrt{\mu} e^{i\theta}, u| = e^{-\mu} |\mathrm{vac}\rangle \langle \mathrm{vac}| + e^{-\mu} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\mu^j}{j!} |\psi_{j,u}\rangle \langle \psi_{j,u}| . \tag{6.55}$$

Данное смешанное состояние можно интерпретировать так: с вероятностью $e^{-\mu}$ отправляется вакуумное состояние, с вероятностью $e^{-\mu}\mu^j/j!$ — состояние с $j$ фотонами с соответствующей поляризацией. Таким образом, количество фотонов в посылке распределено по Пуассону с параметром (средним числом фотонов) $\mu$. Обычно выбирают $\mu < 1$, поэтому такие импульсы называются слабыми когерентными.

Наличие в некоторых посылках более одного фотона даёт возможность противнику провести так называемую *атаку расщеплением по числу фотонов* [155,230]. Иногда под этим понимают атаку специального вида, но мы будем понимать целый класс атак, который сейчас опишем. Каждая атака этого класса начинается с того, что противник проводит измерение количества фотонов, т.е. измерение, которому соответствует вероятностная проекторнозначная мера

$\{P_j\}_{j=0}^{\infty}$, где

$$P_j = \sum_{j_0+j_1=j} |j_0, j_1\rangle_z \langle j_0, j_1| = \sum_{j_0+j_1=j} |j_0, j_1\rangle_x \langle j_0, j_1| . \qquad (6.56)$$

При исходе $j$ состояние (6.55) переходит в $P_j\rho_{\mu u}P_j/\operatorname{Tr}\rho_{\mu u}P_j$. Такое измерение называется также неразрушающим, поскольку фотоны не уничтожаются и их поляризация не изменяется. На практике такое неразрушающее измерение на данный момент не реализовано, но в теории оно возможно, поскольку соответствующая вероятностная проекторнозначаная мера существует. Если противник обнаруживает, что фотонов два или более, то один фотон он отводит в свою квантовую память, остальные пересылает получателю. После объявления базисов по открытому каналу противник узнаёт, в каком базисе в данной позиции закодирован бит ключа. Он проводит измерение в этом базисе и узнаёт этот бит. При этом состояние тех фотонов, которые были пересланы получателю, не изменяется. Таким образом, нарушается базовый принцип квантовой криптографии о том, что попытка прослушивания ведёт к изменению состояний и возникновению (или повышению уровня) ошибок. Если же посылка содержит один фотон, то противник по-прежнему может узнать закодированную в нём информацию только ценой изменения состояния и, соответственно, внесения ошибок. Поэтому противник может заблокировать все однофотонные состояния или их часть, т.е. остановить их передачу получателю, имитируя естественные потери в канале связи. Незаблокированные однофотонные состояния он может атаковать обычным образом (ценой внесения ошибок).

Блокировка противником некоторых посылок приводит к повышению уровня потерь, что может быть обнаружено легитимными сторонами. Поэтому предполагается, что противник может заменить канал связи на идеальный, т.е. канал без потерь, и затем заблокировать однофотонных состояний столько, чтобы воспроизвести естественный уровень потерь. Чем выше уровень естественных потерь (который зависит, прежде всего, от длины линии связи, математическая модель будет рассмотрена в конце этого раздела), тем больше однофотонных состояний противник может заблокировать. Если естественные потери в канале настоль-

ко велики, что противник может заблокировать все однофотонные состояния, то противник будет иметь полную информацию о ключе без внесения шума, так как все посылки, дошедшие до получателя, будут многофотонными. Таким образом, протокол квантового распределения ключей оказывается полностью скомпрометированным.

Для обнаружения такой атаки был предложен метод обманных состояний [226, 231, 310]. Он заключается в том, что отправитель отправляет когерентные импульсы с различными интенсивностями. Наиболее распространён протокол с одним сигнальным состоянием интенсивности $\mu_{\mathrm{s}} = \mu$ и двумя обманными состояниями интенсивностей $\mu_{\mathrm{d}_1} = \nu_1$ и $\mu_{\mathrm{d}_2} = \nu_2$, причём должны быть выполнены неравенства $0 \leqslant \nu_2 < \nu_1$ и $\nu_1 + \nu_2 < \mu$. Поскольку интенсивность, будучи просто параметром в распределении вероятностей, — не наблюдаемая величина (наблюдается только количество фотонов — реализация этой случайной величины), противник не знает, какая интенсивность была использована в данной позиции (потому состояния с изменёнными интенсивностями и можно назвать обманными, поскольку для противника они не отличимы от сигнальных) и осуществляет свои действия только исходя из наблюдаемого количества фотонов. После окончания пересылки квантовых состояний, тогда же, когда объявляются базисы, отправитель объявляет и интенсивности каждой позиции.

Говоря математически, статистика детектирования состояний с различными интенсивностями даёт легитимным сторонам дополнительные уравнения для лучшей оценки неизвестных — количества позиций в просеянном ключе, полученных из однофотонных импульсов (т.е. таких, которые невозможно перехватить без внесения ошибок) и доли ошибок в них. Поэтому теоретически чем больше обманных состояний с разными интенсивностями используется, тем более точные оценки можно получить. Однако неожиданный результат [231] состоит в том, что, оказывается, для точной оценки необходимых величин достаточно (в пределе) и двух обманных состояний, если их интенсивности $\nu_1$ и $\nu_2$ стремятся к нулю. Хотя на практике обе интенсивности невозможно взять равными нулю, поскольку они должны быть различны, достаточно малые значения $\nu_1$ и

$\nu_2$ приводят к довольно точным оценкам. В идеале по крайней мере самую маленькую интенсивность $\nu_2$ желательно взять равной нулю, но и это может быть технически сложно.

В формировании просеянного ключа участвуют только сигнальные состояния, обманные состояния нужны только для получения необходимых оценок.

В этом разделе мы адаптируем метод обманных состояний для случая детекторов с разной эффективностью. Мы следуем методу, представленному в работе [231]. Главным образом адаптация заключается в сборе статистики детектирования отдельно по каждому детектору и каждому базису.

При рассмотрении однофотонного источника в предыдущих разделах мы ограничивались атаками, в которых противник не пересылает получателю более одного фотона. Но сейчас получение многофотонных посылок получателем нельзя исключить даже без вмешательства противника, поскольку многофотонные посылки могут исходить от отправителя. Поэтому необходимо уточнить ограничение на класс атак. Поскольку противник может узнать информацию, закодированную в многофотонных посылках, т.е. многофотонные посылки всё равно считаются скомпрометированными, наложим следующее ограничение: противник может делать всё что угодно с многофотонными посылками, но не может добавлять фотоны в однофотонные посылки. Достаточность этого предположения мы рассматриваем в подразделе 6.8.4 далее.

Также мы не рассматривали ранее ситуацию, в которой оба детектора получателя срабатывают одновременно (двойное срабатывание). Это может произойти в двух случаях: либо вследствие многофотонной посылки, либо в результате так называемого темнового (ложного) срабатывания одного из детекторов. Пример первой ситуации: если посылается двухфотонное состояние $|00\rangle$, а получатель измеряет это состояние в базисе $x$, то с вероятностью 1/2 один фотон идёт на один детектор, другой — на другой, в результате чего происходит двойное срабатывание. Во второй ситуации речь идёт о том, что один детектор срабатывает, регистрируя фотон, а второй срабатывает не в результате регистрации фотона, а в результате теплового шума, т.е. ложного срабатывания. В случае двойного сра-

батывания получатель должен приписать этой позиции бит 0 или 1 с вероятностями 1/2 [175]. Однако это не влияет на стойкость, потому что многофотонные посылки всё равно считаются скомпрометированными, а темновые срабатывания не увеличивают информацию противника о посланном бите.

### 6.8.2 Получение оценок по методу обманных состояний

Введём следующие обозначения (следуя [325]):

- $N^{vb}$ — число позиций, в которых и отправитель, и получатель выбрали базис $b \in \{z, x\}$ и отправитель отправил посылку типа $v \in \{\mathrm{s}, \mathrm{d}_1, \mathrm{d}_2\}$ (сигнальную или одну из обманных). Изначально эти величины знает только отправитель. Противник не знает их в момент проведения атаки, они становятся известными только на этапе раскрытия информации.
- $M^{vb\beta}$ — число позиций, в которых и отправитель, и получатель выбрали базис $b$, отправитель отправил посылку типа $v$, получатель зарегистрировал результат $\beta \in \{0, 1\}$. Эти величины становятся известными получателю на этапе раскрытия информации, когда обе стороны объявляют базисы, а отправитель также объявляет типы состояний (сигнальное или одно из обманных) в каждой позиции.
- $Q^{vb\beta} = M^{\mathrm{s}b\beta}/N^{\mathrm{s}b}$ — коэффициент приёма посылок типа $v$ в базисе $b$ с результатом измерения $\beta$. Эти коэффициенты не следует путать с уровнями ошибок $Q_x$ и $Q_z$ из предыдущих разделов: в этом разделе мы будем обозначать уровни ошибок иначе, см. далее. Изменение обозначений связано с тем, что в этом разделе мы используем обозначения, принятые в литературе по методу обманных состояний. Как и предыдущие величины, эти величины становятся известны получателю после этапа раскрытия информации. Поскольку и числитель, и знаменатель дроби, известны получателю после этого этапа, то и сама дробь ему известна.
- $N_j^b$ — число позиций, в которых и отправитель, и получатель выбрали базис

$b \in \{z, x\}$ и отправленное состояние содержало $j$ фотонов. Очевидно,

$$N_j^b = N^{\mathrm{s}b}\left(\frac{\mu^j}{j!}e^{-\mu}\right) + N^{\mathrm{d}_1 b}\left(\frac{\nu_1^j}{j!}e^{-\nu_1}\right) + N^{\mathrm{d}_2 b}\left(\frac{\nu_2^j}{j!}e^{-\nu_2}\right).$$

Эти величины знает противник, поскольку он проводит измерение количества фотонов в каждой посылке, но не знают легитимные стороны, поскольку они такое измерение не проводят.

- $M_j^{b\beta}$ — число позиций, в которых и отправитель, и получатель выбрали базис $b \in \{z, x\}$, отправленное состояние содержало $j$ фотонов и получатель зарегистрировал результат $\beta$. Эти величины также знает только противник. Более того, он на эту величину способен влиять, блокируя или, наоборот, посылая по каналу без потерь состояния с определёнными количествами фотонов.
- $Y_j^{b\beta} = M_j^{b\beta}/N_j^b$ — коэффициент приёма $j$-фотонного состояния в базисе $b$ и с результатом измерения $\beta$. В предельном случае бесконечно большого количества посылок, который мы и рассматриваем в этой главе, можно считать эту величину условной вероятностью регистрации посылки с результатом измерения $\beta$ при условии, что отправленное состояние содержало $j$ фотонов и обе стороны использовали базис $b$. Поскольку числитель этой дроби находится под контролем противника, а знаменатель ему также известен, эти величины находятся под его противника. Уточним, что мы полагаем, что не только общее количество посылок стремится к бесконечности, но и каждая из величин $N^{vb}$, $v \in \{\mathrm{s}, \mathrm{d}_1, \mathrm{d}_2\}$, $b \in \{z, x\}$. Также отметим, что величины $Y_0^{b\beta}$ в общем случае отличны от нуля ввиду темновых срабатываний (в естественных условиях) или действий противника.

Отметим, что коэффициенты приёма $j$-фотонных состояний не зависят от базиса, если эффективности детекторов совпадают, но зависят от базиса в случае несовпадающих эффективностей. Пусть, как и прежде, детектор, соответствующий результату «0», обладает эффективностью единица, а детектор, соответствующий результату «1» — эффективностью $\eta < 1$. И пусть, например, в оптическую схему получателя входит однофотонное состояние $|0\rangle$. Тогда оно будет

зарегистрировано с вероятностью 1, если его измерить в $z$-базие, но с вероятностью $(1+\eta)/2$, если его измерить в $x$-базисе. В работе [162], в которой также делается попытка адаптировать метод обманных состояний на случай детекторов с несовпадающими эффективностями, принимается неявное предположение, что $Y_j^{b\beta}$ не зависит от базиса. Это предположение накладывает ограничение на допустимые входящие состояния получателя и, следовательно, на класс атак. Мы избавляемся от этого ограничения.

Поскольку $Y_j^{b\beta}$ есть условная вероятность, то

$$Q^{vb\beta} = \sum_{j=0}^{\infty} Y_j^{b\beta} \left( \frac{\mu_v^j}{j!} e^{-\mu_v} \right) = \sum_{j=0}^{\infty} Q_j^{vb\beta}, \tag{6.57}$$

$v \in \{\mathrm{s}, \mathrm{d}_1, \mathrm{d}_2\}$, где

$$Q_j^{vb\beta} = Y_j^{b\beta} \left( \frac{\mu_v^j}{j!} e^{-\mu_v} \right) \tag{6.58}$$

— совместная вероятность того, что посылка содержит $j$ фотонов и регистрируется с исходом $\beta$ при условии, что посылка была типа $v \in \{\mathrm{s}, \mathrm{d}_1, \mathrm{d}_2\}$ и обе стороны использовали базис $b$. Поскольку в генерации ключа участвуют только сигнальные состояния и только состояния, в которых обе стороны использовали базис $z$, и поскольку только информация, закодированная в однофотонных посылках, не может быть прочитана противником без внесения шума, главный интерес для нас представляют величины $Q_1^{\mathrm{s}z\beta}$, $\beta = 0, 1$. Это доля позиций с результатом измерения $\beta$ в просеянном ключе, которые получены из однофотонных посылок. Имея формулу (6.57), мы можем повторить выкладки в работе [231] и получить нижнюю границу для этой величины:

$$\begin{aligned} Q_1^{\mathrm{s}z\beta} &\geqslant Q_1^{\mathrm{Ls}z\beta} = \\ &= \frac{\mu^2 e^{-\mu}}{\mu\nu_1 - \mu\nu_2 - \nu_1^2 + \nu_2^2} \left[ Q^{\mathrm{d}_1 z\beta} e^{\nu_1} - Q^{\mathrm{d}_2 z\beta} e^{\nu_2} - \frac{\nu_1^2 - \nu_2^2}{\mu^2} \left( Q^{\mathrm{s}z\beta} e^{\mu} - Y_0^{\mathrm{L}z\beta} \right) \right], \end{aligned} \tag{6.59}$$

где

$$Y_0^{\mathrm{L}z\beta} = \max \left\{ \frac{\nu_1 Q^{\mathrm{d}_2 z\beta} e^{\nu_2} - \nu_2 Q^{\mathrm{d}_1 z\beta} e^{\nu_1}}{\nu_1 - \nu_2}, 0 \right\}. \tag{6.60}$$

Нам понадобится и тривиальная верхняя граница: $Q_1^{\mathrm{sz}\beta} \leqslant Q^{\mathrm{sz}\beta}$ (напомним, правая часть этого неравенства получателю известна). Отметим, что для вывода оценки (6.59) необходимы условия $\nu_2 < \nu_1$ и $\nu_1 + \nu_2 < \mu$, которые мы потребовали выше.

Введём дальнейшие обозначения:

- $M_{\mathrm{err}}^{vb\beta}$ — число позиций, в которых и отправитель, и получатель выбрали базис $b$, отправитель отправил посылку типа $v \in \{\mathrm{s}, \mathrm{d}_1, \mathrm{d}_2\}$ и бит $1-\beta$, но получатель зарегистрировал ошибочное значение $\beta$. Т.е. это число ошибочных регистраций результата $\beta$. Величина $M_{\mathrm{err}}^{\mathrm{sz}\beta}$ известна после исправления ошибок: исправив ошибки в просеянном ключе, получатель знает, какое количество ошибок было в его просеянном ключе. Значения битов для $b = x$ и для $v = \mathrm{d}_1, \mathrm{d}_2$ не участвуют в формировании ключа и поэтому могут быть объявлены сторонами на этапе раскрытия информации, в результате чего им также становится известным количество ошибок в них.
- $E^{vb\beta} = M_{\mathrm{err}}^{vb\beta}/M^{vb\beta}$ — доля ошибок в импульсах типа $v$ при использовании обеими сторонами базиса $b$ и результата измерения получателя $\beta$.
- $M_{j,\mathrm{err}}^{b\beta}$ — число позиций, в которых и отправитель, и получатель выбрали базис $b$, посылка содержала $j$ фотонов, состояние кодировало бит $1-\beta$, но получатель зарегистрировал ошибочное значение $\beta$. Как и $M_j^{b\beta}$ эта величина находится по крайней мере под частичным контролем противника.
- $e_j^{b\beta} = M_{j,\mathrm{err}}^{b\beta}/M_j^{b\beta}$ — доля ошибок в $j$-фотонных посылках при использовании обеими сторонами базиса $b$ и результата измерения получателя $\beta$. Эта величина находится под контролем противника, поскольку под его контролем находятся и числитель, и знаменатель. В асимптотическом случае бесконечно большого числа посылок можно считать эту величину вероятностью того, что результат измерения получателя $\beta$ ошибочен при условии, что посылка содержала $j$-фотонов и обе стороны использовали базис $b$.

Если мы также введём обозначения

$$\begin{aligned} Q^{vb} &= Q^{vb0} + Q^{vb1}, \\ E^{vb} &= \frac{M_{\mathrm{err}}^{vb0} + M_{\mathrm{err}}^{vb1}}{M^{vb0} + M^{vb1}} \end{aligned} \tag{6.61}$$

(последняя величина есть обычная доля ошибок в базисе $b$), то

$$E^{vb}Q^{vb} = E^{vb0}Q^{vb0} + E^{vb1}Q^{vb1}.$$

Поскольку $e_j^{b\beta}$ можно интерпретировать как вероятность, то

$$E^{vb\beta}Q^{vb\beta} = \sum_{j=0}^{\infty} e_j^{b\beta}Q_j^{vb\beta}, \tag{6.62}$$

$$E^{\mathrm{d}_1 x\beta}Q^{\mathrm{d}_1 x\beta}e^{\nu_1} - E^{\mathrm{d}_2 x\beta}Q^{\mathrm{d}_2 x\beta}e^{\nu_2} \geqslant e_1^{x\beta}Y_1^{x\beta}(\nu_1 - \nu_2), \tag{6.63}$$

$$e_1^{x\beta}Q_1^{\mathrm{s}x\beta} \leqslant \left(E^{\mathrm{d}_1 x\beta}Q^{\mathrm{d}_1 x\beta}e^{\nu_1} - E^{\mathrm{d}_2 x\beta}Q^{\mathrm{d}_2 x\beta}e^{\nu_2}\right)\frac{\mu e^{-\mu}}{\nu_1 - \nu_2}. \tag{6.64}$$

Оценки (6.59) и (6.64) суть основные результаты этого подраздела.

### 6.8.3 Достижимая скорость генерации секретного ключа в протоколе с обманными состояниями

Теперь применим эти результаты для того, чтобы адаптировать формулу (6.40) для случая отправляемых состояний вида (6.55). Последнее слагаемое $p_{\mathrm{det}}h(Q_z)$ в (6.40) записывается в новых обозначениях как $Q^{\mathrm{s}z}h(E^{\mathrm{s}z})$. В самом деле, $p_{\mathrm{det}}$ в прежних обозначениях обозначало вероятность регистрации получателем посылки, участвующей в генерации ключа. В предыдущих разделах последнее означало только то, что обе стороны использовали базис $z$. Теперь добавляется условие, что посылка — сигнальная, а не обманная. Поэтому теперь этой вероятности соответствует $Q^{\mathrm{s}z}$. Также $Q_z$ в предыдущих разделах и $E^{\mathrm{s}z}$ в этом разделе по своему смыслу обозначают одно и то же: долю ошибок в просеянном ключе, т.е. в позициях, в которых было отправлено сигнальное состояние и обе стороны использовали $z$-базис.

Первые два члена в (6.40) описывают нехватку информации противника и, следовательно, должны содержать только вклад от однофотонных состояний: информация, отправленная в многофотонных посылках, полностью противнику известна. Сейчас мы довольствуемся этим соображением на словесном уровне (как обычно делается в литературе), но в разделе 6.8.5 мы докажем его строго. Поэтому пусть $\rho_{AB}$ — (ненормированный) оператор плотности, содержащий

только вакуумную и однофотонную часть сигнальной посылки. Тогда, в соответствии с предыдущими определениями,

$$p_\beta = \mathrm{Tr}[(I_2 \otimes \mathscr{D}_z^*(P_\beta^B))\rho_{AB}] = Q_1^{\mathrm{s}b\beta}, \tag{6.65}$$

$$\mathrm{Tr}(P_0^B \otimes \mathscr{D}_x^*(P_1^B) + \eta P_1^B \otimes \mathscr{D}_x^*(P_0^B))\rho_{AB} = \eta e_1^{x0} Q_1^{\mathrm{s}x0} + e_1^{x1} Q_1^{\mathrm{s}x1} \equiv Q_{x,\mathrm{err}}\eta, \tag{6.66}$$

где последнее равенство есть определение новой величины $Q_{x,\mathrm{err}}$. Обозначим также

$$Q_1^{\mathrm{s}z} = Q_1^{\mathrm{s}z0} + Q_1^{\mathrm{s}z1}. \tag{6.67}$$

Итак, первые два слагаемых в формуле (6.40) сохраняют свой вид с заменой $p_{\mathrm{det}}$ на $Q_1^{\mathrm{s}z}$, где $t$ и $\delta_z$ выражаются через $p_0$ и $p_1$ тем же образом, что и прежде, но запишем новое выражение для $\delta_x$:

$$\delta_x = \frac{(t - 2Q_{x,\mathrm{err}})\sqrt{\eta}}{Q^{\mathrm{s}z}}.$$

Это выражение эквивалентно прежнему (6.39): ввиду определений (6.23), (6.25) и (6.66) величина $Q_{x,\mathrm{err}}$ соответствует $tQ_x$ в прежних обозначениях.

Таким образом, предельная скорость генерации ключа равна

$$R = Q_1^{\mathrm{s}z}\left[h\left(\frac{1-\delta_z}{2}\right) - h\left(\frac{1-\sqrt{\delta_z^2+\delta_x^2}}{2}\right)\right] - Q^{\mathrm{s}z}h(E^{\mathrm{s}z}). \tag{6.68}$$

Но теперь величины $Q_1^{\mathrm{s}z1}$, $Q_1^{\mathrm{s}z1}$ и $Q_{x,\mathrm{err}}$ нам не даны непосредственно, мы имеем лишь оценки. Следовательно, для получения консервативной оценки достижимых скоростей генерации секретного ключа легитимные стороны должны рассмотреть наихудший для них сценарий и взять значения этих величин (в пределах, задаваемых верхними и нижними оценками), доставляющие минимум функции (6.68).

Легко видеть, что функция (6.68) монотонно убывает с ростом $Q_{x,\mathrm{err}}$. Это понятно и по смыслу величины $Q_{x,\mathrm{err}}$: она отражает уровень ошибок в $x$-базисе, рост которого отражает увеличение степени вмешательства противника и, следовательно, его информации о просеянном ключе. Поэтому необходимо взять

верхнюю оценку этой величины, используя (6.64):

$$Q_{x,\mathrm{err}} \leqslant Q^{\mathrm{U}}_{x,\mathrm{err}} = \\ = \Big[ \left(E^{\mathrm{d}_1 x0} Q^{\mathrm{d}_1 x0} + E^{\mathrm{d}_1 x1} Q^{\mathrm{d}_1 x1}/\eta\right) e^{\nu_1} - \left(E^{\mathrm{d}_2 x0} Q^{\mathrm{d}_2 x0} + E^{\mathrm{d}_2 x1} Q^{\mathrm{d}_2 x1}/\eta\right) e^{\nu_2} \Big] \frac{\mu e^{-\mu}}{\nu_1 - \nu_2}. \tag{6.69}$$

Зависимость (6.68) от $Q_1^{\mathrm{s}z0}$ и $Q_1^{\mathrm{s}z1}$, вообще говоря, немонотонна и потому необходимо минимизировать по ним в пределах

$$Q_1^{\mathrm{L}\mathrm{s}z\beta} \leqslant Q_1^{\mathrm{s}z\beta} \leqslant Q^{\mathrm{s}z\beta}, \quad \beta = 0, 1, \tag{6.70}$$

где $Q_1^{\mathrm{L}\mathrm{s}z\beta}$ определены в (6.59).

Однако приводимых ниже на рисунке 6.5 численных расчётах минимум всегда достигается на нижних границах этих величин: $Q_1^{\mathrm{s}z\beta} = Q_1^{\mathrm{L}\mathrm{s}z\beta}$, $\beta = 0, 1$. Причина состоит в том, что функция (6.68) монотонно убывает с убыванием $Q_1^{\mathrm{s}z0}$ или $Q_1^{\mathrm{s}z1}$ в некоторой окрестности точки $(\bar{Q}_1^{\mathrm{s}z0}, \bar{Q}_1^{\mathrm{s}z1})$, если $\bar{Q}_1^{\mathrm{s}z1}/\bar{Q}_1^{\mathrm{s}z0} = \eta$. Это условие выполняется для канала (6.5)–(6.7), см. равенства (6.31)–(6.33). Следовательно, если нижние границы $Q_1^{\mathrm{L}\mathrm{s}z\beta}$ не так далеки от фактических значений $Q_1^{\mathrm{s}z\beta}$ (т.е. довольно точны) и принадлежат этой окрестности, то минимум достигается на этих нижних границах. На практике эти нижние оценки действительно довольно точны: как мы писали выше, они точны в пределе малых интенсивностей. Но для общности мы оставим операцию минимизации.

Итак, конечная формула для достижимой скорости генерации секретного ключа есть

$$R = \min_{Q_1^{\mathrm{s}z0}, Q_1^{\mathrm{s}z1}} Q_1^{\mathrm{s}z} \left[ h\left(\frac{1-\delta_z}{2}\right) - h\left(\frac{1-\sqrt{\delta_z^2+\delta_x^2}}{2}\right) \right] - Q^{\mathrm{s}z} h(E^{\mathrm{s}z}), \tag{6.71}$$

где минимизация осуществляется в пределах (6.70), $\delta_z$, $Q^{\mathrm{s}z}$, $E^{\mathrm{s}z}$, $p_0$, $p_1$ и $Q_1^{\mathrm{s}z}$ задаются формулами (6.38) (с заменой $p_{\mathrm{det}}$ на $Q_1^{\mathrm{s}z}$), (6.61), (6.65) и (6.67),

$$\delta_x = \frac{(t - 2Q^{\mathrm{U}}_{x,\mathrm{err}})\sqrt{\eta}}{Q^{\mathrm{s}z}}$$

и, наконец, $Q^{\mathrm{U}}_{x,\mathrm{err}}$ задаётся формулой (6.69).

### 6.8.4 О предположениях метода обманных состояний

Обсудим теперь роль предположений, которые мы сделали вначале, что противник может делать что угодно с многофотонными посылками (в том числе, например, добавлять новые фотоны), но не может добавлять фотоны в однофотонные посылки. Анализ статистики регистраций в протоколе BB84 с обманными состояниями состоит из двух частей:

а) Оценка количества позиций в просеянном ключе, полученных из однофотонных посылок, и доли ошибок в них;

б) Оценка информации противника о битах, закодированных в этих позициях. Для этого используются результаты части а) и результаты анализа стойкости в предположении однофотонных посылок.

Биты, закодированные в многофотонные посылки, считаются полностью известными противнику.

Такая схема позволяет адаптировать результаты анализа, выполненного в предположении однофотонных источников, на случай слабых когерентных импульсов. Но предположения, сделанные для источника когерентных состояний, должны быть согласованны с условиями, сделанными для источника одиночных фотонов.

В нашем анализе однофотонных состояний мы предполагали, что противнику не разрешается добавлять фотоны в посылку. Следовательно, чтобы использовать результаты этого анализа, т.е. формулу (6.40), в части а), мы должны предположить, что если посылка содержит один фотон, то противник не может добавлять в неё фотоны.

Рассмотрим теперь часть а). Замечательное свойство оценок числа позиций в просеянном ключе, полученных из однофотонных посылок, и доли ошибок в них, выведенных в [231], заключается в том, что они вообще не накладывают каких-либо ограничений на эффективности детекторов или на величины $Y_j^{b\beta}$ и $e_j^{b\beta}$. Неравенства (6.59) и (6.64) используют только неотрицательность $Y_j^{b\beta}$ и $e_j^{b\beta}$. А именно, неравенство (6.63) — это простое алгебраическое следствие равенств (6.62) и (6.58) и неотрицательности $Y_j^{b\beta}$ и $e_j^{b\beta}$. Вывод оценки (6.59) несколько

сложнее и приводится в [231], но также основан только на неотрицательности $Y_j^{b\beta}$. Это означает, что оценки (6.59) и (6.64) верны, даже если противник может задавать для всех $Y_j^{b\beta}$ любые значения. В частности, противник может добавлять фотоны, чтобы увеличить $Y_j^{b\beta}$. Оценки части а) справедливы, даже если противник имеет полный контроль над эффективностями детекторов. Иными словами, эти оценки выведены вообще без каких-либо предположений на возможности противника. Мы накладываем условие, что противник не может добавлять фотоны в однофотонные состояния только для того, чтобы можно было воспользоваться результатами анализа для однофотонных посылок (части б)).

Разделение статистики регистраций отдельно для каждого базиса и для каждого результата измерения также нужно для части б), но не для части а). Оценка агрегированных величин $Q_1^{\mathrm{s}}$ и $e_1$, как делается в методе обманных состояний при детекторах с одинаковой эффективностью, также возможна в части а), потому что, повторим, при их выводе совпадение эффективности детекторов не предполагается. Но величины $p_0$, $p_1$ и $Q_x$, входящие в (6.40), требуют сбора отдельной статистики для каждого базиса и каждого исхода измерения.

### 6.8.5 Универсальность метода обманных состояний

Несмотря на то, что в этом разделе (как и обычно делается в литературе) метод обманных состояний описан как ответ на атаку расщеплением по числу фотонов, этот метод обеспечивает стойкость ко всем атакам, использующих то, что часть посылок содержат более одного фотона. В литературе обычно это не объясняется, поскольку считается очевидным, но здесь мы приведём формальное доказательство.

Введём снова дополнительный регистр (подсистему) $\overline{A}$ размерности 2, в которую отправитель записывает своё значение бита. Тогда совместное состояние $\overline{A}$ и $A$, т.е. регистра с записанным значением бита и собственно квантового сигнального состояния в пространстве $\mathscr{F}(\mathbb{C}^2)$, при использовании базиса $z$ имеет

вид

$$\rho_{\overline{A}A} = \frac{1}{2}\sum_{u=0}^{1} |u\rangle_{\overline{A}} \langle u| \otimes \rho_{\mu u},$$

где $\rho_{\mu u}$ даётся формулой (6.55). Обозначим также

$$\widetilde{\rho}^{(1)}_{\overline{A}A} = \frac{1}{2}\sum_{u=0}^{1} |u\rangle_{\overline{A}} \langle u| \otimes P_1\rho_{\mu u}P_1 = \frac{\mu e^{-\mu}}{2}\sum_{u=0}^{1} |u\rangle_{\overline{A}} \langle u| \otimes |u\rangle_A \langle u|,$$

где $P_1$ — проектор на однофотонное подпространство в $\mathscr{F}(\mathbb{C}^2)$, см. (6.56).

Пусть $\Upsilon : \mathfrak{T}(\mathscr{H}_A) \to \mathfrak{T}(\mathscr{H}_B \otimes \mathscr{H}_E)$ — произвольное линейное, вполне положительное, не увеличивающее след отображение, которое учитывает как действия противника и/или естественные шум и потери (ср. с (6.8)), так и измерение приёмной стороной (включая затухание на детекторе 1) и отсеивание данной позиции, если не сработал ни один детектор (см. раздел 6.4). Поскольку $\Upsilon$ включает просеивание, то, вообще говоря, оно не сохраняет след. Обозначим

$$\begin{aligned}
\rho_{\overline{A}BE} &= (Q^{\mathrm{s}z})^{-1}(\mathrm{Id}_{\overline{A}} \otimes \Upsilon)(\rho_{\overline{A}A}), \qquad & Q^{\mathrm{s}z} &= \mathrm{Tr}(\mathrm{Id}_{\overline{A}} \otimes \Upsilon)(\rho_{\overline{A}A}) \\
\rho^{(1)}_{\overline{A}BE} &= (Q^{\mathrm{s}z}_1)^{-1}\,\mathrm{Tr}(\mathrm{Id}_{\overline{A}} \otimes \Upsilon)(\widetilde{\rho}^{(1)}_{\overline{A}A}), & Q^{\mathrm{s}z}_1 &= \mathrm{Tr}(\mathrm{Id}_{\overline{A}} \otimes \Upsilon)(\widetilde{\rho}^{(1)}_{\overline{A}A}).
\end{aligned}$$

**Теорема 6.2.** *Для любого линейного, вполне положительного, не увеличивающего след отображения $\Upsilon$ выполняется неравенство*

$$Q^{\mathrm{s}z} H(\overline{A}|E) \geqslant Q^{\mathrm{s}z}_1 H(\overline{A}|E)_{(1)}, \tag{6.72}$$

*где $H(\overline{A}|E)$ рассчитывается для состояния $\rho_{\overline{A}BE}$, $H(\overline{A}|E)_{(1)}$ — для состояния $\rho^{(1)}_{\overline{A}BE}$.*

*Доказательство.* Утверждение теоремы — это следствие того, что состояние $\rho_{\mu u}$ есть смесь состояний с определённым числом фотонов (6.55), линейности $\Upsilon$ и совместной выпуклости квантовой относительной энтропии (1.14), через которую выражается квантовая условная энтропия (6.1).

Очевидно,

$$\rho_{\mu u} = P_1\rho_{\mu u}P_1 + (I_A - P_1)\rho_{\mu u}(I_A - P_1),$$

поэтому, ввиду линейности $\Upsilon$,

$$Q^{\mathrm{s}z}\rho_{\overline{A}BE} = (\mathrm{Id}_{\overline{A}} \otimes \Upsilon)(\rho_{\overline{A}A}) = Q^{\mathrm{s}z}_1\rho^{(1)}_{\overline{A}BE} + Q^{\mathrm{s}z}_{\neq 1}\rho^{(\neq 1)}_{\overline{A}BE},$$

где

$$\rho_{\overline{A}BE}^{(\neq 1)} = (Q_{\neq 1}^{\mathrm{sz}})^{-1}\,\mathrm{Tr}(\mathrm{Id}_{\overline{A}} \otimes \Upsilon)(\widetilde{\rho}_{\overline{A}A}^{(\neq 1)}), \quad Q_{\neq 1}^{\mathrm{sz}} = \mathrm{Tr}(\mathrm{Id}_{\overline{A}} \otimes \Upsilon)(\widetilde{\rho}_{\overline{A}A}^{(\neq 1)}),$$
$$\widetilde{\rho}_{\overline{A}A}^{(\neq 1)} = \frac{1}{2}\sum_{u=0}^{1} |u\rangle_{\overline{A}}\langle u| \otimes (I_A - P_1)\rho_{\mu u}(I_A - P_1).$$

Тогда в силу совместной выпуклости квантовой относительной энтропии

$$Q^{\mathrm{sz}} H(\overline{A}|E) \geqslant Q_1^{\mathrm{sz}} H(\overline{A}|E)_{(1)} + Q_{\neq 1}^{\mathrm{sz}} H(\overline{A}|E)_{(\neq 1)} \geqslant Q_1^{\mathrm{sz}} H(\overline{A}|E)_{(1)},$$

что и требовалось доказать. Здесь условная энтропия $H(\overline{A}|E)_{(1)}$ рассчитывается для состояния $\rho_{\overline{A}BE}^{(\neq 1)}$. Она неотрицательна, поскольку это состояние — классически-квантовое. □

Теорема 6.2 доказывает, что метод обманных состояний является универсальным, т.е. стойким к произвольным атакам (для произвольных отображений $\Upsilon$), а не только к атаке расщеплением по числу фотонов. Точнее говоря, теорема утверждает универсальность нижней оценки (6.72), а метод обманных состояний позволяет оценить $Q_1^{\mathrm{sz}}$ снизу, а также получить оценки величин, входящих в оценку $H(\overline{A}|E)_{(1)}$.

Естественно возникает вопрос, существует ли атака, при которой оценка (6.72) становится точной. Для этого необходимо заметить, что в этой оценке принимается равной нулю нехватка информации противника не только о битах, закодированных в многофотонных посылках, но даже и о битах в позициях, в которых посылка — вакуумная. Очевидно, если посылка — ваууумная, то ни у противника, ни у легитимного получателя нет возможности получить какую-либо информацию о бите, т.е. нехватка информации равна в этом случае единице. Поэтому при $Y_0^{z\beta} \neq 0$ оценка неточна. Но на практике величины $Y_0^{z\beta}$, возникающие из-за темновых срабатываний, достаточно малы, поэтому эта погрешность невелика. Рассмотрим поэтому случай $Y_0^{z\beta} = 0$, $\beta = 0, 1$.

В этом случае при реалистичных уровнях потерь оценка (6.72) становится точной при атаке расщеплением по числу фотонов, так что можно говорить об оптимальности этой атаки. В самом деле, эта атака обеспечивает противнику

знание всех битов, закодированных в многофотонных посылках, что и положено в основу этой оценки. Однако при изъятии из многофотонного импульса одного фотона противник создаёт дополнительные потери в канале. Если они не превышают естественного уровня потерь, то противник может заменить канал связи на канал с меньшим уровнем потерь, вплоть до канала без потерь (формально это выражается отсутствием ограничений на $\Upsilon$). В противном случае противник не может таким образом перехватить все многофотонные импульсы. Однако на практике уровень потерь обычно достаточно высок, чтоб такой перехват был возможен.

### 6.8.6 Вычисление скорости генерации для реалистичных значений параметров

Результаты вычислений по формуле (6.71) достижимой скорости генерации секретного ключа по протоколу BB84 с обманными состояниями при несовпадающих эффективностях детекторов приведены на рисунке 6.5. Параметры выбраны следующими:

- Интенсивность сигнальных состояний $\mu = 0.5$,
- Интенсивности обманных состояний $\nu_1 = 0.1$ и $\nu_2 = 0$,
- Коэффициент затухания в оптоволокне $d = 0.2$ дБ/км (децибелла на километр),
- Потери в оптической схеме получателя $d_B = 5$ дБ,
- Вероятность оптической ошибки (т.е. того, что фотон в результате неточной настройки оптической схемы поступит на неправильный детектор) $e_{\mathrm{det}} = 0.01$,
- Эффективности детекторов $\eta_0 = 0.1$ и $\eta_1 = 0.07$ (т.е. $\eta = \eta_1/\eta_0 = 0.7$),
- Вероятность темнового срабатывания каждого детектора в промежуток времени, равный длительности одного импульса, $Y_0^{b\beta} = 10^{-6}$ (для всех $b$ и $\beta$).

На графике мы сравниваем достижимую скорость генерации секретного ключа, вычисляемую по формуле (6.71), с предельно достижимой скоростью: формулой (6.68) с фактическими значениями $Q_1^{\mathrm{sz}1}$, $Q_1^{\mathrm{sz}1}$ и $Q_{x,\mathrm{err}}$.

Для вычисления фактических значений этих величин мы воспользовались стандартной моделью потерь и ошибок в схеме с оптоволоконной линией связи, приведённой, например, в [231]. Вероятность того, что фотон, посланный отправителем, достигнет детектора получателя, равна $10^{-(dl+d_B)/10}$, где $l$ — расстояние в километрах. Поскольку эта вероятность при нашем значении $d_B$ достаточно мала даже при $l = 0$ и очень мала на реалистичных расстояниях (десятки километров), вероятность того, что один из фотонов в $j$-фотонном состоянии достигнет детектора получателя, можно приближённо вычислить как

$$j10^{-(dl+d_B)/10}. \tag{6.73}$$

В этом приближении мы пренебрегли вероятностью того, что более одного фотона в посылке дойдёт до детектора получателя.

Вероятность оптической ошибки $e_{\mathrm{det}}$ есть вероятность того, что фотон достиг детекторов, но отправился на ошибочный детектор. Тогда срабатывание детектора $\beta \in \{0, 1\}$ происходит, либо если был послан бит $\beta$ (с вероятностью 1/2) и не происходит оптической ошибки (с вероятностью $1 - e_{\mathrm{det}}$), либо если был послан бит $1 - \beta$ (также с вероятностью 1/2) и происходит оптическая ошибка (с вероятностью $e_{\mathrm{det}}$). В обоих случаях вероятность того, что один детектор в $j$-фотонной посылке, достигнет детекторов, равна (6.73), а детектор $\beta$ срабатывает с вероятностью $\eta_\beta$. Другая возможность — это темновое срабатывание детектора $\beta$, которое происходит с вероятностью $Y_0^{b\beta}$. Мы пренебрегаем событием, заключающемся в одновременном темновом срабатывании и регистрации фотона, поскольку обе вероятности малы. Таким образом, фактические значения $Y_j^{b\beta}$ составят

$$\begin{aligned} Y_j^{b\beta} &= Y_0^{b\beta} + j10^{-(dl+d_B)/10} \left( \frac{(1 - e_{\mathrm{det}}) + e_{\mathrm{det}}}{2} \right) \eta_\beta \\ &= Y_0^{b\beta} + j10^{-(dl+d_B)/10}\, \eta_\beta/2. \end{aligned} \tag{6.74}$$

Тогда фактические значения $Q^{vb\beta}$ и $Q_1^{vb\beta}$ даются формулами (6.57), (6.58) и (6.74). Фактические значения $e_j^{b\beta}$ даёт формула

$$e_j^{b\beta} = \frac{Y_0^{b\beta} + j10^{-(dl+d_B)/10} e_{\mathrm{det}} \eta_\beta}{2Y_j^{b\beta}}, \tag{6.75}$$

где мы учли, что темновое срабатывание может быть правильным или ошибочным с вероятностью 1/2. Тогда фактические значения $E^{vb\beta}$ и $Q_{x,\mathrm{err}}$ даются формулами (6.62), (6.66) и (6.75). Отметим, что и $Y_j^{b\beta}$, и $e_j^{b\beta}$ в данном случае не зависят от базиса.

Как мы видим из рисунка 6.5, полученная оценка достижимой скорости генерации секретного ключа очень близка к предельно достижимой скорости. Это говорит о том, что оценки (6.59) и (6.64) довольно точны. Это неудивительно, поскольку, как показано в [231], оценки (6.59) и (6.64) точны в пределе $\nu_1 \to 0$, $\nu_2 = 0$.

Также на рисунке 6.5 мы сравниваем полученную достижимую скорость генерации секретного ключа с предельно достижимой скоростью для протокола BB84 с обманными состояниями, но с совпадающими эффективностями, равными $(\eta_0 + \eta_1)/2$, т.е. сравнили случаи детекторов с различными и с одинаковыми эффективностями таким же образом, как на рисунке 6.4. Это сравнение показывает, насколько несовпадение эффективностей детекторов при той же средней эффективности снижает скорость генерации секретного ключа. Как и на рисунке 6.4, мы видим, что это снижение невелико.

В заключение этого раздела и главы ещё раз подчеркнём, что полученные формулы выведены для асимптотического случая бесконечно большого количества посылок $N$. На практике количество посылок конечно, поэтому для практического использования формул необходимо их обобщение на этот случай. Принципиальных трудностей это не представляет. Например, в оценках по методу обманных состояний (см. подраздел 6.8.2) при конечных $N$ необходимо учесть статистические флуктуации, воспользовавшись методами математической статистики. Для случая детекторов с равными эффективностями это сделано в работе [325], а также автором диссертации в работе [303].

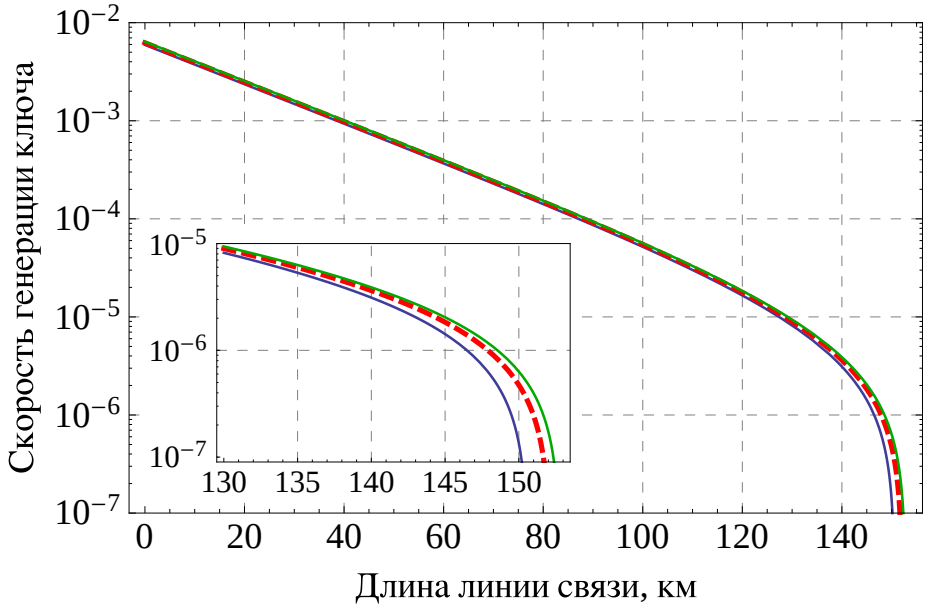



**Рисунок 6.5. – Достижимая скорость генерации секретного ключа в протоколе BB84 с обманными состояниями при несовпадающих эффективностях детекторов. Параметры даны в основном тексте. Синяя линия: расчёт по выведенной нами формуле (6.71). Красная штриховая линия: предельно достижимая скорость, формула (6.68) с фактическими значениями $Q_1^{sz1}, Q_1^{sz1}$ и $Q_{x,\mathrm{err}}$. Зелёная линия: предельно достижимая скорость для случая детекторов с совпадающими эффективностями, равными $(\eta_0 + \eta_1)/2$. Напомним, что скорость генерации ключа — это отношение бит конечного ключа к общему количеству посылок (импульсов). Поэтому если импульсы генерируются с частотой порядка 100 МГц, то скорость генерации ключа в $10^{-4}$ на одну посылку соответствует скорости порядка 10 килобит в секунду.**

Формулы, выведенные автором диссертации в статье [303], воплощены на практике в установках квантового распределения ключей Российского квантового центра [43,278], в том числе в квантовой линии связи, соединившей два офиса Сбербанка [153]. Обобщение формул, выведенных в этой главе для детекторов с несовпадающими эффективностями, на случай конечного числа посылок также будет воплощено в существующих и новых установках.

Наконец, упомянем работы [73,304], в которых автор настоящей диссертации является одним из соавторов, посвящённые изучению возможностей использования псевдослучайных последовательностей в квантовой криптографии.

# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты данной диссертационной работы состоят в следующем:

1. Для широкого класса уравнений Горини–Коссаковски–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) построен функционал производства энтропии и доказана его неотрицательность. Доказана также неотрицательность по отдельности адиабатического и неадиабатического вкладов в производство энтропии в окрестности стационарного состояния и, при определённых предположениях, для произвольных квантовых состояний.

2. Предложен метод поиска стационарных решений уравнения ГКСЛ в теории открытых квантовых систем, основанный на свойствах функционала производства энтропии. С помощью этого метода найден общий вид стационарных решений для нескольких моделей, для которых до этого общий вид стационарных решений в аналитическом виде известен не был.

3. Доказано существование обратимых по времени микроскопических решений нелинейного интегро-дифференциального кинетического уравнения Больцмана–Энскога для газа из твёрдых шаров, открытых Н.Н. Боголюбовым на физическом уровне строгости.

4. Полностью описаны квазиклассические меры, соответствующие свободной квантовой динамике когерентных состояний на торе на различных масштабах времени. Показано, что сглаживание по времени приводит к выравниванию плотности пространственного распределения.

5. Выведены формулы для внедиагональных элементов матрицы плотности в рамках двух теорий возмущений для динамики открытых квантовых систем: теории Фёрстера и модифицированной теории Редфилда. Это позволяет рассчитывать динамику всей матрицы плотности, а не только её диагональной части, и потому устраняет существенное ограничение этих теорий, широко используемых в теории переноса энергии в молекулярных системах.

6. Решена задача оптимального приближения к квантовому эффекту Зенона для модели Ландау–Зинера, то есть задача выбора оптимальных моментов несе-

лективных измерений определённой наблюдаемой при фиксированном их числе.

7. Доказана теорема о предельной скорости генерации секретного ключа в протоколе квантовой криптографии BB84 при несовпадающих эффективностях однофотонных детекторов. Предложен новый метод доказательства подобных теорем на основе аналитической минимизации квантовой относительной энтропии когерентности.

Автору представляются следующие возможные направления развития этих результатов:

1. Предложенный метод поиска стационарных решений уравнения Линдблада работает, когда можно задать функционал производства энтропии таким образом, чтобы адиабатический вклад в него был равен нулю. Этому удовлетворяет достаточно широкий класс уравнений, особенно если использовать имеющийся произвол в определении функционала (который необязательно должен соответствовать физическому производству энтропии). Тем не менее, не для всех уравнений это можно сделать. Представляет интерес обобщить метод на случай, когда адиабатический вклад в производство энтропии ненулевой.

2. Для развития теории квантовой динамики за пределами времени Эренфеста и теории квазиклассических мер представляет интерес явное нахождение квазиклассических мер для более сложных многообразий.

3. Установление взаимосвязи между теорией слабого предела и выводом необратимых квантовых кинетических уравнений, о котором говорилось во введении и в разделе 5.2.5.

4. Доказательство стойкости протокола квантовой криптографии BB84 и, в частности, аналитическая оценка достижимой скорости генерации секретного ключа при несовпадающих эффективностях детекторов без ограничений на количество фотонов, входящих в измерительное устройство получателя. Обобщение на случай конечного числа посылок.

## Список публикаций автора

1. Trushechkin A. S. Calculation of coherences in Förster and modified Redfield theories of excitation energy transfer // J. Chem. Phys. 2019. V. 151, N. 7. P. 074101.

2. Bochkov M. K., Trushechkin A. S. Security of quantum key distribution with detection-efficiency mismatch in the single-photon case: Tight bounds // Phys. Rev. A. 2019. V. 99, N. 3. P. 032308.

3. Трушечкин А. С. Нахождение стационарных решений уравнения Линдблада посредством исследования функционала производства энтропии // Тр. МИАН. 2018. Т. 301. С. 276–286.

4. Trushechkin A. Semiclassical evolution of quantum wave packets on the torus beyond the Ehrenfest time in terms of Husimi distributions // J. Math. Phys. 2017. V. 58, N. 6. P. 062102.

5. Трушечкин А. С. Об общем определении производства энтропии в марковских открытых квантовых системах // Итоги науки и техн. Сер. Соврем. мат. и ее прил. 2017. Т. 138. С. 82–98.

6. Trushechkin A. S., Volovich I. V. Perturbative treatment of inter-site couplings in the local description of open quantum networks // EPL. 2016. V. 113, N. 3. P. 30005.

7. Pechen A., Trushechkin A. Measurement-assisted Landau-Zener transitions // Phys. Rev. A. 2015. V. 91, N. 5. P. 052316.

8. Трушечкин А. С. Микроскопические решения кинетических уравнений и проблема необратимости // Тр. МИАН. 2014. Т. 285. С. 264–287.

9. Trushechkin A. S. Microscopic and soliton-like solutions of the Boltzmann–Enskog and generalized Enskog equations for elastic and inelastic hard spheres // Kinet. Relat. Models. 2014. V. 7, N. 4. P. 755–778.

10. Трушечкин А. С. О строгом определении микроскопических решений уравнения Больцмана–Энскога // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. 2013. № 1(30). С. 270–278.

11. Волович И. В., Трушечкин А. С. Асимптотические свойства квантовой динамики в ограниченных областях на различных масштабах времени // Изв. РАН. Сер. матем. 2012. Т. 76, № 1. С. 43–84.

12. Trushechkin A. S. Derivation of the particle dynamics from kinetic equations // p-Adic Numbers, Ultrametic Analysis and Applications. 2012. V. 4, N. 2. P. 130–142.

13. Trushechkin A. S. Derivation of the Boltzmann equation and entropy production in functional mechanics // p-Adic Numbers, Ultrametic Analysis and Applications. 2011. V. 3, N. 3. P. 225–235.

14. Трушечкин А. С. Уравнение Больцмана и H-теорема в функциональной формулировке классической механики // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. 2011. № 1(22). С. 158–164.

15. Трушечкин А. С. Необратимость и роль измерительного прибора в функциональной формулировке классической механики // ТМФ. 2010. Т. 164, № 3. С. 435–440.

## Список литературы

1. Авербух И. Ш., Перельман Н. Ф. Динамика волновых пакетов высоковозбуждённых состояний атомов и молекул // УФН. 1991. Т. 161, № 7. С. 41—81.

2. Аджиев С. З., Веденяпин В. В. Временные средние и экстремали Больцмана для марковских цепей, дискретного уравнения Лиувилля и круговой модели Каца // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2011. Т. 51, № 11. С. 2063–2074.

3. Аладовъ Н. С. О распредѣленіи квадратичныхъ и неквадратичныхъ вычетовъ простаго числа $P$ въ ряду $1, 2, \ldots, P-1$ // Матем. сб. 1896. Т. 18, № 1. С. 61–75.

4. Алексеев В. М., Тихомиров В. М., Фомин С. В. Оптимальное управление. М.: Наука, 1979.

5. Андреев В. А., Давидович Д. М., Давидович Л. Д., Давидович М. Д., Манько В. И., Манько М. А. Трансформационное свойство функции Хусими и ее связь с функцией Вигнера и симплектическими томограммами // ТМФ. 2011. Т.166, №3. С.410–424

6. Арефьева И. Я., Волович И. В., Козырев С. В. Метод стохастического предела и интерференция в квантовых многочастичных системах // ТМФ. 2015. Т. 183, № 3. С. 388–408.

7. Архипов А. С., Лозовик Ю. Е., Манько В. И., Шарапов В. А. Томография центра масс и вероятностное представление квантовых состояний в приложении к задачам о туннелировании // ТМФ. 2005. Т. 142, № 2. С. 371–387.

8. Батурина О. В., Моржин О. В. Оптимизация управления квантовой системой на модели Ландау–Зинера // Программные системы: теория и приложения. 2011. Т. 2, № 1. С. 51–61.

9. Белавкин В. П. К теории управления квантовыми наблюдаемыми системами // Автомат. и телемех. 1983. № 2. С. 50–63.

10. Белавкин В. П., Колокольцов В. Н. Квазиклассическая асимптотика квантовых стохастических уравнений // ТМФ. 1991. Т. 89, № 2. С. 163–177.

11. Белавкин В. П., Маслов В. П., Таривердиев С. Э. Асимптотическая динамика системы большого числа частиц, описываемой уравнениями Колмогорова–Феллера // ТМФ. 1981. Т. 49, № 3. С. 298–306.

12. Беллман Р. Динамическое программирование. М.: Изд-во иностранной литературы, 1960.

13. Богданов Ю. И., Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: достижения, трудности реализации и перспективы // Микроэлектроника. 2011. Т. 40, № 4. С. 243–255.

14. Богданов Ю. И., Галеев Р. Ф., Кулик С. П., Масленников Г. А., Морева Е. В. Восстановление поляризационных состояний бифотонного поля // Письма в ЖЭТФ. 2005. Т. 82, № 3. С. 180–184.

15. Богданов Ю. И., Кокин А. А., Лукичев В.Ф., Орликовский А. А., Семенихин И. А., Чернявский А. Ю. Квантовая механика и развитие информационных технологий // Информационные технологии и вычислительные системы. 2012. № 1. С. 17–31.

16. Богданов Ю. И., Фастовец Д. В., Бантыш Б. И., Чернявский А. Ю., Семенихин И. А., Богданова Н. А., Катамадзе К. Г., Кузнецов Ю. А., Кокин А. А., Лукичев В.Ф. Квантовые компьютеры: достижения, трудности реализации и перспективы // Квантовая электроника. 2018. Т. 48, № 11. С. 1016–1022.

17. Боголюбов Н. Н. Микроскопические решения уравнения Больцмана–Энскога в кинетической теории для упругих шаров // ТМФ. 1975. Т. 24, № 2. С. 242–247.

18. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.; Л.: Гостехиздат, 1946.

19. Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.). Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, 1984.

20. Боголюбов Н. Н., Логунов А. А., Оксак А. И., Тодоров И. Т. Общие принципы квантово теории поля. М.: Физматлит, 1987.

21. Больцман Л. Избранные труды. М.: Наука, 1984.

22. Бройер Х.-П., Петруччионе Ф. Теория открытых квантовых систем. М.; Ижевск: РХД, 2010.

23. Бутковский А. Г, Самойленко Ю. А. Управление квантовомеханическими процессами. М.: Наука, 1984.

24. Владимиров В. С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1981.

25. Веденяпин В. В. Временные средние и экстремали по Больцману // Докл. РАН. 2008. Т. 422, № 2. С. 161–163.

26. Веденяпин В. В. Кинетические уравнения Больцмана и Власова. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001.

27. Веденяпин В. В., Аджиев С. З. Энтропия по Больцману и Пуанкаре // УМН. 2014. Т. 69, № 6. С. 45–80.

28. Веденяпин В. В., Аджиев С. З., Казанцева В. В. Энтропия по Больцману и Пуанкаре, экстремали Больцмана и метод Гамильтона–Якоби в негамильтоновой ситуации // Современная математика. Фундаментальные направления. 2018. Т. 64, № 1. С. 37–59.

29. Власов А. А. Теория многих частиц. М.: Гостехиздат, 1950.

30. Волович И. В. Проблема необратимости и функциональная формулировка классической механики // Вестник Самарского государственного университета. 2009. № 8/1(67). С. 35—55.

31. Волович И. В., Козырев С. В. Манипуляция состояниями вырожденной квантовой системы // Тр. МИАН. 2016. Т. 294. С. 256–267.

32. Волович И. В., Сакбаев В. Ж. О квантовой динамике на $C^*$-алгебрах // Тр. МИАН. 2018. Т. 301. С. 33–47.

33. Волович И. В., Трушечкин А. С. О квантовых сжатых состояниях на отрезке и соотношениях неопределённостей для наноскопических систем // Труды Математического института им. В. А. Стеклова. 2009. Т. 265. С. 288–319.

34. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматлит, 1963.

35. Доброхотов С. Ю., Назайкинский В. Е., Шафаревич А. И. Новые интегральные представления канонического оператора Маслова в особых картах // Изв. РАН. Сер. матем. 2017. Т. 81, № 2. С. 53–96.

36. Доброхотов С. Ю., Тироцци Б., Шафаревич А. И. Представления быстроубывающих функций каноническим оператором Маслова // Матем. заметки. 2007. Т. 85, № 5. С. 792–796.

37. Доброхотов С. Ю., Макракис Д. Н., Назайкинский В. Е., Тудоровский Т. Я. Новые формулы для канонического оператора Маслова в окрестности фокальных точек и каустик в двумерных квазиклассических асимптотиках // ТМФ. 2013. Т. 77, № 3. С. 355–386.

38. Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.

39. Зубарев Д. Н., Морозов В. Г. Формулировка граничных условий к цепочке Боголюбова с учётом локальных законов сохранения // ТМФ. 1984. Т. 60, № 2. С. 270–279.

40. Зубарев Д. Н., Морозов В. Г., Омелян И. П., Токарчук М. В. О кинетических уравнениях для плотных газов и жидкостей // ТМФ. 1991. Т. 87, № 1. С. 113–129.

41. Ивкина Ю. П., Орлов Ю. Н. О кинетике бесстолкновительной сплошной среды // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2006. № 049.

42. Катанаев М. О. Геометрические методы в математической физике. Приложения в квантовой механике. В 2-х ч. Часть 2 // Лекц. курсы НОЦ. Вып. 26. М.: МИАН, 2015. С. 3–184.

43. Киктенко Е. О., Пожар Н. О., Дуплинский А. В., Канапин А. А., Соколов А. С., Воробей С. С., Миллер А. В., Устимчик В. Е., Ануфриев М. Н., Трушечкин А. С., Юнусов Р. Р., Курочкин В. Л., Курочкин Ю. В., Федоров А. К. Демонстрация сети квантового распределения ключа в городских оптоволоконных линиях связи // Квантовая электроника. 2017. Т. 47, № 9. С. 798–802.

44. Килин С. Я., Макаров Е. К. О стационарных решениях уравнений линдбладовского типа // Тр. Ин-та матем. 2014. Т. 22, № 2. С. 53–62.

45. Козлов В. В. Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре. М.; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002.

46. Козлов В. В. Ансамбли Гиббса и неравновесная статистическая механика. М.; Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований, 2008.

47. Козлов В. В., Смолянов О. Г. Функция Вигнера и диффузия в бесстолкновительной среде, состоящей из квантовых частиц // Теория вероятн. и ее примен. 2007. Т. 51, № 1. С. 109–125.

48. Козлов В. В., Смолянов О. Г. Слабая сходимость состояний в квантовой статистической механике // Докл. РАН. 2007. Т. 417, № 2. С. 180–184.

49. Козлов В. В., Трещёв Д. В. Слабая сходимость решений уравнения Лиувилля для нелинейных гамильтоновых систем // ТМФ. 2003. Т. 134, № 3. С. 388–400.

50. Козлов В. В., Трещёв Д. В. Эволюция мер в фазовом пространстве нелинейных гамильтоновых систем // ТМФ. 2003. Т. 136, № 3. С. 496–506.

51. Козлов В. В., Трещёв Д. В. Тонкая и грубая энтропия в задачах статистической механики // ТМФ. 2007. Т. 151, № 1. С. 120–137.

52. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002.

53. Лопатин А. С. Метод отжига // Стохастическая оптимизация в информатике. 2005. Т. 1, № 1. С. 133–149.

54. Мамфорд Д. Лекции о тэта-функциях. М.: Мир, 1988. 448 с.

55. Маркевич Е. А., Трушечкин А. С. Квантовый алгоритм ветвей и границ и его применение к задаче коммивояжера // Итоги науки и техн. Сер. Соврем. мат. и ее прил. 2017. Т. 138. С. 60–75.

56. Маслов В. П., Федорюк М. В. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1976.

57. Мороз Б. З. О распределении степенных вычетов и невычетов // Вестник ЛГУ. 1961. Т. 16, № 19. С. 164–169.

58. Мороз Б. З. Аналитические задачи в алгебраической теории чисел и диофантовой геометрии. М.: МЦНМО, 2017.

59. Назайкинский В. Е. О представлениях локализованных функций в $\mathbb{R}^2$ каноническим оператором Маслова // Матем. заметки. 2014. Т. 96, № 1, С. 88–100.

60. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. М.: Мир, 2006.

61. Орлов Ю. Н., Ивкина Ю. П. Обобщение теоремы Козлова–Пуанкаре о диффузии для бесстолкновительной сплошной среды // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2008. № 083.

62. Осколков К. И. Ряды и интегралы И.М. Виноградова и их приложения // Тр. МИАН СССР. 1989. Т. 190. С. 186–221.

63. Осколков К. И. Ряды И.М. Виноградова в задаче Коши для уравнений типа Шрёдингера // Тр. МИАН. 1991. Т. 200. С. 265–288.

64. Петрина Д. Я., Герасименко В. И., Малышев П. В. Математические основы классической статистической механики. Киев: Наукова думка, 1985.

65. Печень А. Н., Ильин Н. Б. О задаче максимизации вероятности перехода в $n$-уровневой квантовой системе с помощью неселективных измерений // Тр. МИАН. 2016. Т. 294. С. 248–255.

66. Покровский В. Л. Ландау и современная физика // УФН. 2009. Т. 179, № 11. С. 1237–1244.

67. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001.

68. Пуанкаре А. Замечания о кинетической теории газов // Избранные труды в трёх томах. Т. III. Математика. Теоретическая физика. Анализ математических и естественнонаучных работ Анри Пуанкаре. М.: Наука, 1974. С. 385—412.

69. Сакбаев В. Ж. О динамических свойствах однопараметрического семейства преобразований, возникающих при усреднении полугрупп // Современная математика. Фундаментальные направления. 2013. Т. 48. С. 93–110.

70. Сакбаев В. Ж. Об усреднении квантовых динамических полугрупп // ТМФ. 2010. Т. 164, № 3. С. 455–463.

71. Таха Х. Введение в исследование операций. М.: Издательский дом «Вильямс», 2005.

72. Толченников А. А., Чернышев В. Л., Шафаревич А. И. Асимптотические свойства и классические динамические системы в квантовых задачах на сингулярных пространствах // Нелинейная динам. 2010. Т. 6, № 3. С. 623–638.

73. Трегубов П. А., Трушечкин А. С. Квантовые поточные шифры: невозможность безусловной стойкости // Итоги науки и техн. Сер. Соврем. мат. и ее прил. Темат. обз. 2018. Т. 151, С. 91–104.

74. Фон Нейман И. Математические основания квантовой механики. М.: Наука, 1964.

75. Фрадков А. Л., Якубовский О. А. (ред.) Управление молекулярными и квантовыми системами. М.; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003.

76. Халфин Л. А. К теории распада квазистационарного состояния // Докл. АН СССР. 1957. Т. 115, № 2. С. 1007—1010.

77. Халфин Л. А. К теории распада квазистационарного состояния // ЖЭТФ. 1957. Т. 33, № 6. С. 1371—1382.

78. Халфин Л. А. Квантовый эффект Зенона // УФН. 1990. Т. 160, № 10. С. 185—188.

79. Холево А. С. Введение в квантовую теорию информации. М.: МЦНМО, 2002.

80. Холево А. С. Вероятностные и статистические аспекты квантовой теории. М.: Наука, 1980.

81. Холево А. С. Комплементарные каналы и проблема аддитивности // Теория вероятностей и ее применения. 2006. Т. 51, №. 1, С. 133–143.

82. Холево А. С. Квантовые системы, каналы, информация. М.: МЦНМО, 2010.

83. Холево А. С. Математические основы квантовой информатики // Лекционные курсы НОЦ. Вып. 30. М.: МИАН, 2018. С. 3–117.

84. Холево А. С. Статистическая структура квантовой теории. М.; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003.

85. Чернышев В. Л., Шафаревич А. И. Квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на геометрическом графе // Матем. заметки. 2007. Т. 82, № 14. С. 606–620.

86. Accardi L., Fagnola F., Quezada R. On three new principles in non-equilibrium statistical mechanics and Markov semigroups of weak coupling limit type // Infinite Dimens. Analysis Quantum Probab. Relat. Topics. 2016. V. 19, N. 2. P. 1650009.

87. Accardi L., Kozyrev S. V. Coherent population trapping in the stochastic limit // Int. J. Theor. Phys. 2006. V. 45, N. 4. P. 661–668.

88. Accardi L., Kozyrev S. . Lectures on quantum interacting particle systems // QP-PQ: Quantum Probability and White Noise Analysis. 2002. V. 14. P. 1–195.

89. Accardi L., Lu Y. G., Volovich I. Quantum theory and its stochastic limit. — Berlin: Springer, 2002.

90. Accardi L., Pechen A. N., Volovich I. V. Quantum stochastic equation for the low density limit // J. Phys. A. 2002. V. 35, N. 23. P. 4889–4902.

91. Accardi L., Pechen A. N., Volovich I. V. A stochastic golden rule and quantum Langevin equation for the low density limit // Infinite Dimens. Analysis Quantum Probab. Relat. Topics. 2003. V. 6, N. 3. P. 431–453.

92. Albert V., Bradlyn B., Fraas M., Jiang L. Geometry and response of Lindbladians // Phys. Rev. X. 2016. V. 6, N. 4. P. 041031.

93. Albert V., Jiang L. Symmetries and conserved quantities in Lindblad master equations // Phys. Rev. A. 2014. V. 89, N. 2. P. 022118.

94. Alexander R.K. The Infinite Hard Sphere System // Ph.D thesis (Dep. of Mathematics, University of California at Berkeley). 1975.

95. Alicki R., Lendi K. Quantum dynamical semigroups and applications. Berlin: Springer, 2007.

96. Anantharaman N., Fermanian-Kammerer C., Macia F. Semiclassical completely integrable systems: long-time dynamics and observability via two-microlocal Wigner measures // Am. J. Math. 2015. V. 137, N. 3. P. 577–638.

97. Anantharaman N., Macia F. Semiclassical measures for the Schrödinger equation on the torus // J. Eur. Math. Soc. 2014. V. 16, N. 6. P. 1253–1288.

98. Anantharaman N., Macia F. The dynamics of the Schrödinger flow from the point of view of semiclassical measures // Barnett B., Gordon C., Perry P., Uribe A. (eds.) Spectral Geometry, Proceedings of Symposia in Pure Mathematics. Providence: Amer. Math. Soc., 2012. P. 93–116.

99. Androulakis G., Wiedemann A. GKSL generators and digraphs: computing invariant states // J. Phys. A. 2019. V. 52, N. 30. P. 305201.

100. Arkeryd L., Cercignani C. On the convergence of solutions of the Enskog equation to solutions of the Boltzmann equation // Comm. PDE. 1989. V. 14, N. 8–9. P. 1071–1090.

101. Arkeryd L., Cercignani C. Global existence in $L_1$ for the Enskog equation and convergence of the solutions to solutions of the Boltzmann equation // J. Stat. Phys. 1990. V. 59, N. 3–4. P. 845–867.

102. Aronstein D. L., Stroud C. R. Fractional wave-function revivals in the infinite square well // Phys. Rev. A. 1997. V. 55, N. 6. P. 4526—4537.

103. Aronstein D. L., Stroud C. R. Analytical investigation of revival phenomena in the finite square-well potential // Phys. Rev. A. 2000. V. 62, N 2. P. 022102.

104. Aronstein D. L., Stroud C. R. Phase-difference equations: A calculus for quantum revivals // Laser Physics. 2005. V. 15, N. 10. P. 1496–1507.

105. Ashhab S. Landau-Zener transitions in a two-level system coupled to a finite-temperature harmonic oscillator // Phys. Rev. A. 2014. V. 90, N. 6. P. 062120.

106. Ashhab S., Nori F. Control-free control: Manipulating a quantum system using only a limited set of measurements // Phys. Rev. A. 2010. V. 82, N. 6. P. 062103.

107. Attal S., Pautrat Y. From repeated to continuous quantum interactions // Ann. Henri Poincaré. 2006. V. 7, N. 1. P. 59–104.

108. Averbukh I. Sh., Perelman N. F. Fractional revivals: universality in the long-term evolution of quantum wave packets beyond the correspondence principle dynamics. // Physical Letters Ser. A, 1989. V. 139, N 9. P. 449—453.

109. Bambusi D., Graffi S., Paul T. Long time semiclassical approximation of quantum flows: a proof of the Ehrenfest time // Asymptot. Anal. 1999. V. 21, N. 2. P. 149–160.

110. Barra F. The thermodynamic cost of driving quantum systems by their boundaries // Sci. Rep. 2015. V. 5. P. 14873.

111. Bason M. G., Viteau M., Malossi N., Huillery P., Arimondo E., Ciampini D., Fazio R., Giovannetti V., Mannella R., Morsch O. High-fidelity quantum driving // Nat. Phys. 2012. V. 8, P. 147–152.

112. Baumgartner B., Narnhofer N. Analysis of quantum semigroups with GKS–Lindblad generators: II. General // J. Phys. A. 2008. V. 41, N. 39. P. 395303.

113. Baumgratz T., Cramer M., Plenio M. B. Quantifying coherence // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 113, N. 14. P. 140401.

114. Belavkin V. P., Kolokol'tsov V. N. On a general kinetic equation for many-particle systems with interaction, fragmentation and coagulation // Proc. R. Soc. Lond. A. 2003. V. 459, N. 2031. P. 727–748.

115. Bellomo N., Lachowicz M. On the asymptotic equivalence between the Enskog and the Boltzmann equations // J. Stat. Phys. 1988. V. 51, N. 1–2. P. 233–247.

116. Bennett C. H., Brassard G. Quantum cryptography: public key distribution and coin tossing // Proc. IEEE Int. Conf. Computers, Systems and Signal Processing. New York: Institute of Electrical and Electronics Engineers, 1984. P. 175—179.

117. Berry M. V. Random renormalization in the semiclassical long-time limit of a precessing spin // Physica D. 1998. V. 33, N. 1–3. P. 26–33.

118. Wilming H., de Oliveira T. R., Short A. J., Eisert J. Equilibration times in closed quantum many-body systems // Binder F., Correa L. A., Gogolin C., Anders J., Adesso G. (eds.) Thermodynamics in the Quantum Regime: Fundamental Aspects and New Directions. Springer, 2018. P. 435–455.

119. Blok M. S., Bonato C., Markham M. L., Twitchen D. J., Dobrovitski V. V., Hanson R. Manipulating a qubit through the backaction of sequential partial measurements and real-time feedback // Nat. Phys. 2014. V. 10. P. 189–193.

120. Bocchieri P., Loinger A. Quantum recurrence theorem // Phys. Rev. 1956. V. 107, N. 2, P. 337–338.

121. Bogdanov Yu. I., Brida G., Bukeev I. D., Genovese M., Kravtsov K. S., Kulik S. P., Moreva E. V., Soloviev A. A., Shurupov A. P. Statistical estimation of the quality of quantum-tomography protocols // Phys. Rev. A. 2011, V. 84, N 4, P. 042108.

122. Bolaños-Servín J. R., Fagnola F. On the structure of quantum Markov semigroups of weak coupling limit type // J. Phys. Conf. Ser. 2017. V. 819, N. 1. P. 012003.

123. Bodineau T., Gallagher I., Saint–Raymond L., Simonella S. One-sided convergence in the Boltzmann-Grad limit // arXiv.org e-Print archive. 2016. URL: https://arxiv.org/abs/1612.03722 (дата обращения: 13.09.2019).

124. Bouzouina B., Robert D. Uniform semiclassical estimates for the propagation of quantum observables // Duke Math. J. 2002. V. 111, N. 2. P. 223–252.

125. Brataas A., Rashba E. I. Nuclear dynamics during Landau-sZener singlet-triplet transitions in double quantum dots // Phys. Rev. B. 2011. V. 84, N. 4. P. 045301.

126. Brychkov Y. A. Handbook of Special Functions: Derivatives, Integrals, Series and Other Formulas. London: Chapman and Hall/CRC, 2008.

127. Campisi M., Talkner P., Hänngi P. Influence of measurements on the statistics of work performed on a quantum system, Phys. Rev. E. 2011. V. 83, N. 4. P. 041114.

128. Caneva T., Murphy M., Calarco T., Fazio R., Montangero S., Giovannetti V., Santoro G. E. Optimal control at the quantum speed limit // Phys. Rev. Lett. V. 103, N. 24. P. 240501.

129. Cao G., Li H.-O., Tu T., Wang L., Zhou C., Xiao M., Guo G.-C., Jiang H.-W., Guo G.-P. Ultrafast universal quantum control of a quantum-dot charge qubit using Landau–Zener–Stückelberg interference // Nat. Commun. 2013. V. 4, P. 1401.

130. Carles R. Fermanian-Kammerer C., Mauser N. J., Stimming H. P. On the time evolution of Wigner measures for Schrödinger equations // Commun. Pure Appl. Anal. 2009. V. 8, N. 2. P. 559–585.

131. Cercignani C., Gerasimenko V.I., Petrina D. Y., Many-Particle Dynamics and Kinetic Equations. Dordrecht: Kluwer Academic Publishing, 1997.

132. Chernyshev V. L., Shafarevich A. I. Statistics of Gaussian packets on metric and decorated graphs // Phil. Trans. R. Soc. A. 2014. V. 372, N. 2007. P. 20130145.

133. Chruściński D., Pascazio S. A brief history of the GKLS equation // Open Sys. Inf. Dyn. 2007. V. 24, N. 3. P. 1740001.

134. Cercignani C., Illner R., Pulvirenti M. The Mathematical Theory of Dilute Gases. New York: Springer–Verlag, 1994.

135. Cheng Y. C., Silbey R. J. Markovian approximation in the relaxation of open quantum systems // J. Phys. Chem. B. 2005. V. 109. P. 21399–21405.

136. Coles P. J. Unification of different views of decoherence and discord // Phys. Rev. A. 2012. V. 85, N. 4. P. 042103.

137. Collini E., Wong C. Y., Wilk K. E., Curmi P. M. G., Brumer P., Scholes G. D. Coherently wired light-harvesting in photosynthetic marine algae at ambient temperature // Nature. 2010. V. 463. P. 644–648.

138. Combescure M., Robert D. Semiclassical spreading of quantum wave packets and applications near unstable fixed points of the classical flow // Asymptot. Anal. 1997. V. 14, N. 4. P. 377–404.

139. Compagno G.,Messina A., Nakazato H., Napoli A., Unoki M., Yuasa K. Distillation of entanglement between distant systems by repeated measurements on an entanglement mediator // Phys. Rev. A. 2004. V. 70, N. 5. P. 052316.

140. Cook R. J. What are quantum jumps? // Phys. Scr. 1988. V. T21. P. 49–51.

141. Crothers D. S. F. Asymptotic expansions for parabolic cylinder functions of large order and argument // J. Phys. A. 1972. V. 5, N. 12. P. 1680–1688.

142. D’Alessandro D. Introduction to Quantum Control and Dynamics. London: Chapman and Hall/CRC, 2007.

143. D'Alessio L., Kafri Y., Polkovnikov A., Rigol M. From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics // Adv. Phys. 2016. V. 65, N. 3. P. 239–362.

144. Davies E. Markovian master equations // Commun. Math. Phys. 1974. V. 39. P. 91–110.

145. De Bièvre S., González J. A., Semiclassical behaviour of coherent states on the circle. // Quantization and coherent states methods. Singapore : World Scientific, 1993. P. 152—157.

146. Denlinger R. The propagation of chaos for a rarefied gas of hard spheres in the whole space // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 2018. V. 229, N. 2. P. 885–952.

147. Devetak I., Winter A. Distillation of secret key and entanglement from quantum states // Proc. R. Soc. London. Ser. A. 2005. V. 461. P. 207–235.

148. Devetak I., Shor P. The capacity of a quantum channel for simultaneous transmission of classical and quantum information // Comm. Math. Phys. 2005. V. 256, N. 2. P. 287–303.

149. Deutsch J. M. Quantum statistical mechanics in a closed system // Phys. Rev. A. 1991. V. 43, N. 4. P. 2046.

150. DiPerna R., Lions P. L. On the Cauchy problem for Boltzmann equations // Ann. Math. 1989. V. 130, N. 2. P. 321–366.

151. Dodin A., Garmon S., Simine L., Segal D. Landau-Zener transitions mediated by an environment: Population transfer and energy dissipation // J. Chem. Phys. 2014. V. 140, N. 12. P. 124709.

152. Dümke R. The low density limit for an $N$-level system interacting with a free bose or fermi gas // Commun. Math. Phys. 1985. V. 97, N. 3. P. 331–359.

153. Duplinskiy A. V., Kiktenko E. O., Pozhar N. O., Anufriev M. N., Ermakov R. P., Kotov A. I., Brodskiy A. V., Yunusov R. R., Kurochkin V. L., Fedorov A. K., Kurochkin Y. V. Quantum-secured data transmission in urban fiber-optics communication lines // J. Russ. Laser Res. 2018. V. 39, N. 3. P. 113–119.

154. Dupuis F., Fawzi O., Renner R. Entropy accumulation // arXiv.org e-Print archive. 2005. URL: https://arxiv.org/abs/1607.01796 (дата обращения: 13.09.2019).

155. Dušek M., Jahma M., Lütkenhaus N. Unambiguous state discrimination in quantum cryptography with weak coherent states // Phys. Rev. A. 2000. V. 62, N. 2. P. 022306.

156. Engel G. S., Calhoun T. R., Read E. L., Ahn T. K., Mančal T., Cheng Y. C., Blankenship R. E., Fleming G. R. Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems // Nature. 2007. V. 446. P. 782–786

157. Esposito M., Van den Broeck C. Three faces of the second law. I. Master equation formulation // Phys. Rev. E. 2010. V. 82, N. 1. P. 011143.

158. Facchi P., Marmo G., Pascazio S. Quantum Zeno dynamics and quantum Zeno subspaces // J. Phys.: Conf. Ser. 2009. V. 196, N. 1. P. 012017.

159. Facchi P., Pascazio S. Quantum Zeno dynamics: mathematical and physical aspects // J. Phys. A. 2008. V. 41, N. 49. P. 493001.

160. Fagnola F., Rebolledo R. Entropy production for quantum Markov semigroups // Commun. Math. Phys. 2015. V. 335, N. 2. P. 547–570.

161. Farina D., Giovanetti V. Open quantum system dynamics: recovering positivity of the Redfield equation via partial-secular approximation // Phys. Rev. A. 2019. V. 100, N. 1. P. 012107.

162. Fei Y., Meng Z., Gao M., Ma M., Wang H. Practical decoy state quantum key distribution with detector efficiency mismatch // Eur. Phys. J. D. 2018. V. 72. P. 107.

163. Förster Th. Energiewanderung und Fluoreszenz // Naturwissenschaften. 1946. V. 33, N. 6. P. 166–175.

164. Förster Th. Zwischenmolekulare Energiewanderung und Fluoreszenz // Annalen der Physik. 1948. V. 437, N. 1–2. P. 55–75.

165. Frigerio A. Stationary states of quantum dynamical semigroups // Commun. Math. Phys. 1978. V. 63, N. 3. P. 269–276.

166. de Fouquieres P., Schirmer S., Glaser S., Kuprov I. Second order gradient ascent pulse engineering // J. Magn. Res. 2011. V. 212, N. 2. P. 412–417.

167. Fu S., Shi G., Proutiere A., James M. R. Feedback policies for measurement-based quantum state manipulation // Phys. Rev. A. 2014. V. 90, N. 6. P. 062328.

168. Fung C.-H. F., Tamaki K., Qi B., Lo H.-K., Ma X. Security proof of quantum key distribution with detection efficiency mismatch // Quant. Inf. Comput. 2009. V. 9, N. 1. P. 131–165.

169. Gallagher I., Saint Raymond L. Texier B. From Newton to Boltzmann: Hard Spheres and Short-Range Potentials // EMS Zurich Lectures in Advanced Mathematics. Zürich: European Mathematical Society (EMS). 2014. V. 18. P. 1–150.

170. Gérard P. Mesures semi-classiques et ondes de Bloch // Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1990-1991). École Polytech. Exp. N. 16. 1991. P. 1–19.

171. Gérard P., Leichtman É. Ergodic properties of eigenfunctions for the Dirichlet problem // Duke Math. J. 1993. V. 71, N. 2. P. 559–607.

172. Gerasimenko V. I. Gapyak I. V. Hard sphere dynamics and the Enskog equation // Kinet. Relat. Models. 102. V. 5, N. 3. P. 459–484.

173. Gilowski M., Wendrich T., Müller T., Jentsch C., Ertmer W., Rasel E. M., Schleic W. P. Semiclassical spreading of quantum wave packets and applications near unstable fixed points of the classical flow // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100, N. 3. P. 030201.

174. Gisin N., Ribordy G., Tittel W., Zbinden H. Quantum cryptography // Rev. Mod. Phys. 2002. V. 74, N. 1. P. 145–195.

175. Gittsovich O., Beaudry N. J., Narasimhachar V., Romero Alvarez R., Moroder T., Lütkenhaus N. Squashing model for detectors and applications to quantum-key-distribution protocols // Phys. Rev. A. 2014. V. 89, N. 1. P. 012325.

176. Gogolin C., Eisert J. Equilibration, thermalisation, and the emergence of statistical mechanics in closed quantum systems // Rep. Prog. Phys. 2016. V. 79, N. 5. P. 056001.

177. González J. A., del Olmo M. A. Coherent states on the circle // Journal of Physics A. 1998. V. 31, N 44. P. 8841–8857.

178. Gorini V., Kossakowski A., Sudarshan E. C. G. Completely positive dynamical semigroups of $N$-level systems // J. Math. Phys. 1976. V. 17. P. 821–825.

179. Hagedorn G. A., Joye A. Semiclassical dynamics with exponentially small error estimates // Comm. Math. Phys. 1999. V. 207, N. 2. P. 439–465.

180. Hagedorn G. A., Joye A. Exponentially accurate semiclassical dynamics: propagation, localization, Ehrenfest times, scattering, and more general states // Ann. Henri Poincaré. 2000. V. 1, N. 5. P. 837–883.

181. Harris R. J., Schütz G. M. Fluctuation theorems for stochastic dynamics // J. Stat. Mech. 2007. V. 2007. P. P07020.

182. Hatano T., Sasa S. Steady-state thermodynamics of Langevin systems // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86, N. 16. P. 3463–3466.

183. Hentschel A., Sanders B. C. Efficient algorithm for optimizing adaptive quantum metrology processes // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107, N. 23. P. 233601.

184. Hicke C., Santos L. F., Dykman M. I. Fault-tolerant Landau- Zener quantum gates // Phys. Rev. A. 2006. V. 73, N. 1. P. 012342.

185. Hill T. Studies in irreversible thermodynamics IV. Diagrammatic representation of steady state fluxes for unimolecular systems // J. Theoret. Biol. 1966. V. 10. P. 442–459.

186. Hillery M., O'Connel R. F., Scully M. O., Wigner E. P. Distributions functions in physics: fundamentals // Physics Reports. 1984. V. 106, N. 3. P. 121—167.

187. Horowitz J. M., Parrondo M. R. Entropy production along nonequilibrium quantum jump trajectories // New J. Phys. 2013. V. 15. P. 085028.

188. Horowitz J. M., Sagawa T. Equivalent definitions of the quantum nonadiabatic entropy production // J. Stat. Phys. 2014. V. 156, N. 1. P. 55–65.

189. Husimi K. Some formal properties of the density matrix // Proc. Phys. Math. Soc. Jpn. 1940. V. 22. P. 264—314.

190. Hwang-Fu Y.-H., Chen W., Cheng Y.-C. A coherent modified Redfield theory for excitation energy transfer in molecular aggregates // Chem. Phys. 2015. V. 447. P. 46–53.

191. Inozemcev O., Volovich I. A note on the eigenstate thermalization hypothesis // arXiv.org e-Print archive. 2018. URL: https://arxiv.org/abs/1811.00994 (дата обращения: 13.09.2019).

192. Ishizaki A., Fleming G. R. On the adequacy of the Redfield equation and related approaches to the study of quantum dynamics in electronic energy transfer // J. Chem. Phys. 2009. V. 130, N. 23. P. 234110.

193. Ishizaki A., Fleming G. R. Unified treatment of quantum coherent and incoherent hopping dynamics in electronic energy transfer: Reduced hierarchy equation approach // J. Chem. Phys. 2009. V. 130, N. 23. P. 234111.

194. Itano W. M., Heinzen D. J., Bollinger J. J., Wineland D. J. Quantum Zeno effect // Phys. Rev. A. 1990. V 41, N. 5. P. 2295–2300.

195. Jang S., Cheng Y.-C., Reichman D. R., Eaves J. D. Theory of coherent resonance energy transfer // J. Chem. Phys. 2008. V. 129, N. 10. P. 101104.

196. Jang S., Mennucci B. Delocalized excitons in natural light-harvesting complexes // Rev. Mod. Phys. 2018. V. 90, N. 3. P. 035003.

197. Jang S., Jung Y. J., Silbey R. J. Nonequilibrium generalization of Förster–Dexter theory for excitation energy transfer // Chem. Phys. 2002. V. 275, N. 1–3. P. 319–332.

198. Jeske J., Ing D. J., Plenio M. B., Huelga S. F., Cole J. H. Bloch–Redfield equations for modeling light-harvesting complexes // J. Chem. Phys. 2015. V. 142, N. 6. P. 064104.

199. Jin S., Markowich P., Sparber C. Mathematical and computational methods for semiclassical Schrödinger equations // Acta Numerica. 2011. V. 20. P. 195304.

200. Johansson J., Amin M. H. S., Berkley A. J., Bunyk P., Choi V., Harris R., Johnson M. W., Lanting T. M., Lloyd S., Rose G Landau-Zener transitions in a superconducting flux qubit // Phys. Rev. B. 2009. V. 80, N. 1. P. 012507.

201. Karatsuba A. A., Karatsuba E. A. A resummation formula for collapse and revival in the Jaynes–Cummings model // J. Phys. A. 2009. V. 42, N. 19. P. 195304.

202. Karevski D., Platini T. Quantum nonequilibrium steady states induced by repeated interactions // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102, N. 20. P. 207207.

203. Kim S. K. The asymptotic expansion of a hypergeometric function ${}_2F_2(1, \alpha; \rho_1, \rho_2; z)$ // Math. Comput. 1972. V. 26, N. 120. P. 963.

204. Klauder J. R., Skagerstam B.–S. Coherent states: applications in physics and mathematical physics. Singapore: World Scientific, 1985.

205. Kolli A., Nazir A., Olaya-Castro A. Electronic excitation dynamics in multichromophoric systems described via a polaron-representation master equation // J. Chem. Phys. 2011. V. 135, N. 15. P. 154112.

206. Kolokoltsov V. N. Nonlinear Markov Processes and Kinetic Equations. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.

207. Kolokoltsov V. N. On Extension of mollified Boltzmann and Smoluchovski equations to particle systems with a $k$-nary interaction // Russ. J. Math. Phys. 2003. V. 10, N. 3. P. 268–295.

208. Kowalski K., Rembielinski J., Papaloucas L. C. Coherent states for a quantum particle on a circle // J. Phys. A. 1996. V. 29, N. 14. P. 4149–4167.

209. Kowalski K., Rembielinski J. Coherent states for quantum mechanics on a torus // J. Phys. A. 2007. V. 75, N. 5. P. 052102.

210. Kowalski K., Rembielinski J. Coherent states for quantum mechanics on a compact manifold // J. Phys. A. 2008. V. 41, N. 30. P. 304021.

211. Kowalski K., Rembielinski J. On the uncertainty relations and squeezed states for the quantum mechanics on a circle // J. Phys. A. 2002. V. 35. P. 1405—1414.

212. Kuznetsov A. M. Charge Transfer in Physics, Chemistry, and Biology. Reading: Gordon and Breach, 1995.

213. Kwiat P. G., Weinfurter H., Herzog T., Zeilinger A., Kasevich M. A. Interaction-free measurement // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74, N. 24. P. 4763–4766.

214. Kwiat P. G., White A. G., Mitchell J. R., Nairz O., Weihs G., Weinfurter H., Zeilinger A. High-efficiency quantum interrogation measurements via the quantum Zeno effect // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83, N. 23. P. 4725–4728.

215. Landau L. On the theory of transfer of energy at collisions II // Phys. Z. Sowjetunion. 1932. V. 2. P. 46.

216. Landauer R. Irreversibility and heat generation in the computing process // IBM J. Res. Dev. 1961. V. 5, N. 3. P. 183–191.

217. Lanford O. E. Time evolution of large classical systems // Lect. Notes Phys. 1975. V. 38. P. 1–111.

218. Leichtle C., Averbukh I. Sh., Schleich W. P. Generic structure of multilevel quantum beats // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77, N. 19. P. 3999–4002.

219. Leichtle C., Averbukh I. Sh., Schleich W. P. Multilevel quantum beats: An analytical approach // Phys. Rev. A. 1996. V. 54, N. 6. P. 5299–5312.

220. Letokhov V. S. Laser Control of Atoms and Molecules. Oxford: Oxford University Press, 2007.

221. Levy A., Kosloff R. The local approach to quantum transport may violate the second law of thermodynamics // EPL. 2014. V. 107, N. 2. P. 20004.

222. Li A. Z., Hartert W. G. Quantum revivals of Morse oscillators and Farey–Ford geometry // Chem. Phys. Lett. 2015. V. 633. P. 208–213.

223. Lieb E. H. Convex trace functions and the Wigner-Yanase-Dyson conjecture // Adv. Math. 1973. V. 11. P. 267–288.

224. Lindblad G. Completely positive maps and entropy inequalities // Commun. Math. Phys. 1975. V. 40, N. 2. P. 147–151.

225. Lindblad G. On the generators of quantum dynamical semigroups // Commun. Math. Phys. 1976. V. 48, N. 2. P. 119–130.

226. Lo H.-K., Ma X., Chen K. Decoy state quantum key distribution // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94, N. 23. P. 230504.

227. Luchnikov I. A., Filippov S. N. Quantum evolution in the stroboscopic limit of repeated measurements // Phys. Rev. A. 2017. V. 95, N. 2 . P. 022113.

228. Luke Y. L. Integrals of Bessel Functions. New York: McGraw Hill, 1962.

229. Luke Y. L. The Special Functions and Their Approximations. New York: Academic, 1969.

230. Lütkenhaus N. Jahma M. Quantum key distribution with realistic states: photon-number statistics in the photon-number splitting attack // New J. Phys. 2002. V. 4. P. 44.

231. Ma X., Qi B., Zhao Y., Lo H.-K. Practical decoy state for quantum key distribution // Phys. Rev. A. 2005. V. 72, N. 1. P. 012326.

232. Machnes S., Sander U., Glaser S. J., de Fouquieres P., Gruslys A., Schirmer S., Schulte-Herbruggen T. Comparing, optimizing, and benchmarking quantum-control algorithms in a unifying programming framework // Phys. Rev. A. 2011. V. 84, N. 2. P. 022305.

233. Macia F. Semiclassical measures and the Schrödinger flow on Riemannian manifolds // Nonlinearity. 2009. V. 22, N. 5. P. 1003–1020.

234. Macia F. High-frequency propagation for the Schrödinger equation on the torus // J. Func. Anal. 2010. V. 258, N. 3. P. 933–955.

235. Majorana E. Atomi orientati in campo magnetico variabile // Nuovo Cim. 1932. V. 9, N. 2. P. 43–50.

236. Mancini S., Man'ko V. I., Tombesia P. Symplectic tomography as classical approach to quantum systems // Phys. Lett. A. 1996. V. 213, N. 1–2. P. 1–6.

237. Manrique P. D., Rodríguez F., Quiroga L., Johnson N. F. Nonequilibrium quantum systems: Divergence between global and local descriptions // Adv. Cond. Mat. Phys. 2015. V. 2015. P. 615727.

238. Manzano G., Fazio R., Roldán É. Quantum martingale theory and entropy production // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122, N. 22. P. 220602.

239. Markowich P. A., Mauser N. J., Poupaud F. A. Wigner-function approach to (semi)classical limits: electrons in a periodic potential // J. Math. Phys. 1994. V. 35, N. 3. P. 1066–1094.

240. Martinez A. An introduction to semiclassical and microlocal analysis. New York: Springer, 2002.

241. May V., Kühn O. Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems. Weinheim: Wiley-VCH, 2011.

242. Mayers D. Unconditional security in quantum cryptography // JACM. 2001. V. 48, N. 3. P. 351–406.

243. McKenna J., Frisch H. L. Quantum-mechanical, microscopic Brownian motion // Physical Review. 1966. V. 145, N. 1. P. 93–110.

244. Misra B., Sudarshan E. C. G. The Zeno's paradox in quantum theory // J. Math. Phys. 1977. V. 18, N. 4. P. 756–763.

245. Mohseni R., Omar Y., Engel G., Plenio M. B. Quantum Effects in Biological Systems. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.

246. Mori T., Ikeda T. N., Kaminishi E., Ueda M. Thermalization and prethermalization in isolated quantum systems: a theoretical overview // J. Phys. B. 2018. V. 51, N. 11. P. 112001.

247. Moroder T., Curty M., Lütkenhaus N. Detector decoy quantum key distribution // New J. Phys. 2009. V. 11. P. 045008.

248. Mukamel S. Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy. New York: Oxford University Press, 1995.

249. Müller-Hermes A., Reeb D. Monotonicity of the quantum relative entropy under positive maps // Ann. Henri Poincaré. 2017. V. 18, N. 5. P. 1777–1788.

250. Nakazato H., Takazawa T., Yuasa K. Purification through Zeno-like measurements // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90, N. 6. P. 060401.

251. Nakazato H., Unoki M., Yuasa K. Preparation and entanglement purification of qubits through Zeno-like measurements // Phys. Rev. A. 2004. V. 70, N. 1. P. 012303.

252. Nitzan A. Chemical Dynamics in Condensed Phases. Oxford: Oxford University Press, 2006.

253. Novoderezhkin V. I., van Grondelle R. Modeling of excitation dynamics in photosynthetic light-harvesting complexes: exact versus perturbative approaches // J. Phys. B. 2017. V. 50, N. 12. P. 124003.

254. Novoderezhkin V. I., van Grondelle R. Spectra and Dynamics in the B800 Antenna: Comparing Hierarchical Equations, Redfield and Förster Theories // J. Phys. Chem. B. 2013. V. 117, N. 38. P. 11076–11090.

255. Novoderezhkin V. I., van Grondelle R. Physical origins and models of energy transfer in photosynthetic light-harvesting // Phys. Chem. Chem. Phys. 2010. V. 12, N. 27. P. 7352–7365.

256. Novoderezhkin V. I., Romero E., Prior J., van Grondelle R. Exciton-vibrational resonance and dynamics of charge separation in the photosystem II reaction center // Phys. Chem. Chem. Phys. 2017. V. 19, N. 7. P. 5195–5208.

257. Ptaszyński K., Esposito M. Thermodynamics of quantum information flows // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122, N. 15. P. 150603.

258. Ohya M., Volovich I. Mathematical foundations of quantum information and computation and its applications to nano- and bio-systems. — Dordrecht: Springer, 2011.

259. Oliver W. D., Yu Y., Lee J. C., Berggren K. K., Levitov L. S., Orlando T. P. Mach-Zehnder interferometry in a strongly driven superconducting qubit // Science. 2005. V. 310. P. 1653–1657.

260. Olson A. J., Wang S.-J., Niffenegger R. J., Li C.-H., Greene C.-H., Chen Y. P. Tunable Landau-Zener transitions in a spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensate // Phys. Rev. A. 2014. V. 90, N. 1. P. 013616.

261. Olver F. W. J., Uniform asymptotic expansions for Weber parabolic cylinder functions of large orders // J. Res. NBS. 1959. V. 63B, N. 2. P. 131–169.

262. Oono Y., Paniconi M. Steady state thermodynamics // Progr. Theor. Phys. Suppl. 1997. V. 130. P. 29–44.

263. Pechen A., Il'in N. Trap-free manipulation in the Landau-Zener system // Phys. Rev. A. 2012. V. 86, N. 5. P. 052117.

264. Pechen A., Il'in N., Shuang F., Rabitz H. Quantum control by von Neumann measurements // Phys. Rev. A. 2006. V. 74, N. 5. P. 052102.

265. Plenio M. B., Almeida J., Huelga S. F. Origin of long-lived oscillations in 2D-spectra of a quantum vibronic model: Electronic versus vibrational coherence // J. Chem. Phys. 2013. V. 139, N. 23. P. 235102.

266. Portmann C., Renner R. Cryptographic security of quantum key distribution // arXiv.org e-Print archive. 2014. URL: https://arxiv.org/abs/1409.3525 (дата обращения: 13.09.2019).

267. Pulvirenti M. On the Enskog hierarchy: Analiticity, uniqueness and derivability by particle systems // Rend. Circ. Mat. Palermo. Ser. 2. 1996. V. 45. P. 529–542.

268. Pulvirenti M., Saffirio C., Simonella S. On the validity of the Boltzmann equation for short-range potentials // Rev. Math. Phys. 2014. V. 26, N. 2. P. 1–64.

269. Pulvirenti M., Simonella S. On the evolution of the empirical measure for the hard-sphere dynamics // Bull. Inst. Math. Academia Sinica. 2015. V. 10, N. 2. P. 171–204.

270. Pulvirenti M., Simonella S. The Boltzmannn-Grad limit of a hard sphere system: Analysis of the correlation error // Inventiones. 2017. V. 207, N. 3. P. 1135–1237.

271. Pulvirenti M., Simonella S., Trushechkin A. Microscopic solutions of the Boltzmann-Enskog equation in the series representation // Kinet. Relat. Models. 2018. V. 11, N. 4. P. 911–931.

272. Punoševac P., Robinson S. L. Dynamics of uncertainties for bound one-dimensional semiclassical wave packets // J. Math. Phys. 2016. V. 57, N. 9. P. 092102.

273. Redfield A. G. The theory of relaxation processes // Adv. Magn. Opt. Reson. 1965. V. 1. P. 1–32.

274. Renner R. Security of quantum key distribution // Ph.D. Thesis (ETH Zürich). 2005; arXiv.org e-Print Archive. URL: http://arXiv.org/abs/quant-ph/0512258 (дата обращения: 13.09.2019).

275. Rivas A., Huelga S. F. Open Quantum Systems: An introduction. Springer, 2012.

276. Robinett R. W. Quantum wave packet revivals // Physics Reports. 2004. V. 392, N. 1–2. P. 1–119.

277. Robinett R. W. Visualizing the collapse and revival of wave packets in the infinite square well using expectation values // American Journal of Physics. 2000. V. 69, N. 1. P. 56–62.

278. Rodimin V. E., Kiktenko E. O., Usova V. V., Ponomarev N. Y., Kazieva T. V., Miller A. V., Sokolov A. S., Kanapin A. A., Losev A. V., Trushechkin A. S.,

Anufriev M. N., Pozhar N. O., Kurochkin V. L., Kurochkin Y. V., Fedorov A. K. Modular quantum key distribution setup for research and development applications // J. Russ. Laser Res. 2019. V. 40, N. 3. P. 221–229.

279. Sakbaev V. Zh., Volovich I. V. Self-adjoint approximations of the degenerate Schro?dinger operator // P-Adic Numbers Ultrametric Anal. Appl. 2017. V. 9, N. 1. P. 39—52.

280. Scarani V., Bechmann-Pasquinucci H., Cerf N. J., Dušek M., Lütkenhaus N., Peev M. The security of practical quantum key distribution // Rev. Mod. Phys. 2009. V. 81, N. 3. P. 1301.

281. Schnakenberg J. Network theory of microscopic and macroscopic behavior of master equations systems // Rev. Mod. Phys. 1976. V. 48, N. 8. P. 571–585.

282. Schubert R. Semiclassical behaviour of expectation values in time evolved Lagrangian states for large times // Comm. Math. Phys. 2005. V. 256, N. 1. P. 239–254.

283. Schubert R., Vallejos R. O., Toscano F. How do wave packets spread? Time evolution on Ehrenfest time scales // J. Phys. A. 2012. V. 45, N. 21. P. 215307.

284. Seibt J., Mančal T. Ultrafast energy transfer with competing channels: Non-equilibrium Förster and modified Redfield theories // J. Chem. Phys. 2017. V. 146, N. 17. P. 174109.

285. Semin G. N., Filippov S. N., Pechen A. N. Comparison of the low density limit and collision model for open quantum dynamics // arXiv.org e-Print archive. 2001. URL: https://arxiv.org/abs/1908.11202 (дата обращения: 13.09.2019).

286. Shor P. W., Preskill J. Simple proof of security of the BB84 quantum key distribution protocol // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85, N. 2. P. 441.

287. Shuang F., Pechen A., Ho T.-S., Rabitz H. Observation-assisted optimal control of quantum dynamics // J. Chem. Phys. 2007. V. 126, N. 13 . P. 134303.

288. Shuang F., Zhou M., Pechen A., Wu R., Shir O. M., Rabitz H. Control of quantum dynamics by optimized measurements // Phys. Rev. A. 2008 V. 78, N. 6. P. 063422.

289. Simonella S. Evolution of correlation functions in the hard sphere dynamics // J. Stat. Phys. 2014. V. 155, N. 6. P. 1191–1221.

290. Spohn H. Entropy production for quantum dynamical semigroups // J. Math. Phys. 1978. V. 19, N. 5. P. 1227–1230.

291. Spohn H. Large-Scale Dynamics of Interacting Particles. Berlin: Springer, 1991.

292. Spohn H., Lebowitz J. L. Irreversible thermodynamics for quantum systems weakly coupled to thermal reservoirs // Adv. Chem. Phys. 1978. V. 38. P. 109–142.

293. Srednicky M. Chaos and quantum thermalization // Phys. Rev. E. 1994. V. 50, N. 2. P. 888.

294. Stückelberg E. C. G. Theorie der unelastischen Stösse zwischen Atomen // Helv. Phys. Acta. 1932. V. 5. P.369–422.

295. Suárez A., Silbey R., Oppenheim I. Memory effects in the relaxation of quantum open systems // J. Chem. Phys. 1992. V. 97, N. 7. P. 5101–5107.

296. Sun J., Lai C.-H., Wu X.-J. Particle Swarm Optimization: Classical and Quantum Perspectives. London: Chapman and Hall/CRC, 2012.

297. Sun Z., Ma J., Wang X., Nori F. Photon-assisted Landau- Zener transition: Role of coherent superposition states // Phys. Rev. A. 2012. V. 86, N. 1. P. 012107.

298. Temme N. M. Error functions, Dawson’s integral and Fresnel integrals // Olver F. W. J., Lozier D. W., Boisvert R. F., Clark C. W. (eds.) NIST Handbook of Mathematical Functions. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. Ch. 7. P. 159–172. См. также URL: http://mathworld.wolfram.com/DawsonsIntegral.html (дата обращения: 13.09.2019).

299. Tomamichel M., Lim C. C. W., Gisin N., Renner R. Tight finite-key analysis for quantum cryptography // Nat. Commun. 2012. V. 3. P. 634.

300. Tomamichel M., Leverrier A. A largely self-contained and complete security proof for quantum key distribution // Quantum. 2017. V. 1. P. 14.

301. Toscano F., Vallejos R. Wisniacki D. Semiclassical description of wavepacket revival // Phys. Rev. E. 2009. V. 80, N. 4. P. 046218.

302. Trushechkin A. S. Higher-order corrections to the Redfield equation with respect to the system-bath coupling based on the hierarchical equations of motion // Lobachevskii J. Math. 2019. V. 40, N. 10. P. 1602–1614.

303. Trushechkin A. S., Kiktenko E. O., Fedorov A. K. Practical issues in decoy-state quantum key distribution based on the central limit theorem // Phys. Rev. A. 2017. V. 96, N. 2. P. 022316.

304. Trushechkin A. S., Tregubov P. A., Kiktenko E. O., Kurochkin Yu. V., Fedorov A. K. Quantum-key-distribution protocol with pseudorandom bases // Phys. Rev. A. 2018, V. 97, N. 1. P. 12311.

305. Valkunas L., Abramavicius D. Mančal T. Dynamical Excitation Dynamics and Relaxation. Berlin: Wiley-VCH Verlag, 2013.

306. Villani C., A review of mathematical topics in collisional kinetic theory // Handbook of Mathematical Fluid Dynamics. 2002. V. 1. P. 71–305.

307. Volovich I. V. Functional mechanics and time irreversibility problem // Quantum Bio-Informatics III, QP–PQ: Quantum Probab. White Noise Anal. 2010. V. 26. P. 393–404.

308. Volovich I. V., Volovich Ya. I. On classical and quantum cryptography // arXiv.org e-Print archive. 2001. URL: https://arxiv.org/abs/quant-ph/0108133 (дата обращения: 13.09.2019).

309. Wang L. C., Huang X. L., Yi X. X. Landau-Zener transition of a two-level system driven by spin chains near their critical points // Europhys. J. D. 2008. V. 46, N. 2. P. 345–349.

310. Wang X.-B. Beating the photon-number-splitting attack in practical quantum cryptography // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94, N. 23. P. 230503.

311. Wang Z., Heller E. J. Semiclassical investigation of revival phenomena in one-dimensional system // J. Phys. A. 2009. V. 42, N. 28. P. 285304.

312. Warshel A. Role of the chlorophyll dimer in bacterial photosynthesis // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1980. V. 77, N. 6. P. 3105–1309.

313. Watanabe S., Matsumoto R., Uyematsu T. Tomography increases key rates of quantum-key-distribution protocols // Phys. Rev. A. 2008. V. 78, N. 4. P. 042316.

314. Whitney R. S., Clusel M., Ziman T. Temperature can enhance coherent oscillations at a Landau-Zener transition // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107, N. 21. P. 210402.

315. Wichterich H., Henrich M. J., Breuer H.-P., Gemmer J., Michel M. Modeling heat transport through completely positive maps // Phys. Rev. E. 2007. V. 76, N. 3. P. 031115.

316. Wiseman H. W., Milburn G. J., Quantum Measurement and Control. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.

317. Winick A., Lütkenhaus N., Coles P. J. Reliable numerical key rates for quantum key distribution // Quantum. 2018. V. 2. P. 77.

318. Wu L.-A., Lidar D. A., Schneider S. Long-range entanglement generation via frequent measurements // Phys. Rev. A 2004. V. 70, N. 3. P. 032322.

319. Yang M., Fleming G. R. Influence of photons on exciton transfer dynamics: comparison of the Redfield, Förster, and modified Redfield equations // Chem. Phys. 2002. V. 275, N. 1–3. P. 355–372.

320. Zachos C., Fairlie D., Curtright T. Quantum mechanics in phase space. Singapore: World Scientific, 2005.

321. Zahedinejad E., Schirmer S. G., Sanders B. C. Evolutionary algorithms for hard quantum control // Phys. Rev. A. 2014. V. 90, N. 3. P. 032310.

322. Zener C. Non-adiabatic crossing of energy levels // Proc. R. Soc. London A. 1932. V.137, N. 833. P. 696–702.

323. Zhang W. M., Meier T., Chernyak V., Mukamel S. Exciton-migration and three-pulse femtosecond optical spectroscopies of photosynthetic antenna complexes // J. Chem. Phys. 1998. V. 108, N. 18. P. 7763–7774.

324. Zhang Y., Lütkenhaus N. Entanglement verification with detection-efficiency mismatch // Phys. Rev. A. V. 95, N. 4. P. 042319.

325. Zhang Z., Zhao Q., Razavi M., Ma X. Improved key-rate bounds for practical decoy-state quantum-key-distribution systems // Phys. Rev. A. 2017. V. 95, N. 1. P. 012333.

326. Zhu C., Widom A., Champion P. M. A multidimensional Landau-Zener description of chemical reaction dynamics and vibrational coherence // J. Chem. Phys. 1997. V. 107, N. 8. P. 2859–2871.

327. Zwanzig R. Ensemble Method in the Theory of Irreversibility // J. Chem. Phys. 1960. V. 33, N. 5. P. 1338–1341.

328. Zworski M. Semiclassical analysis. Providence: American Mathematical Society, 2012.