

**КВАНТОВАЯ РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ИНФОРМАТИКА.  
Ч. 3: ПРИМЕНЕНИЕ РЕШЕНИЙ КВАНТОВЫХ ВОЛНОВЫХ УРАВНЕНИЙ  
В КВАНТОВОЙ ИНФОРМАТИКЕ**

**Ульянов Сергей Викторович<sup>1</sup>, Албу Вячеслав Андреевич<sup>2</sup>,  
Бархатова Ирина Александровна<sup>3</sup>, Решетников Андрей Геннадьевич<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Доктор физико-математических наук, профессор;  
ГБОУ ВПО «Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,  
Институт системного анализа и управления;  
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;  
e-mail: uyanovsv@mail.ru.

<sup>2</sup>Младший научный сотрудник;  
Институт математики и информатики АН Республики Молдова;  
Молдавия, МД-2028, г. Кишинев, ул. Академией, 5;  
e-mail: vaalbu@googlemail.com.

<sup>3</sup>Старший преподаватель;  
ГБОУ ВПО «Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,  
Институт системного анализа и управления;  
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;  
e-mail: i.a.barhatova@gmail.com.

<sup>4</sup>Аспирант;  
ГБОУ ВПО «Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,  
Институт системного анализа и управления;  
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;  
e-mail: reshetnikovag@pochta.ru.

Дано описание решений нелинейных уравнений квантовой механики (Шредингера, Фока-Клейна-Гордона, Дирака). Данные решения позволяют перенести методы классической теории управления на квантовые объекты компьютерных нанотехнологий и квантовой информатики.

**Ключевые слова:** нелинейные уравнения квантовой механики, квантовый осциллятор, волновые пакеты.

**QUANTUM RELATIVISTIC INFORMATICS.  
PT. 3: SOLUTION APPLICATIONS OF QUANTUM WAVE EQUATIONS IN QUANTUM  
INFORMATICS**

**Ulyanov Sergey<sup>1</sup>, Albu Veaceslav<sup>2</sup>, Barchatova Irina<sup>3</sup>, Reshetnikov Andrey<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor;  
Dubna International University of Nature, Society, and Man,  
Institute of system analysis and management;  
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;  
e-mail: uyanovsv@mail.ru.

<sup>2</sup>Junior scientist;  
Institute of Mathematics and Computer Science;  
Republic of Moldova, Chisinau MD 2028, Kishinev, Academiei str.5;  
e-mail: vaalbu@googlemail.com.

<sup>3</sup>Senior researcher;

Dubna International University of Nature, Society and Man,  
Institute of system analysis and management;  
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;  
e-mail: i.a.barhatova@gmail.com.

<sup>4</sup>PhD student;

Dubna International University of Nature, Society and Man,  
Institute of system analysis and management;  
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;  
e-mail: reshetnikovag@pochta.ru.

*Description of nonlinear quantum wave equation solutions (Schrodinger, Fock-Klein-Gordon, Dirac and Maxwell) are considered. This approach helps to transfer methods of classical control theory on quantum objects and computer science nanotechnology.*

**Keywords:** nonlinear quantum wave equations, quantum oscillator, wave packets.

## Введение

Изучение квантовых эффектов в сверхтонких полупроводниковых гетероструктурах, как одной из основ аппаратной реализации устройств квантовой информатики, дало толчок появлению нового класса полупроводниковых приборов – резонансных туннельных диодов (РТД) и транзисторов (РТТ), обладающих высоким быстродействием (предельные частоты  $10^{12}$  Гц). Обсуждаются также широко проблемы создания квантовых интегральных схем и квантового компьютера, основными элементами которых станут квантовые точки, квантовые проводники, квантовые ямы, транзисторные структуры на основе квантовых размерных эффектов и устройств с управляемой интерференцией электронов. Основу развивающейся наноэлектроники составляют структуры, состоящие из чередующихся полупроводниковых слоев с различными электрофизическими характеристиками.

Наиболее часто для описания электронных свойств многослойных структур используют метод огибающих волновых функций, в котором в области каждого слоя влияние его периодического потенциала сводится к подстановке в оператор кинетической энергии эффективной массы, а изменения законов дисперсии на гетерограницах играют роль эффективных потенциалов.

Поэтому многие задачи оценки особенностей энергетического спектра и исследования движения частиц сводятся к исследованию поведения частиц в системах с различными видами потенциальных барьеров.

## Примеры решений нелинейных уравнений Шредингера

Рассмотрим ниже некоторые особенности поведения простейших квантовых систем в разных видах потенциальных барьеров и их принципиальное отличие от поведения классических систем. Удобнее всего это сравнение начинать с примеров исследования динамического поведения классического и квантового осцилляторов в заданном потенциальном поле

*Пример 1: Волновые гауссовские пакеты осцилляций квантового гармонического осциллятора.* Для гармонического осциллятора уравнение Шредингера имеет аналитическое решение. Волновую функцию в общем виде можно представить как:

$$\psi_j(\rho) = \frac{1}{\sqrt{2^{j-1} j-1} \sqrt{\pi}} H_{j-1}(\rho) e^{-\frac{1}{2}\rho^2}, \quad \rho = x \left( \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)^{-1}$$

в терминах полиномов Эрмита  $H_{j-1}(\rho)$ . Например,

$$H_1 = 2\rho, H_2 = 4\rho^2 - 2, H_3 = 8\rho^3 - 12\rho, H_4 = 16\rho^4 - 48\rho^2 + 12 \text{ и т.д.}$$

Для волновой функции  $\psi_6 \rho$  гармонического осциллятора на рис. 1,а показан график в терминах смещения  $\rho$  размерности  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Используя зависимость энергии  $E_j = \frac{\hbar\omega}{2} \epsilon_j$ ,  $\epsilon_j = 2j - 1$ , где  $j$  соответствует номеру уровня волновой функции, на рис. 1,б приведен график зависимости 20-го уровня энергии волновой функции гармонического осциллятора ( $2 \times 20 - 1 = 39$ ). Вертикальные линии показывают классические ограничения на энергию классического осциллятора, за который может выходить квантовый осциллятор.

Волновой пакет осцилляций квантового гармонического осциллятора определяется как суперпозиция волновых функций энергетических уровней в общем виде как  $\Psi \rho = N \sum_j g_j \psi_j \rho$ , с взвешенными весами  $g_j$  и постоянной нормирования  $N = 1 / \sqrt{\sum_j g_j^2}$ .

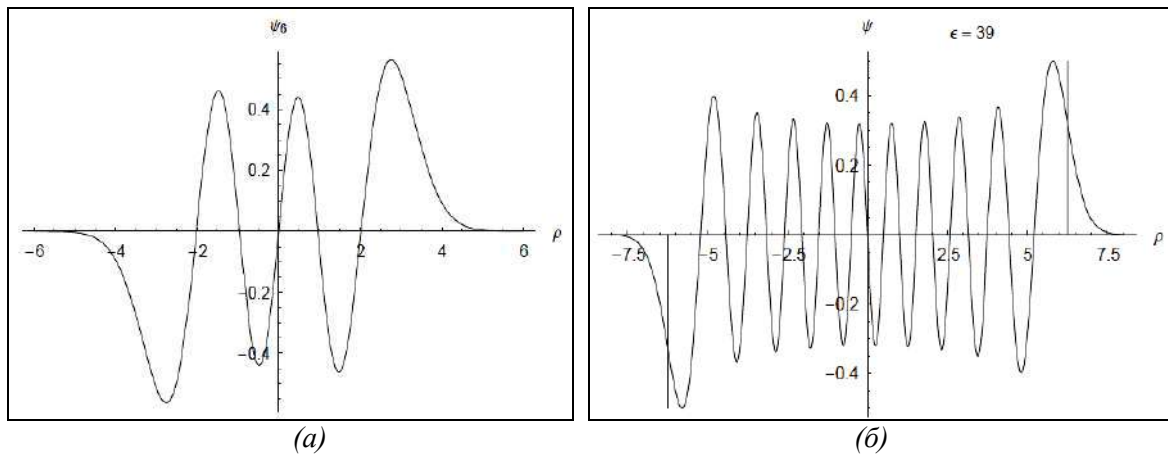


Рис. 1. Вид волновой функции  $\psi_6 \rho$  (а) и волновой функции 20-го энергетического уровня (б)

Например, волновой пакет можно сформировать из волновых функций для  $j = 1, 2, 3$  с относительными весами 25%, 50% и 25% в виде:

$$\Psi \rho = \frac{1}{\sqrt{0.25^2 + 0.5^2 + 0.25^2}} 0.25\psi_1 \rho + 0.5\psi_2 \rho + 0.25\psi_3 \rho \quad \text{и}$$

$$\int \psi_j \rho \psi_k \rho d\rho = \delta_{jk}, \quad \int |\Psi \rho|^2 d\rho = 1.$$

Плотность распределения вероятностей как квадрат от волнового пакета имеет вид, представленный на рис. 2, а.

Для описания движения волнового пакета во времени необходимо добавить к компонентам волновых функций зависящие от времени фазовые факторы в виде

$$e^{-iE_j t/\hbar} = e^{-i\frac{\hbar\omega}{2} (2j-1) t/\hbar} = e^{-i\omega \left(j - \frac{1}{2}\right) t}.$$

Здесь использована зависимость энергии  $E_j = \frac{\hbar\omega}{2} \epsilon_j$ ,  $\epsilon_j = 2j - 1$  и  $j$  соответствует номер уровня волновой функции. Тогда для рассматриваемого варианта сумма от произведений данных факторов компонент волновых функций с взвешенными весами при умножении на коэффициент нормирования имеет вид:  $\frac{1}{\sqrt{\sum_j g_j^2}} \left[ g_1 \psi_1 \rho e^{-i\omega \left(1 - \frac{1}{2}\right) t} + g_2 \psi_2 \rho e^{-i\omega \left(2 - \frac{1}{2}\right) t} + g_3 \psi_3 \rho e^{-i\omega \left(3 - \frac{1}{2}\right) t} \right]$ . При  $t = 0$  волновой

пакет  $\Psi \rho, 0$  идентичен независимому от времени волновому пакету  $\Psi \rho$  и имеет одинаковую плотность распределения вероятностей (см. рис. 2, а).

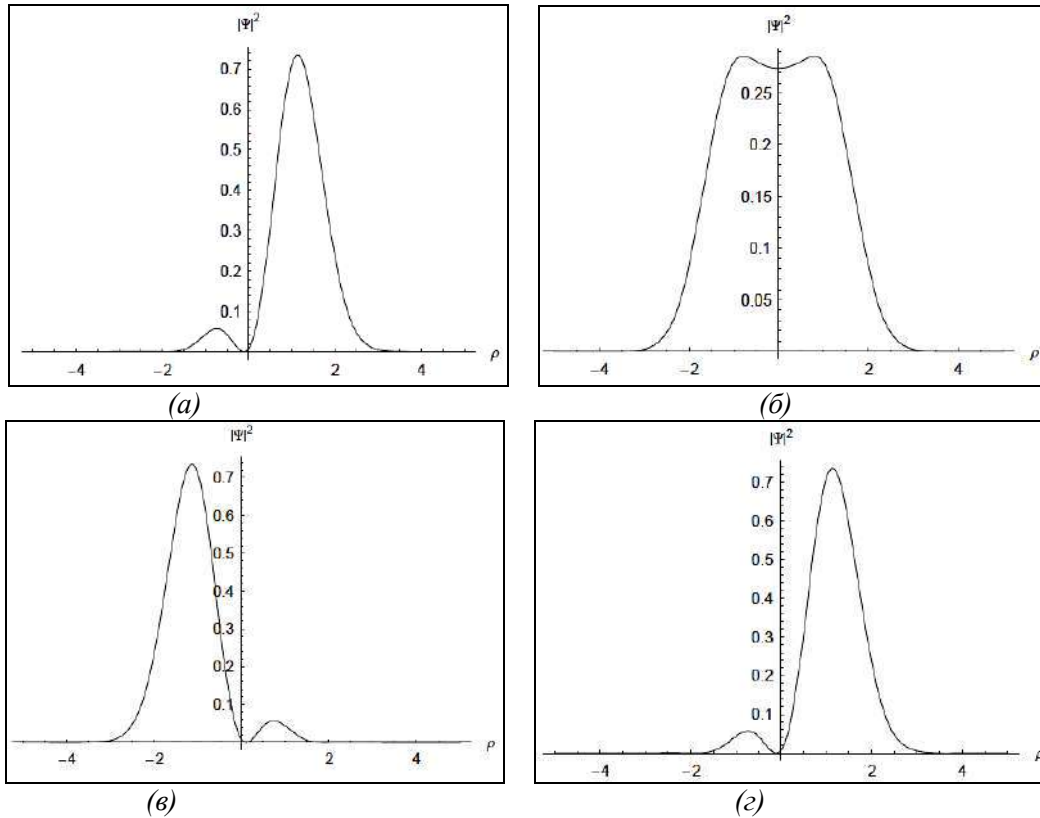


Рис. 2. Плотность распределения  $|\Psi(\rho)|^2$  для трех компонент волнового пакета  $\Psi(\rho)$

На рис. 2, б представлена плотность распределения вероятностей (квадрат от функции волнового пакета) для момента времени  $t = 0.25/\nu$ , где скорость  $\nu = 2\pi/\omega$ , соответствующее четвертой части периода осцилляции волнового пакета. На рис. 2, в представлен вид функции плотности распределения вероятностей для полупериода осцилляций волнового пакета при  $t = 0.5/\nu$ . И окончательно, после периода осцилляций при  $t = 1/\nu$  функция плотности распределения вероятностей имеет вид, представленный на рис. 2,г. Нетрудно заметить, волновой пакет возвращается в исходную форму и локализуется в момент времени  $t = 1/\nu$ .

Таким образом, общий вид зависящего от времени волнового пакета гармонического

осциллятора можно записать в виде: 
$$\Psi(\rho, t) = \frac{1}{\sqrt{\sum_k g_k^2}} \sum_j g_j \psi_j(\rho) e^{-i\omega\left(j-\frac{1}{2}\right)t}$$

Данный пакет нормирован на 1 и функция плотности распределения вероятностей  $|\Psi(\rho, t)|^2$  осциллирует с периодом  $1/\nu$ . Теперь можно спроектировать волновой пакет необходимого вида путем выбора значений соответствующих весов  $g_j$ . Экспериментально значения данных весовых коэффициентов определяются из состояния осциллятора в когерентной суперпозиции волновых функций  $\psi_j(\rho)$ . При этом когерентность означает определенное фазовое соотношение между волновыми компонентами пакета. Одним из общих результатов является гауссовское распределение весовых коэффициентов в суперпозиции состояния гармонического осциллятора.

На рис. 3, а представлен гауссовский волновой пакет, состоящий из 13 волновых функций  $\psi_j(\rho)$  гармонического осциллятора после одного периода колебаний.

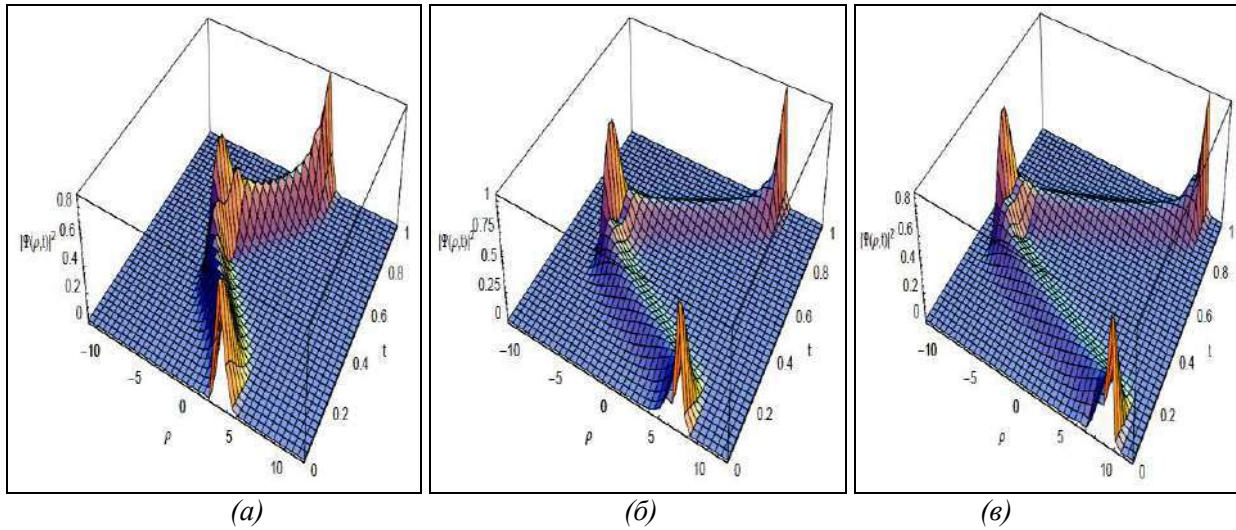


Рис. 3. Гауссовский волновой пакет, состоящий из 13 волновых функций  $\psi_j$   $\rho$  гармонического осциллятора после одного периода колебаний (а); для  $j = 27$  (б) и для  $j = 47$  (в)

Аналогично на рис. 3,б представлен график волнового пакета, состоящего из 13 волновых функций  $\psi_j$   $\rho$  гармонического осциллятора с индексом  $j = 27$  и на рис. 3,в – для  $j = 47$ .

Рассмотрим теперь вопрос о влиянии на зависимость от числа компонент волнового пакета на локализацию плотности распределения вероятностей.

На рис. 4 показана динамика локализации плотности распределения гауссовского волнового пакета для каждой четверти периода  $1/\nu$  осцилляций гармонического осциллятора в зависимости от компонент в виде 5, 13 и 21 числа составляющих суперпозицию волнового пакета и  $j = 30$ .

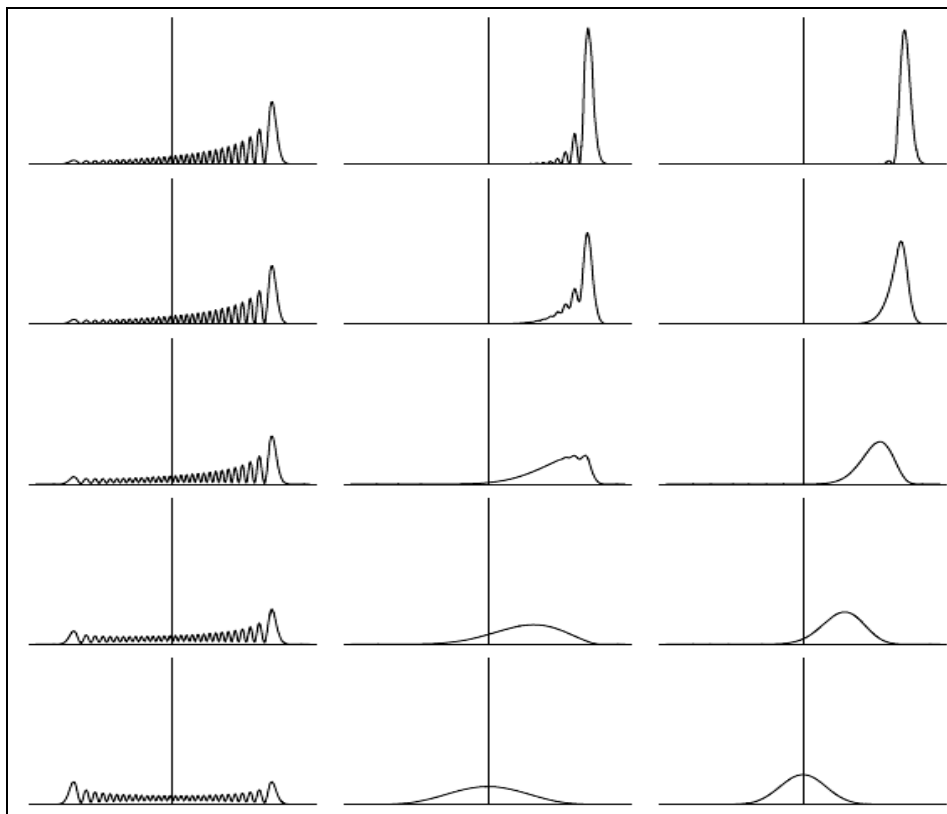


Рис. 4. Локализация плотности распределения гауссовского волнового пакета

На рис. 4 левый столбец соответствует 5-компонентному волновому пакету; средний столбец соответствует 13-компонентному волновому пакету; и правый столбец соответствует 21-компонентному волновому пакету [1, 2].

Из результатов, приведенных на рис. 4 видно, что добавление большего числа компонент локализуют плотность распределения вероятностей в малой области аргумента для полного периода осцилляций гармонического осциллятора.

Рассмотрим еще одну особенность простого квантового осциллятора, которая отсутствует в классическом варианте.

*Пример 2:* Рассмотрим, следуя [3] свободный квантовый осциллятор, описываемый уравнением Шредингера в виде:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (1)$$

при условии  $\psi(x, 0) = \text{Ai}\left(\frac{Bx}{\hbar^{3/2}}\right)$ , где  $B$  – постоянная,  $\text{Ai}$  – функция Эйри. Решение уравнения (1) с

заданным начальным условием  $\psi(x, 0) = \text{Ai}\left(\frac{Bx}{\hbar^{3/2}}\right)$  имеет вид [3]:

$$\psi(x, t) = \text{Ai}\left[\frac{B}{\hbar^{2/3}}\left(x - \frac{B^3 t^2}{4m^2}\right)\right] \exp\left\{\frac{iB^3 t}{2m\hbar}\left(x - \frac{B^3 t^2}{6m^2}\right)\right\}. \quad (2)$$

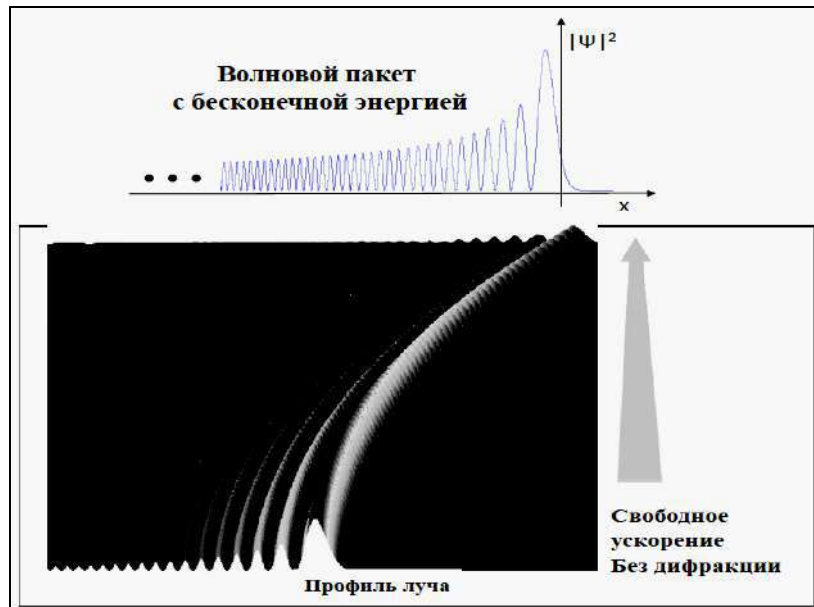
В интегральном представлении функции Эйри (2) можно представить в виде [3]:

$$\psi(x, t) = \frac{\hbar^{2/3}}{2\pi B} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{i\left(kx - \frac{ik^2 t}{2m} + \frac{\hbar^2 k^3}{3B^3}\right)\right\} dk. \quad (3)$$

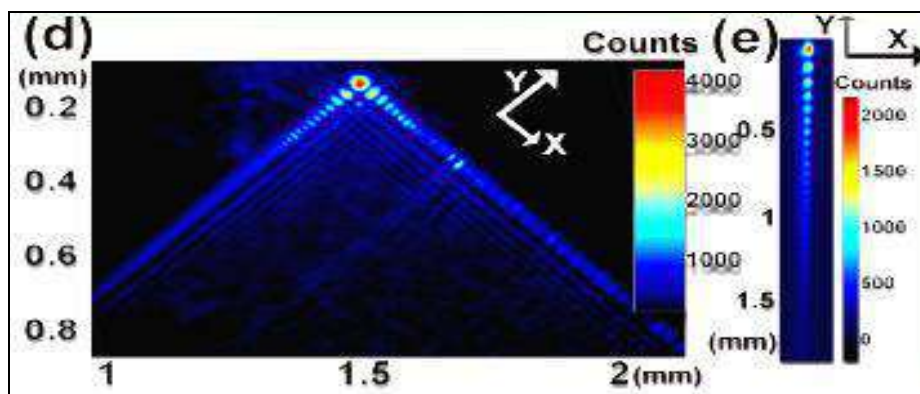
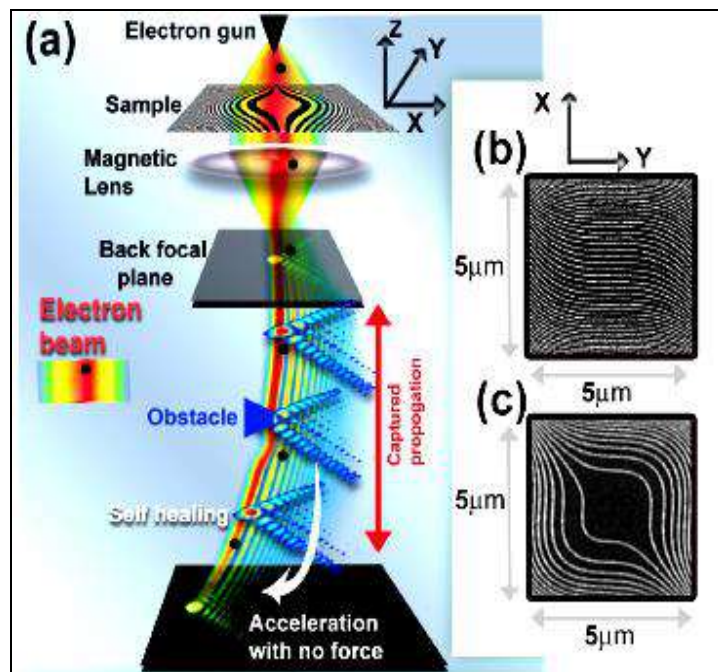
Из (2) следует, что  $|\psi|^2$  не расплывается и равноускоренно движется в виде не расплывающегося волнового пакета со скоростью  $B^3 t^2 / 2m^2$ . Такое, парадоксальное на первый взгляд, решение имеет глубокую связь с принципами симметрии волновых уравнений.

На рис. 5 показаны решения и экспериментальные результаты<sup>1</sup> электронных лучей Эйри с самоускорением.

<sup>1</sup>Bloch N.V., Lereah Y., Lilach Y., Gover A., Arie A. Self accelerating electron Airy beams // Nature. – 2013. – Vol. 494. – Pp. 331-335 (arXiv: 1205.2112v1 [physics. optics] 9 May 2012).



(a)

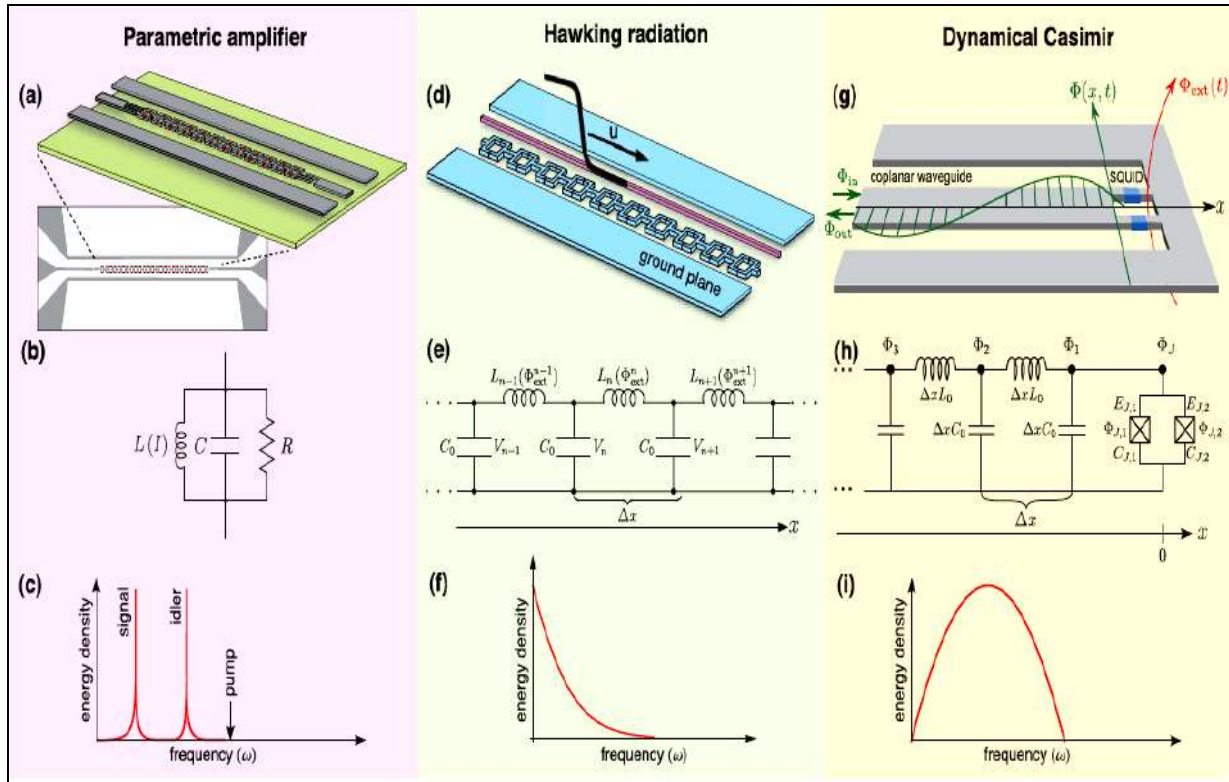


(б)

Рис. 5. Волновой пакет Эйри (а) и экспериментальная проверка самоускорения электронных лучей Эйри (б)

Новые решения<sup>2,3</sup> показали существование отдельных пиков в плотности распределения вероятностей, которые ускоряются со временем. При этом данные решения можно получить как частный случай преобразований Нидерера<sup>4</sup>.

Типовые схемы квантовых резонаторов<sup>5, 6, 7, 8, 9, 10</sup> показаны на рис. 6.



<sup>2</sup>Strange P. Semiclassical and Quantum Analysis of a Free Particle Hermite Wavefunction // arXiv:1309.6753v1 [quant-ph] 26 Sep 2013.

<sup>3</sup>Aiello A. Comment on Semiclassical and Quantum Analysis of a Focussing Free Particle Hermite Wavefunction by Paul Strange (arXiv:1309.6753 [quant-ph]) // arXiv:1309.7899v2 [quant-ph] 2 Oct 2013.

<sup>4</sup>Andrzejewski K., Gonera J., Kosinski P. Free Particle Wave Function and Niederer's Transformation // arXiv:1310.2799v1 [quant-ph] 10 Oct 2013.

<sup>5</sup>Nation P.D., Johansson J.R., Blencowe M.P., Nori F. Stimulating uncertainty: Amplifying the quantum vacuum with superconducting circuits // arXiv: 1103.0835v3 [quant-ph] 12 Jan 2012.

<sup>6</sup>Langford N.K. Circuit QED – Lecture notes // arXiv: 1310.1897v1 [quant-ph] 7 Oct 2013.

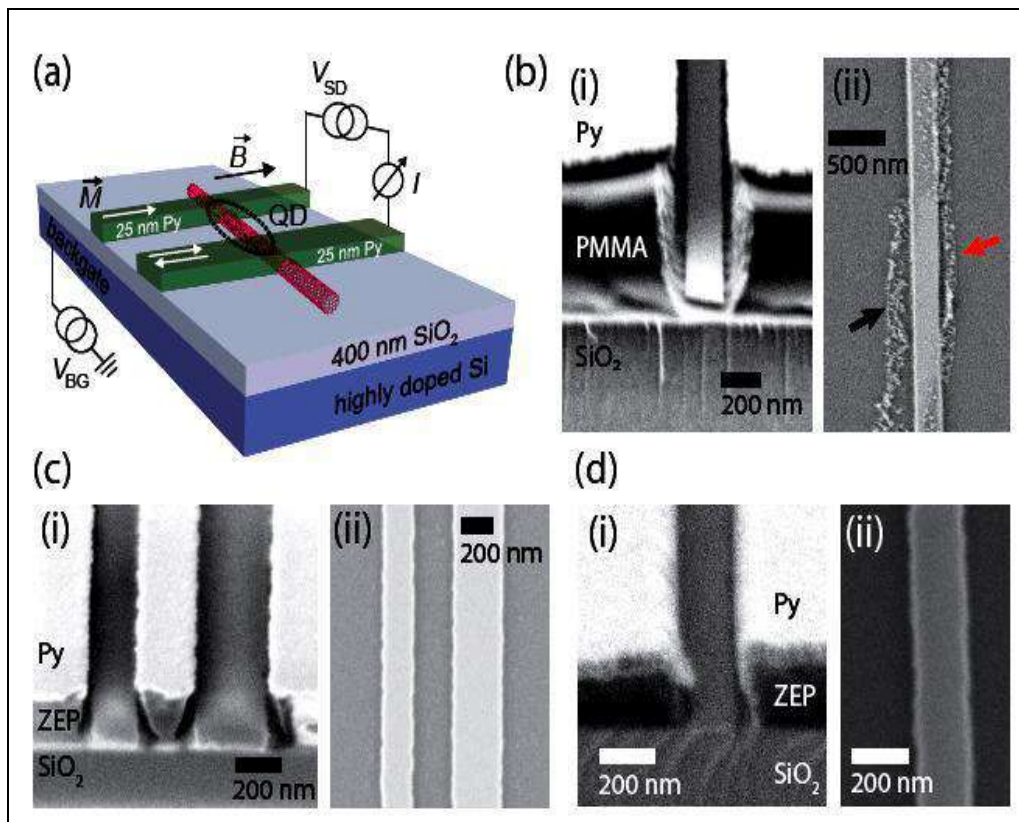
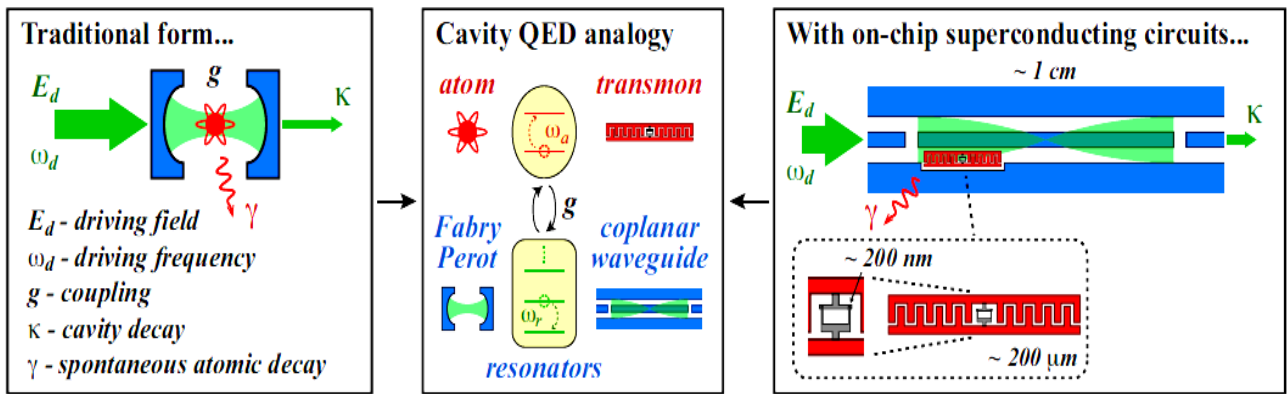
<sup>7</sup>Aspelmeyer M., Kippenberg T.J., Marquard F. Cavity optomechanics // arXiv: 1303.0733v1 [cond-mat.mes-hall] 4 Mar 2013.

<sup>8</sup>Georgescu I.M., Ashbach S., Nori F. Quantum simulation // arXiv: 1308.6253v1 [quant-ph] 28 Aug 2013.

<sup>9</sup>Poot M., van der Zant H.S.J. Mechanical systems in the quantum regime // arXiv: 1106.2060v2 [cond-mat.mes-hall] 12 Oct 2011.

<sup>10</sup>Samm J., Gramich J., Baumgarthner A. et all. Fabrication and characterization of nanospintronic device // arXiv:1312.0159v1 [cond-mat.mes-hall] 30 Nov 2013.





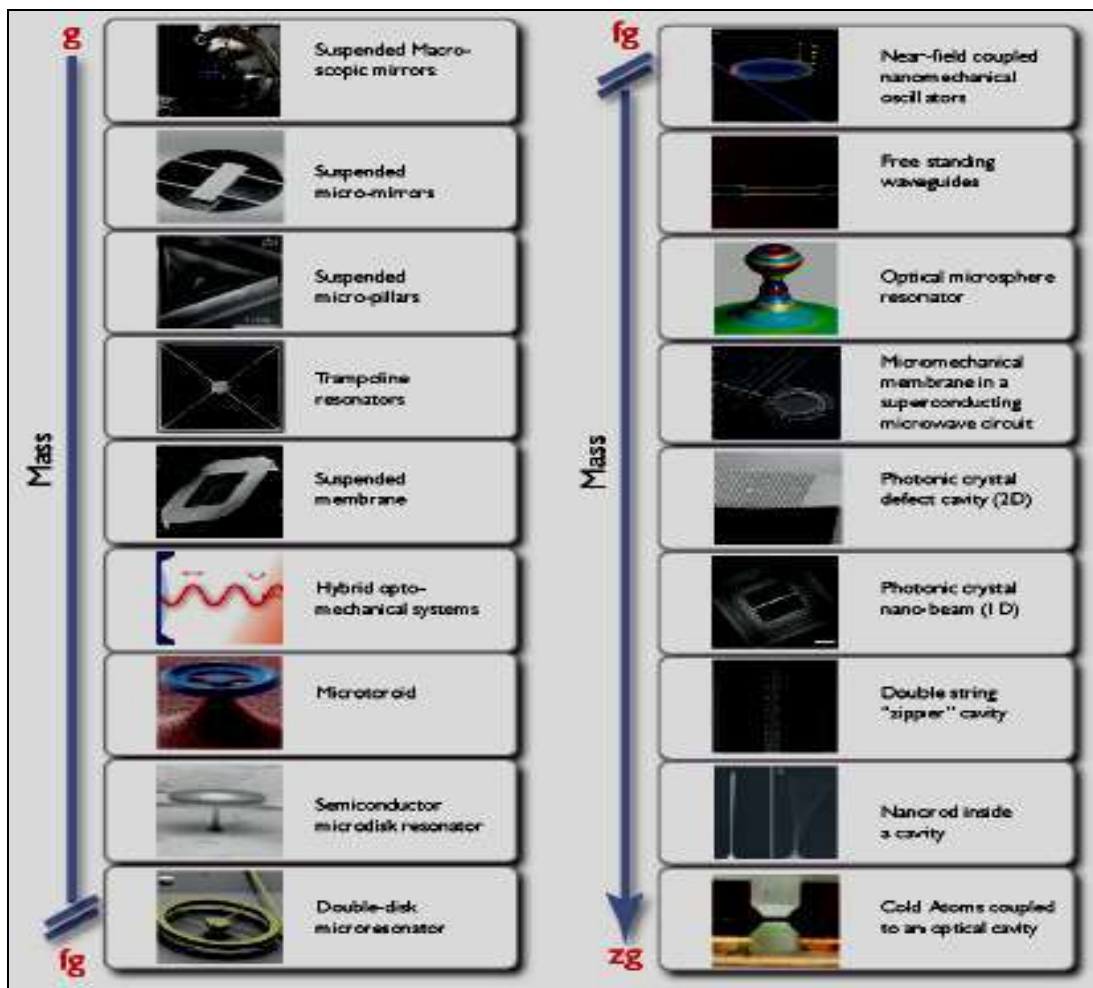


Рис. 6. Типовые схемы квантовых резонаторов и эквивалентные схемы

В [4, 5] показано экспериментально, что механический пьезоэлектрический резонатор с частотой 6 ГГц может долго находиться в основном квантовом состоянии и демонстрирует неклассическое поведение в квантовом пределе.

Рассмотрим некоторые особенности и интересные для теории управления результаты моделирования нелинейных квантовых динамических систем с перекрестными связями. Интерес к решению задач оптимального управления квантовыми динамическими системами продиктован, в первую очередь, бурным развитием прикладных задач, в частности необходимостью разработки элементной базы микро – и наноэлектроники для систем управления и вычислительной техники, новых квантовых релятивистских ИТ, интеллектуальных наноматериалов и мн. др.

Основные результаты по оптимальному управлению квантово-механическими процессами ограничиваются в основном исследованиями моделей, описываемых уравнением Шредингера и его разновидностей. Поэтому отметим, в первую очередь, ряд математических моделей, описываемых нелинейными уравнениями Шредингера и некоторые особенности моделирования динамического поведения исследуемого класса объектов управления.

### Примеры и решения уравнения Шредингера со сложными потенциалами

Типовыми моделями нерелятивистских квантовых систем, описываемых нелинейными уравнениями Шредингера, являются:

$$i \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + \Delta \psi(x,t) + |\psi(x,t)|^{p-1} \psi(x,t) = 0, \quad p > 1, \tag{4}$$

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta \psi + \sum_{j=1}^M \frac{z_j}{|x - x_j|} \psi - \left[ \int_{R^3} |\psi(y,t)|^2 \frac{1}{|x-y|} dy \right] \psi = 0, \quad (5)$$

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta \psi + \left[ \int_{R^3} |\psi(x,t)|^2 \frac{1}{|x-y|} dy \right] \psi = 0. \quad (6)$$

Уравнение (4) относится к классу нелинейных уравнений Шредингера с локальными нелинейностями в пространстве  $R_+ \times R^3$ ; уравнение (5) относится к классу нестационарных уравнений типа Хартри в  $R_+ \times R^3$ ,  $x_1, \dots, x_M$  - точки в  $R^3$ ,  $z_j$  - положительные константы; и (6) описывает нестационарное уравнение Пекара-Шоке.

Разновидностью (4) – (6) является уравнение следующего вида:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta \psi + V(x) \psi + \left[ \int_{R^3} |\psi(y,t)|^2 f(x-y) dy \right] \psi = 0, \quad (7)$$

где  $V \in L^p(R^N) + L^q(R^N)$ ,  $\frac{N}{2} < p, q \leq \infty$ ,  $f \in L^\alpha(R^N) + L^\beta(R^N)$ . Комплексно-значимое решение типа  $\psi(x,t) = u(x) \exp(i\lambda t)$ ,  $\lambda \in R$  при начальных условиях  $\psi(x,0) = \psi_0(x)$  приводит из (4) – (6) к следующим уравнениям:

$$-\Delta u + \lambda u = |u|^{p-1} u; \quad -\Delta u - \sum_{j=1}^M \frac{z_j}{|x - x_j|} u + \lambda u + \left( |u|^2 \frac{1}{|x|} \right) u = 0; \quad -\Delta u + \lambda u - \left( |u|^2 \frac{1}{|x|} \right) u = 0,$$

соответственно. По комплексно-значимой функции  $u \in L^2(R^3)$  определяется устойчивость орбитальных решений уравнений (4) – (6) при различных предположениях.

В табл. 1 приведены типовые формы нелинейных уравнений Шредингера и соответствующие условия нормировки, накладываемые на решение  $\psi(x,t)$ .

Таблица 1. Виды нелинейных уравнений Шредингера и условия нормировки решения

| № | Уравнение динамики  | Условия нормировки                          |
|---|---|---|
| 1 | $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi$                   | $\int_{-\infty}^{\infty}  \psi ^2 d^3x = 1$ |
| 2 | $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi ^2 \psi$          | $\int_{-\infty}^{\infty}  \psi ^2 d^3x = 1$ |
| 3 | $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi + U \psi ^2 \psi$  | $\int_{-\infty}^{\infty}  \psi ^2 d^3x = 1$ |
| 4 | $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta  \psi ^2 \psi + V\psi$          | $\int_{-\infty}^{\infty}  \psi ^4 d^3x = 1$ |
| 5 | $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta  \psi ^2 \psi + V \psi ^2 \psi$ | $\int_{-\infty}^{\infty}  \psi ^4 d^3x = 1$ |

Отметим, что в пп. 4 и 5 табл. 1 нормирование осуществляется со степенью 4 для плотности распределения вероятностей.

Допустим теперь, что имеются две не взаимодействующие системы  $\psi_1, \psi_2$  с координатами  $r_1, r_2$ . Если волновые функции  $\psi_1(r_1, t), \psi_2(r_2, t)$  описываются уравнениями:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k(r_k, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r_k, t) + F_k |\psi_k|^2 \right] \psi_k(r_k, t), \quad k=1, 2, \quad (8)$$

то, согласно постулату о сепарабельности, для произведения  $\psi_1 \psi_2$  имеем следующее уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1(r_1, t) \psi_2(r_2, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + U_1(r_1, t) + U_2(r_2, t) + F_{12} |\psi_1 \psi_2|^2 \right] \psi_1(r_1, t) \psi_2(r_2, t) \quad (9)$$

Таким образом, из (9) следует условие в виде функционального уравнения:

$$F_1 \rho_1 + F_2 \rho_2 = F_{12} \rho_1 \rho_2. \quad (10)$$

Обобщенным решением функционального уравнения (10) является

$$F_1 \rho = -b \ln \rho a_1, \quad F_2 \rho = -b \ln \rho a_2, \quad F_{12} \rho = -b \ln \rho a_1 a_2, \quad (11)$$

где  $b$  – универсальная постоянная (размерности в энергетических единицах);  $a_1, a_2$  – действительные постоянные.

Уравнение, удовлетворяющее описанным условиям, имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r, t) - b \ln |\psi|^2 a^n + F_k |\psi_k|^2 \right] \psi(r, t). \quad (12)$$

Если уравнение (12) имеет вид  $\psi(r, t) = \alpha \psi(r, t) \exp i\hbar b t \ln |\alpha|^2$  также является решением уравнения (12).

Рассмотрим некоторые особенности решений нелинейного уравнения Шредингера с логарифмической нелинейностью, как частный случай (12) и имеющий большое применение в исследовании процессов в ионных ловушках, диссипативных квантовых системах, оптике, капиллярных потоках жидкости и мн. др.

*Пример 3:* Нелинейное уравнение Шредингера с логарифмической нелинейностью. Рассмотрим уравнение следующего вида<sup>11</sup>:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial z} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi + g\psi \ln |\psi|^2, \quad (13)$$

где  $\psi = \psi(x, z)$ ,  $V = V(x, z)$  и  $g = g(z)$ . Решение уравнения (13) находится с помощью т.н. «анзатца – ansatz» в следующем виде:  $\psi = \rho(z) e^{i\eta(x, z)} \Phi[\zeta(x, z), \tau(z)]$ .

Подставляя данный анзатц в (13) получим:  $i\Phi_\tau = -\Phi_{\tau\tau} + G\Phi \log |\Phi|^2$ , где  $G$  – постоянная и имеем специфические формы для линейных и нелинейных коэффициентов в виде  $g = G\zeta_x^2$ ,  $V = -\eta_z - \eta_x^2 - 2g \log \rho$ , соответственно, и со следующими уравнениями ограничений:

$$\rho_z^2 + 2\rho^2 \eta_{xx} = 0, \quad \zeta_z + 2\eta_x \zeta_x = 0, \quad \zeta_{xx} = 0, \quad \tau_z = \zeta_x^2. \quad \text{Из условия } \zeta_{xx} = 0 \text{ следует}$$

$$\zeta = \alpha z x + \beta x, \quad \text{Тогда } \eta = -\frac{\alpha_z}{4\alpha} x^2 - \frac{\beta_z}{2\alpha} x + \gamma z, \quad \text{где функция } \gamma(z) \text{ введена после}$$

<sup>11</sup>Calaca L., Avelar A.T., Bazeia D., Cardoso W.B. Modulation of localized solutions for Schrodinger equation with logarithm nonlinearity // arXiv:1306.0526v1 [nlin.PS] 3 Jun 2013.

интегрирования по координате  $x$ . Тогда нетрудно получить из соотношения  $\rho^2_z + 2\rho^2\eta_{xx} = 0$  выражение  $\rho = \sqrt{\alpha}$ , а из  $\tau_z = \zeta_x^2$  следует, что  $\tau = \int \alpha^2 dz$ .

Тогда для линейных и нелинейных коэффициентов получим

$$V = \delta_1 z^2 + \delta_2 z + \delta_3, \quad \mathbf{g} = G\alpha^2,$$

где  $\delta_1 = \frac{\alpha_{zz}}{4\alpha} - \frac{\alpha_z^2}{2\alpha^2}$ ,  $\delta_2 = \frac{\beta_{zz}}{2\alpha} - \frac{\alpha_z\beta_z}{\alpha^2}$ ,  $\delta_3 = -\gamma_z - \frac{\beta_z^2}{4\alpha^2} - G\alpha^2 \log \alpha$ .

Положим, что  $\Phi = \phi \zeta \exp -i\varepsilon\tau$  получим:

$$\phi = \exp \left[ \frac{\varepsilon + G + 1 + G\zeta^2}{2G} \right]. \tag{14}$$

Рассмотрим частные случаи решения (14) выбором различных значений параметров  $\alpha, \beta$  и  $\gamma$

*Вариант 1.* Пусть  $\alpha = 1$ ,  $\beta = -\sin \omega z$  и  $\gamma$  выбирается из условия  $\delta_3 = 0$ . Тогда  $\delta_1 = 0$  и  $\delta_2 = \omega^2 \sin \omega z / 2$ . В этом случае  $V(z) = \frac{\omega^2}{2} \sin \omega z x$  и  $\mathbf{g} = G$ ; имеем также  $\zeta = x - \sin \omega z$  и  $\tau = z$ . Амплитуда и фаза анзатца задается из условия  $\rho = 1$  и имеем  $\eta = \frac{\omega}{4} [2x - \omega \cos \omega z] \cos \omega z$ , соответственно.

На рис. 7 показано поведение линейного потенциала (коэффициента) и интенсивность поля  $|\psi|^2$  при  $G = -1$  (самофокусирующаяся нелинейность),  $\varepsilon = -G$  и  $\omega = \sqrt{2}$ .

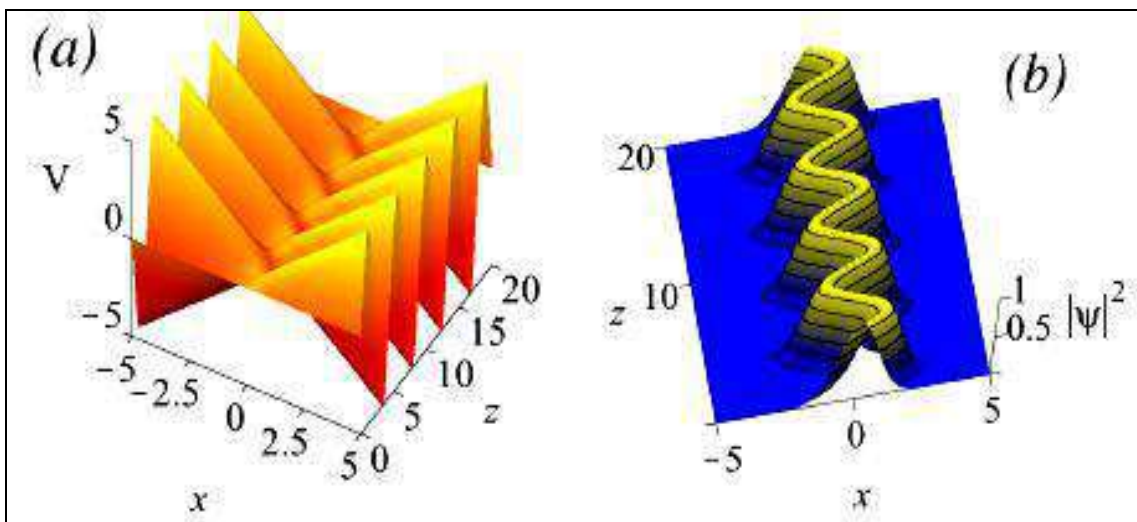


Рис. 7. Вид линейного потенциала (а) и модулированного решения для Варианта 1 (б)

Из рис. 7 видно, что потенциал имеет зигзагообразную форму (рис. 7,а), что порождает осцилляции интенсивности поля (рис. 7,в).

*Вариант 2.* Предположим теперь, что имеем нелинейные коэффициенты с осциллирующей амплитудой. Например, допустим, что  $\alpha = [1 + \cos^2 \omega z] / 2$ ,  $\beta = 0$  и  $\gamma$  выбрана так, что  $\delta_3 = 0$

Тогда  $\zeta = [0.5 + 0.5 \cos^2 \omega z]x$  и  $\tau = [11 \cos \omega z + 2 \cos^3 \omega z] \sin \omega z + 19\omega z / 32\omega$ .

Имеем также  $V = \frac{1 - 5 \cos^2 \omega z + 2 \cos^4 \omega z}{2[1 + \cos^2 \omega z]^2} \omega^2 x^2$ ,  $g = \frac{G}{4} [1 + \cos^2 \omega z]^2$ .

Амплитуда и фаза решения задается как

$$\rho = \sqrt{\frac{1 + \cos^2 \omega z}{2}}, \quad \eta = \frac{\omega \cos \omega z \sin \omega z}{2[1 + \cos^2 \omega z]} x^2 + \gamma,$$

соответственно, где  $\gamma = \frac{1}{4} G [1 + \cos^2 \omega z]^2 \ln \left[ \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \omega z) \right]$ .

Данные параметры позволяют получить новое решение для  $\psi$ . На рис. 8 показан профиль для  $|\psi|^2$  при  $G = -1$  (самофокусирующаяся нелинейность),  $\varepsilon = -G$  и  $\omega = 1$ .

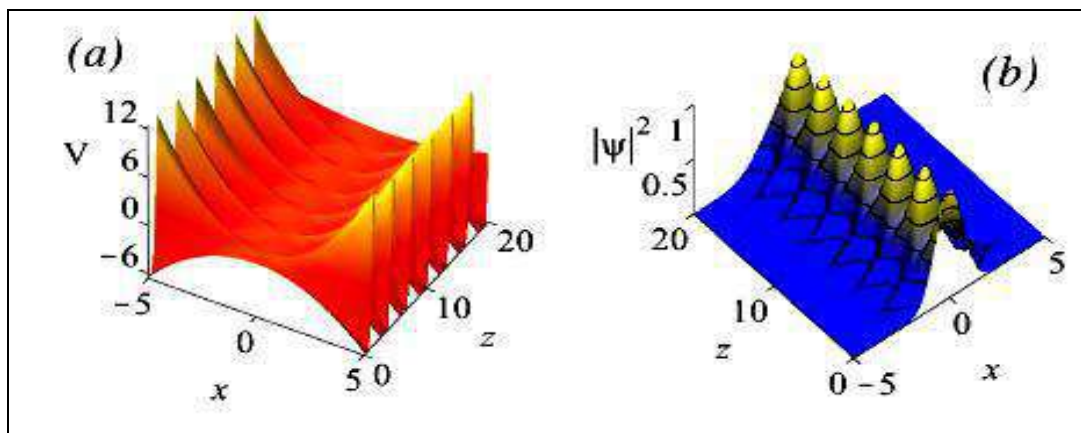


Рис. 8. Вид линейного потенциала (а) и модулированного решения для Варианта 2 (в)

Из рис. 8 видно, что потенциал приобретает форму машущей крыльями птицы, что приводит к формированию осцилляций типа «дышащих вершин».

*Вариант 3.* Наложим более сложные условия на линейный потенциал в виде комбинации линейного и квадратичного члена от  $x$  и периодической модуляции по координате  $z$ . Тогда имеем

$$\alpha = \frac{1}{2} [1 + \cos^2 \omega_1 z], \quad \beta = -2 \sin \omega_2 z \quad \text{и} \quad \gamma \text{ выбрана так, что } \delta_3 = 0.$$

Такой выбор приводит определению параметров:

$$\zeta = \frac{1}{2} [1 + \cos^2 \omega_1 z] x - 2 \sin \omega_2 z, \quad \tau = \frac{1}{32\omega_1} [11 \cos \omega_1 z + 2 \cos^3 \omega_1 z] \sin \omega_1 z + 19\omega_1 z,$$

$$\delta_1 = \frac{\omega_1^2 [1 - 5 \cos^2 \omega_1 z + 2 \cos^4 \omega_1 z]}{2 [1 + \cos^2 \omega_1 z]^2} \quad \text{и}$$

$$\delta_2 = \frac{1}{[1 + \cos^2 \omega_1 z]^2} 2\omega_2 [\omega_2 + \omega_2 \cos^2 \omega_1 z] \sin \omega_2 z - 8\omega_2 \cos \omega_1 z \omega_1 \cos \omega_2 z \sin \omega_1 z.$$

Тогда  $V = \delta_1 x^2 + \delta_2 x$  и  $g = \frac{G}{4} [1 + \cos^2 \omega_1 z]^2$ . Амплитуда и фаза определяются как

$$\rho = \sqrt{\frac{1}{2} [1 + \cos^2 \omega_1 z]}, \quad \eta = \frac{\omega_1 \cos \omega_1 z \sin \omega_1 z}{2 [1 + \cos^2 \omega_1 z]} x^2 + \frac{2\omega_2 \cos \omega_2 z}{1 + \cos^2 \omega_1 z} + \gamma, \text{ соответственно, и}$$

$$\gamma = -\frac{G}{4} [1 + \cos^2 \omega_1 z]^2 \ln \left[ \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \omega_1 z) \right] - \frac{4\omega_2^2 \cos^2 \omega_2 z}{[1 + \cos^2 \omega_1 z]^2}.$$

На рис. 9 показаны линейный потенциал и профиль решения  $|\psi|^2$  при  $G = -1, \varepsilon = -G, \omega_1 = \omega_2 = 1$ .

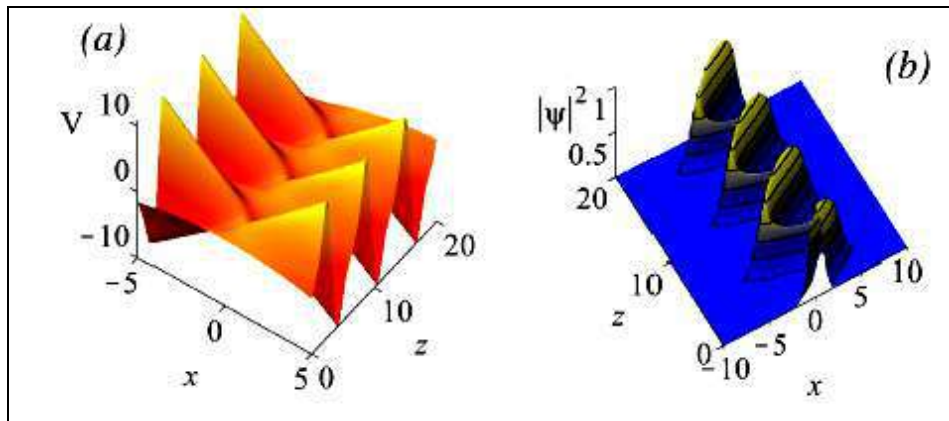


Рис. 9. Вид линейного потенциала (а) и модулированного решения для Варианта 3 (в)

Данный тип модуляции приводит к осцилляциям в  $x$ -направлении с осцилляциями типа «дышащих вершин». Решения также имеют квазипериодические осцилляции в  $x$ - и / или  $z$ -направлениях и зависят от отношения  $\omega_1 / \omega_2$  как иррациональных чисел.

Рассмотрим кратко важный вопрос устойчивости полученных решений.

Вводятся понятия мощность (норма) и энергия решения в виде:

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx \text{ и } E = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_x|^2 + V |\psi|^2 + g |\psi|^2 \log |\psi|^2 - 1 dx,$$

соответственно.

Для исследования устойчивости для рассмотренных выше решений осуществляется оценка чувствительности на случайное возмущение амплитуды решения в виде  $\psi = \psi_0 [1 + 0.05 \xi x]$ , где  $\psi_0 = \psi(x, 0)$  – аналитическое решение для Вариантов 1, 2 и 3 и  $\xi x \in [-0.5, 0.5]$  является случайной величиной с нулевым средним в каждой точке дискретной решетки интегрирования.

Для рассмотренных Вариантов решений на рис. 10 показаны результаты численного моделирования распространения возмущенного сигнала.

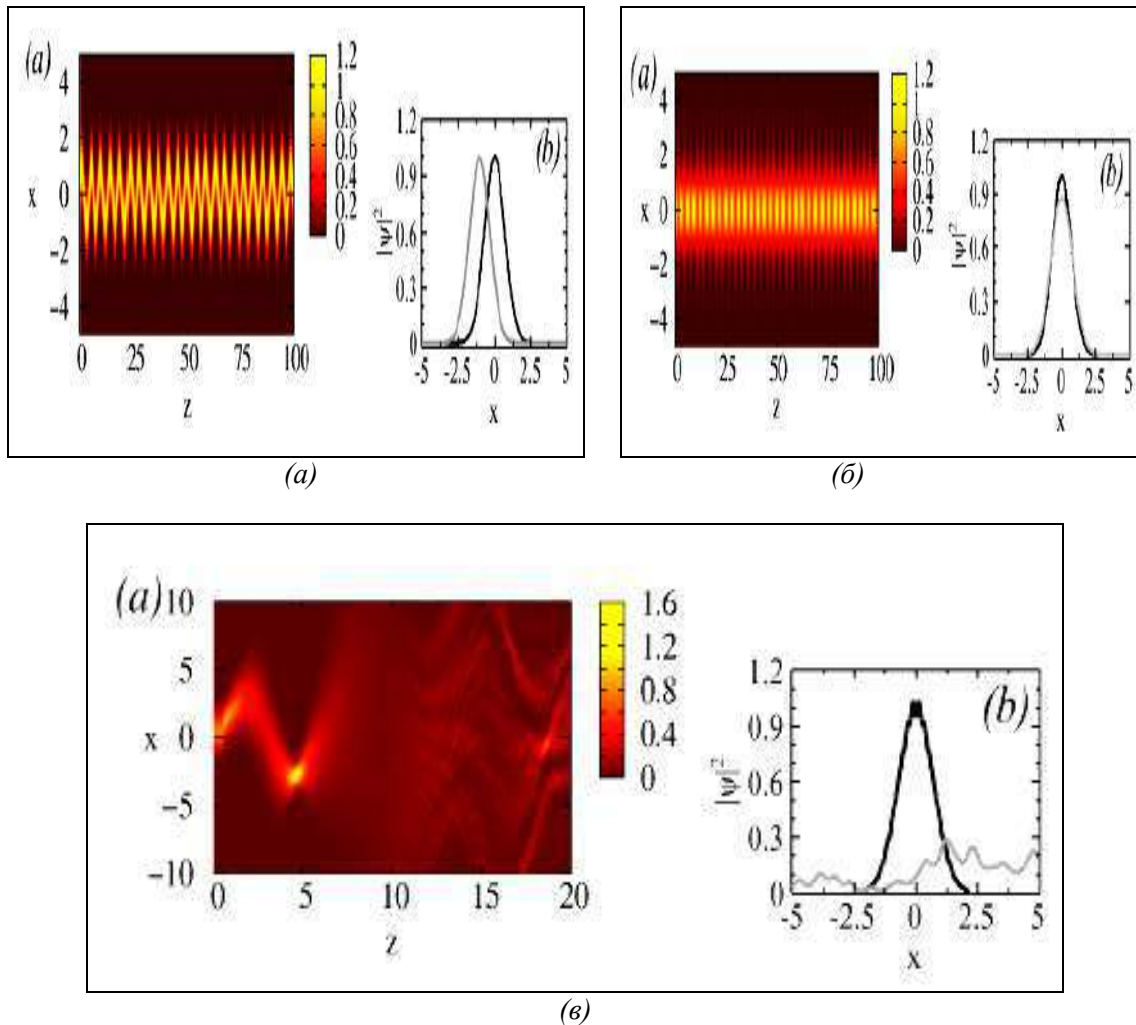


Рис. 10. Графики решений для Варианта 1 (а); для Варианта 2 (б) и для Варианта 3 (в) в плоскости  $x-z$  и сравнение между входным и выходными сигналами

Входное значение состояния  $\psi(x, 0)$  для  $z=0$  сравнивается с выходным сигналом при  $z=1000$ . Для Варианта 1 норма равна  $P \approx 1.76911$  со стандартным отклонением  $5 \times 10^{-13}$  и энергией  $E \approx 90 \pm 14$ ; для Варианта 2 имеем  $P \approx 1.76911$  со стандартным отклонением  $\approx 10^{-13}$  и энергией  $E \approx 49 \pm 12$  (с осциллирующей частью).

Из рис. 10,а,б следует, что оба решения Вариантов 1 и 2 устойчивы.

В случае Варианта 3 решение неустойчиво при норме  $P \approx 1.77096$  со стандартным отклонением  $\approx 10^{-14}$  и энергией  $E \approx 186 \pm 184$  (со случайными траекториями в области неустойчивости) в конечном состоянии  $z=20$ .

В этом случае Варианта 3 модуляция приводит к неустойчивому состоянию.

Рассмотрим частный случай (5) для моделирования динамического поведения вращения кубита в парах не расположенных рядом квантовых точках.

*Пример 4: Моделирование вращений кубита в квантовых точках.* Уравнение Шредингера, описывающее динамику эволюции электронных систем, имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[ \sum_{j=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_j}^2 + V(\vec{r}_j) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \sum_{k>j=1}^N \frac{1}{r_{kj}} \right) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

Данное уравнение можно эффективно решить с использованием полиномов Чебышева в виде:



$$\psi(\vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{2} (E_{\max} + E_{\min}) t\right) \sum J_n \alpha T_n -i\tilde{H} \psi(\vec{r}, 0), \text{ где } E_{\max} \text{ и } E_{\min} - \text{ верхняя и}$$

нижняя границы энергии в точках численной решетки,  $J_n \alpha$  - функция Бесселя первого порядка,  $T_n$  - полиномы Чебышева. Нормированный Гамильтониан системы определяется как  $\tilde{H} = 2H - E_{\max} - E_{\min} / E_{\max} - E_{\min}$  с гарантированной сходимостью. Все электроны системы расположены на одинаковых энергетических уровнях и эволюционируют когерентно во времени при взаимодействии друг с другом. В принятых предположениях на рис. 11,а показана эволюция электрона в системе взаимосвязанных квантовых точек в соответствии с приведенным выше уравнением движения электронов.

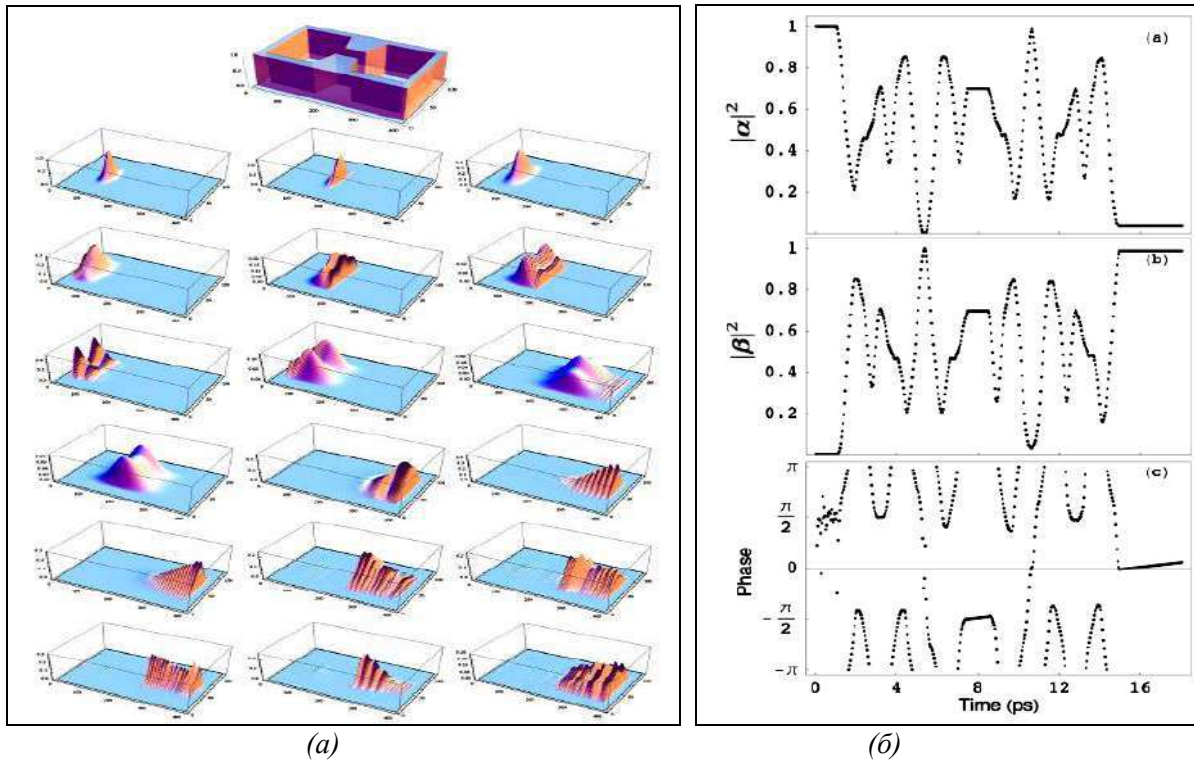


Рис. 11. Эволюция волновой функции в системе связанных квантовых точек (а) и вращение кубита на сфере Блоха в разные моменты времени (б)

Все возможные вращения кубита на сфере Блоха могут управляться центральным потенциальным барьером и / или электрон – электрон взаимодействиями как показано на рис. 11,б, которые эквивалентны квантовому случайному блужданию на решетке<sup>12</sup>.

В этом случае амплитуды и фазы для перехода влево  $|L\rangle$  или вправо  $|R\rangle$  показаны на рис. 11,б для различных моментов времени.

Пример 5: Информационно-термодинамические модели решения уравнения Шредингера. В общем случае класс уравнений типа (8) имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r, t) + F |\psi(r, t)|^2 \right] \psi(r, t)$$

с Лагранжианом:

<sup>12</sup>Manouchehri K., Wang J.B. Solid state implementation of quantum random walks on general graphs // arXiv:0811.1795v1 [quant-ph] 11 Nov 2008.

$$L_{r,t} = \frac{i\hbar}{2} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \nabla \psi - U \psi^* \psi + G |\psi|^2 \psi^* \psi,$$

где  $G(\rho) = \rho^{-1} \int_0^\rho F(\rho') d\rho'$ . Для стационарного состояния  $\psi(r,t) = \psi(r) \exp(-i\omega t)$  и энергия

$E(\psi)$  имеет вид  $E(\psi) = \hbar\omega + C + \left\langle \left[ G |\psi|^2 - F |\psi|^2 \right] \right\rangle$ . Для логарифмических нелинейностей  $F(\rho) = -b \ln \rho a^n$  и  $G(\rho) = -b \ln \rho a^n + b$  при  $C = -b$  имеем  $E(\psi) = \hbar\omega$ .

В общем виде  $E(\psi) = \hbar^2 / 2m \langle \nabla \psi | \nabla \psi \rangle + \langle \psi | U | \psi \rangle - b \langle \psi | \ln |\psi|^2 a^n | \psi \rangle$  и  $E(\psi_1 \psi_2) = E(\psi_1) + E(\psi_2)$ . Если  $\rho = |\psi(r,t)|^2$  интерпретировать как плотность распределения вероятностей и  $\psi(r) \rightarrow \sum_{i=1}^k \sqrt{p_i} \psi(r-r_i)$ ,  $\sum_{i=1}^k p_i = 1$ , то из выражения для  $E(\psi)$  получим следующее выражение для изменения энергии:  $\Delta E = -b \sum_{i=1}^k p_i \ln p_i$ .

Таким образом, нелинейная часть изменения функционала энергии имеет форму информационной энтропии Шеннона  $b > 0$ . Установленная взаимосвязь между решениями уравнений типа Шредингера и энтропией привела к широкому использованию информационно-термодинамических подходов к исследованию квантовых систем.

В частности, широкому обсуждению подверглись соотношения неопределенности Гейзенберга с точки зрения энтропийных оценок наблюдаемых (измеряемых) величин в квантовой нерелятивистской механике. Так, например, для известных соотношений неопределенности наблюдений пары  $L_z - \phi$  «момент – угол» (из общего энтропийного соотношения для двух наблюдаемых  $A$  и  $B$  в виде  $S^A + S^B \geq b$ ) имеем соотношение:  $S^\phi + S^{L_z} \geq -\ln \Delta\phi / 2\pi$ . Аналогично для пары «положение - импульс» типа  $x - p$  имеем:

$$S^x + S^p \geq 1 - \ln 2 - \ln \gamma, \quad \gamma = \frac{\Delta x \Delta p}{\hbar}.$$

Другой оценкой в данной ситуации является  $S^x + S^p \geq -2 \ln \left( \frac{1 + \sqrt{\gamma}}{2} \right)$ .

Отметим, что значение энтропии  $S$  определяется через волновую функцию  $|\psi(t,x)|^2$  как  $S = -|\psi(t,x)|^2 \ln |\psi(t,x)|^2$ . Тогда для пары «угол-момент» имеем соотношение в виде:

$$-\int dx |\psi|^2 \ln |\psi|^2 - \int dp \hbar |\tilde{\psi}|^2 \ln |\tilde{\psi}|^2 \geq 1 + \ln \pi,$$

где  $\tilde{\psi}(p) = 2\pi\hbar^{-S} \int dx e^{-ipx/\hbar}$ .

Таким образом, можно получить нижние границы точности наблюдений в терминах энтропии наблюдений, не решая волновых квантовых уравнений.

*Пример 6.* Для линейного гармонического осциллятора в стационарном состоянии уравнение Шредингера имеет вид  $H\varphi = E\varphi$ ,  $H$  – гамильтониан,  $E$  – его собственные значения (уровни энергии, см. выше примеры). Пусть  $\varphi = \sum_{i=1}^{\infty} A_i \varphi_i$ , где  $\varphi_i$  – собственные функции оператора  $H$ , соответствующие собственным значениям  $E_i$ . Если в момент времени  $t_1$  состояние квантовой

системы описывается волновой функцией  $\varphi^1 = \sum_{i=1}^{\infty} A_i^1 \varphi_i$ , и в момент времени  $t_2$  состояние квантовой системы описывается волновой функцией  $\varphi^2 = \sum_{i=1}^{\infty} A_i^2 \varphi_i$  то количество информации относительно энергетических уровней задается в следующем виде:

$$I \varphi^2 | \varphi^1 = \sum_{i=1}^{\infty} |A_i^2|^2 \log \frac{|A_i^2|^2}{|A_i^1|^2},$$

где вероятность  $P E_i$  нахождения системы на энергетическом уровне  $E_i$  определяется как

$P E_i = |A_i|^2$ . Для гармонического осциллятора имеем  $E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$  и собственные функции

$\varphi_n = \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} H_n \alpha x$ ,  $\alpha = \sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}$ ,  $m$  – масса осциллятора,  $k$  – коэффициент жесткости.

Пусть  $E_0^1$  и  $E_0^2$  – два основных состояния осциллятора с основными частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$ . Тогда

$E_0^1 = \frac{1}{2} \hbar\omega_1$  и  $E_0^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega_2$ ,  $\varphi_0^1 = \frac{\alpha_1}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha_1^2 x^2}$ ,  $\varphi_0^2 = \frac{\alpha_2}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha_2^2 x^2}$  и искомое количество информации равно:

$$\begin{aligned} I \varphi^2 | \varphi^1 &= \sum_{i=1}^{\infty} |A_i^2|^2 \log \frac{|A_i^2|^2}{|A_i^1|^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0^2(x)^2 \log_2 \frac{\varphi_0^2(x)^2}{\varphi_0^1(x)^2} = \log_2 \left( \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \right) + \frac{1}{2} \left[ \log_2 e \left( \frac{\alpha_1^2}{\alpha_2^2} \right) - 1 \right]. \end{aligned}$$

Из зависимости количества информации  $I \varphi^2 | \varphi^1$  от отношения энергетических уровней

$E_0^2 / E_0^1$  получим, что для извлечения одного бита информации требуется соотношение энергетических уровней  $E_0^2 / E_0^1 = 9,8$  или  $E_0^2 / E_0^1 = 0,28$ . При этом локальная точность

$$\delta \Delta x = \Delta x_2 - \Delta x_1 = \frac{\sqrt{E_0^1} - \sqrt{E_0^2}}{\sqrt{E_0^1 E_0^2}}, \text{ где } \Delta x^2 = \frac{\hbar^2}{4mE_0}.$$

*Пример 7: Свойство решения Шредингера для свободной частицы и энтропийные оценки неопределенности.* Рассмотрим уравнение Шредингера для свободной частицы ( $m = 1, \hbar = 1$ )

следующего вида:  $i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ , которому соответствует семи фактор-алгебра Ли с базисом из операторов. Решение данного уравнения, как известно, имеет вид:

$$\psi(q, t) = \text{Ai} \left[ \frac{B}{\hbar^{2/3}} \left( q - \frac{B^3 t^2}{4m^2} \right) \right] \exp \left\{ \frac{iB^3}{2m\hbar} \left( q - \frac{B^3 t^2}{6m^2} \right) \right\},$$

где  $\text{Ai}$  – функция Эйри, и не расплывается как волновой пакет, а равноускоренно движется в виде не расплывающегося пакета со скоростью  $\frac{B^3 t^2}{2m^2}$ . В квантовой механике динамика свободной частицы

задается в гильбертовом пространстве  $L^2 \mathbb{R}^3$  унитарным оператором  $U t = e^{-iH_0 t}$  где  $H_0 = \frac{1}{2m} p^2$ ,  $\psi t = e^{-iH_0 t} \psi$ . При  $\|\psi\| = 1$  и  $t > 0$  имеем следующее энтропийное неравенство

$$S |\psi|^2 + S |\psi t|^2 > 3 \left( \ln \frac{\pi t}{m} + 1 \right).$$

С течением времени  $t > 0$  в общем случае имеем  $S |\psi t|^2 > S |\psi|^2$ , т.е. имеем энтропийную оценку расплывания волнового пакета по отношению к исходному состоянию.

При движении частицы в постоянном электрическом поле  $H = H_0 + \vec{E} \cdot \vec{r}$ ,  $\vec{E} = E \cdot e_x$  имеем  $U t = e^{-iH t}$  и  $S |\psi|^2 + S |\psi t|^2 > 3 \ln \frac{\pi E t}{m}$ .

Таким образом, при  $t_2 > t_1$  получим  $3 \ln \frac{\pi E t_2}{m} \geq S |\psi t_1|^2 + S |\psi|^2$  и имеем энтропийную оценку возрастания неопределенности наблюдения локализованной в пространстве частицы.

Для оператора  $Q$  состояния частицы  $\langle Q \rangle = \langle \psi, Q \psi \rangle$ , дисперсия  $\Delta_{\psi} Q^2 = \langle \psi, Q^2 \psi \rangle - \langle Q \rangle^2$  для свободной частицы  $\psi t = e^{-iH t} \psi$  имеем:

$$\Delta_{\psi t} Q^2 = \Delta_{\psi} Q^2 + 2 \left[ \frac{1}{2} \langle QP + PQ \rangle - \langle Q \rangle \langle P \rangle \right] \frac{t}{m} + \Delta_{\psi} P^2 \frac{t^2}{m^2},$$

где  $\Delta_{\psi} P^2 = \int P - \langle P \rangle^2 |\psi P|^2 dP$ .

При наличии потенциала  $|V| = \sup_{\vec{r} \in \mathbb{R}^3} \int \frac{V \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' < \frac{2}{\pi}$  существует постоянная  $C \in \mathbb{R}^-$  такая, что  $\|\exp -it H_0 + V \psi\|_{\infty} \leq C t^{-3/2} \|\psi\|$ ,  $t > 0, \psi \in L^2 \mathbb{R}^3 \cap L^1 \mathbb{R}^3$  и имеем энтропийную оценку

$$S |\psi|^2 + S |\exp -it H_0 + V \psi|^2 \geq 3 \ln C^{-2/3} t.$$

### Уравнение Дирака для заряженных частиц со спином $s = S$ , находящиеся в заданном электромагнитном поле

Согласно квантовому постулату для частиц со спином  $s = S$  число компонент волновой функции должно равняться  $4s + 2 = 4$ . Как известно, объект, описываемый этими волновыми функциями в уравнениях Дирака, является спинором [6-11]. Компоненты спинора имеют своеобразные законы преобразования, представленные в [12, 13, Табл. 4.2, с. 225]. Так как уравнение Дирака является уравнением первого порядка  $\alpha = 1$ , то согласно квантовому постулату имеем  $\alpha 2s + 1 = 2$ . Таким образом, в соответствии с алгоритмом квантового постулата для частицы со спином  $s = S$  трансформированное уравнение Гамильтона-Якоби следует возвести в степень 2.

В результате имеем

$$\left[ \left( \frac{\partial \Omega}{\partial x_j} - \frac{e}{c} A_j \frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 + m^2 c^2 \left( \frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 \right]^2 = 0. \tag{15}$$

Уравнения классического аналога уравнений Дирака, согласно [12, 13], будут иметь вид

$$\begin{pmatrix} 0 & p_0 - mcp_s & -p_1 - ip_2 & p_3 \\ -p_0 - mcp_s & 0 & p_3 & p_1 + ip_2 \\ p_1 - ip_2 & -p_3 & 0 & -p_0 + mcp_s \\ -p_3 & -p_1 + ip_2 & p_0 + mcp_s & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} = 0, \quad (16)$$

где  $p_j = \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{e}{c} A_j p_s$ ;  $p_s = \frac{\partial}{\partial S}$ ,  $j = 1, 2, 3$ ;  $p_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{c} \varphi^0 p_s$ .

В (16) использованы «векторные» потенциалы  $A_1, A_2, A_3$  и «скалярный» потенциал  $\varphi^0$  вместо 4-потенциала  $A_4$ . Для того, чтобы получить в качестве характеристического многообразия уравнений (16) трансформированное уравнение (15), необходимо после всех выкладок произвести замену  $t = x_0 / ic = -ix_0 / c$ .

С помощью указанной подстановки вида  $\varphi(x_1, x_2, x_3, t, S) = \psi(x_1, x_2, x_3, t) \exp\left\{\frac{iS}{\hbar}\right\}$  получим

$$\begin{pmatrix} 0 & p_0 - mc & -p_1 - ip_2 & p_3 \\ -p_0 - mc & 0 & p_3 & p_1 + ip_2 \\ p_1 - ip_2 & -p_3 & 0 & -p_0 + mc \\ -p_3 & -p_1 + ip_2 & p_0 + mc & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_0 \end{pmatrix} = 0, \quad (17)$$

или в традиционной форме

$$\begin{aligned} P_0 - mc \psi_1 - P_1 - iP_2 \psi_0 - P_3 \psi_3 &= 0 \\ P_0 - mc \psi_2 - P_1 + iP_2 \psi_3 + P_3 \psi_0 &= 0 \\ P_0 + mc \psi_3 - P_1 - iP_2 \psi_2 - P_3 \psi_1 &= 0 \\ P_0 + mc \psi_0 - P_1 + iP_2 \psi_1 + P_3 \psi_2 &= 0 \end{aligned}, \quad (18)$$

где  $P_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j}$ ,  $j = 1, 2, 3$ ;  $P_0 = \frac{\hbar}{ic} \frac{\partial}{\partial t}$ .

Система уравнений Дирака (18) является релятивистски-инвариантной со следующими законами преобразования компонент  $\psi_k$ , представленных в Табл. 2.

Нетрудно заметить, что компонент  $\psi_k$ ,  $k = 0, 1, 2, 3$  существенно отличаются от соответствующих формул преобразований для компонент векторных и тензорных объектов.

Таким образом, из требований релятивистской инвариантности и о едином математическом объекте с равноправными компонентами (фундаментальными функциями  $\psi_k$ ) следует, что имеем дело с новым (по сравнению с векторами и тензорами) математическим объектом, который носит название *спинора*, а соответствующее поле (18) называется спинорным.

○ *Общее решение уравнений Дирака для свободных полей.* В теории линейных уравнений в частных производных известен следующий метод. Пусть дана однородная система линейных дифференциальных уравнений (обыкновенных или с частными производными) с постоянными коэффициентами следующего вида:

$$\sum_{j=1}^n e_{ij} u_j = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (19)$$

где  $u_j$  – искомые функции любого числа независимых переменных  $x_1, \dots, x_n$ ;  $e_{ij}$  – операторы дифференцирования по этим переменным любого порядка и структуры. Требуется выразить  $u_j$  через

$\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ , каждая из которых определяется независимо от другой из своего дифференциального уравнения (связь между функциями  $\varphi_i$  сохраняется в граничных условиях).

Таблица 2. Преобразования компонент спинора  $\psi_k$  в уравнении Дирака

| Вид преобразования             | Преобразование операторов $p_j$  | Преобразование операторов $\psi_k$  |
|--------------------------------|--|---|
| Вращение вокруг оси $OZ$       | $p_1 = p'_1 \cos \alpha - p'_2 \sin \alpha$ $p_2 = p'_2 \cos \alpha + p'_1 \sin \alpha$ $p_3 = p'_3; p_0 = p'_0$   | $\psi'_1 = \psi_1 x^{1'}, x^{2'}, x^{3'}, x^{0'} \exp \left\{ -i \frac{\alpha}{2} \right\}$ $\psi'_2 = \psi_2 x^{1'}, x^{2'}, x^{3'}, x^{0'} \exp \left\{ i \frac{\alpha}{2} \right\}$ $\psi'_3 = \psi_3 \left( x^{1'}, x^{2'}, x^{3'}, x^{0'} \right) \exp \left\{ -i \frac{\alpha}{2} \right\}$ $\psi'_0 = \psi_0 \left( x^{1'}, x^{2'}, x^{3'}, x^{0'} \right) \exp \left\{ i \frac{\alpha}{2} \right\}$ |
| Вращение вокруг оси $OY$       | $p_1 = p'_1 \cos \theta + p'_3 \sin \theta$ $p_3 = p'_3 \cos \theta - p'_1 \sin \theta$ $p_2 = p'_2; p_0 = p'_0$   | $\psi'_1 = \psi_1 \cos \frac{\theta}{2} + \psi_2 \sin \frac{\theta}{2}$ $\psi'_2 = \psi_2 \cos \frac{\theta}{2} - \psi_1 \sin \frac{\theta}{2}$ $\psi'_3 = \psi_3 \cos \frac{\theta}{2} + \psi_0 \sin \frac{\theta}{2}$ $\psi'_0 = \psi_0 \cos \frac{\theta}{2} - \psi_3 \sin \frac{\theta}{2}$   |
| Простое преобразование Лоренца | $p_3 = p'_3 \operatorname{ch} \gamma + p'_0 \operatorname{sh} \gamma$ $p_0 = p'_0 \operatorname{ch} \gamma + p'_3 \operatorname{sh} \gamma$ $p_1 = p'_1; p_2 = p'_2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} + \psi_3 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2}$ $\psi'_2 = \psi_2 \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \psi_0 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2}$ $\psi'_3 = \psi_3 \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} + \psi_1 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2}$ $\psi'_0 = \psi_0 \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \psi_2 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2}$     |

Полагая в уравнении Дирака (18) для  $i = 2, 3, \dots, n$

$$u_j^1 = k_j^1 \varphi_j \quad j = 1, 2, \dots, n, \tag{20}$$

неизвестные операторы дифференцирования  $k_j^1$  определяются как решения линейной системы  $n-1$  алгебраических уравнений

$$\sum_{j=1}^n e_{ij} k_j^1 = 0 \quad i = 2, 3, \dots, n. \tag{21}$$

Из этой системы определяем

$$k_j^1 = E_{1j} C_1, \tag{22}$$

где  $E_{ij}$   $i, j = 1, 2, \dots, n$  обозначает алгебраическое дополнение элемента  $e_{ij}$  определителя оператора

$$E = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ e_{n1} & e_{n2} & \dots & e_{nn} \end{pmatrix}. \tag{23}$$

В (22) через  $C_1$  обозначен оператор, который можно считать единичным, что сводится к замене  $C_1\varphi_1$  на  $\varphi_1$ , т.е.

$$u_j^1 = E_{1j}\varphi_1. \tag{24}$$

Складывая все  $u_j^s$   $s = 1, 2, \dots, n$ , получаем

$$u_j = \sum_{s=1}^n E_{sj}\varphi_s = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1j-1} & \varphi_1 & \dots & e_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ e_{n1} & e_{n2} & \dots & e_{nj-1} & \varphi_n & \dots & e_{nn} \end{pmatrix} \tag{25}$$

причем все  $\varphi_s$   $s = 1, 2, \dots, n$  удовлетворяют одному и тому же дифференциальному уравнению

$$E\varphi_s = 0. \tag{26}$$

Применяя этот метод к уравнениям Дирака (18) при  $A_i = 0$ , нетрудно получить, что функции  $\psi_i$   $i = 0, 1, 2, 3$  должны представлять собой некоторые линейные комбинации производных четырех линейно независимых решений следующего линейного волнового уравнения четвертого порядка

$$\left( \square - \frac{m^2}{\hbar^2} \right) \left( \square \varphi - \frac{m^2}{\hbar^2} \varphi \right) = 0, \tag{27}$$

где  $\square$  – оператор Даламбера. Другими словами, функции  $\varphi_j$  должны удовлетворять уравнению, в левой части которого оператор уравнения Фока-Клейна-Гордона применяется дважды. Отсюда также следует, что из четырех линейно независимых решений уравнения Фока-Клейна-Гордона можно образовать четыре линейно независимые комбинации их производных, которые будут решениями уравнений Дирака.

Действительно, согласно соотношениям (18), (23) и (26) нетрудно получить следующие соотношения для компонент фундаментальных функций  $\psi_k$  через решения  $\varphi_j$  уравнений Фока-Клейна-Гордона:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= p_0 - mc \varphi_2 + p_1 + ip_2 \varphi_3 - p_3 \varphi_0, \\ \psi_2 &= -p_0 + mc \varphi_1 - p_3 \varphi_3 - p_1 - ip_2 \varphi_0, \\ \psi_3 &= -p_0 + mc \varphi_0 - p_1 + ip_2 \varphi_1 + p_3 \varphi_2, \\ \psi_0 &= p_0 - mc \varphi_3 + p_3 \varphi_1 + p_1 + ip_2 \varphi_2, \end{aligned} \tag{28}$$

где  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_0$  – линейно независимые решения уравнения (26). В нашем случае, уравнение (26) принимает вид:

$$\square \varphi_j = 0, \tag{29}$$

где оператор уравнений Фока-Клейна-Гордона вида:

$$\square = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + p_0^2 + m^2 c^2; \quad p_j = \hbar \frac{\partial}{\partial x^j} \quad j = 1, 2, 3; \quad p_0 = \frac{\hbar}{ic} \frac{\partial}{\partial t} \tag{30}$$

Выражения (29), (30) дают своеобразное представление компонент  $\varphi_k$  спинора через производные четырех линейно независимых скаляров  $\varphi_j$ , каждый из которых удовлетворяет уравнению Фока-Клейна-Гордона (29).

Рассмотрим другие формы уравнения Дирака.

*Другие формы уравнения Дирака.* По аналогии с уравнениями Дирака (18) можно написать другие релятивистские инвариантные квантовые уравнения спинорного поля, форма которых приведена в табл. 3.

Преобразования компонент спинора  $\psi_k$ , оставляющих релятивистски инвариантными перечисленные квантовые уравнения, приведены в той же табл. 3. Эти формы, как и форма уравнений Дирака, удовлетворяют законам сохранения плотности вероятности, энергии и градиентной инвариантности. Подробно для уравнения Дирака перечисленные свойства исследованы Луи де Бройлем. Общее решение любой из перечисленных форм для свободных полей также может быть представлено в виде, аналогичном (18).

Таблица 3. Преобразования компонент квантовых волновых уравнений

| № | Квантовые уравнения                                    | Преобразование компонент $\psi_k$    |   |   |
|---|--|--------------------------------------|---|---|
|   |  | Поворот вокруг оси OZ                | Поворот вокруг оси OY                                       | Простое преобразование Лоренца  |
| 1 | $p_0 + mc \psi_1 - p_1 + ip_2 \psi_3 + p_3 \psi_0 = 0$ | $\psi'_1 = \psi_1 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \cos \theta / 2 - \psi_2 \sin \theta / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_2 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_2 - p_1 - ip_2 \psi_0 + p_3 \psi_3 = 0$ | $\psi'_2 = \psi_2 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_2 = \psi_2 \cos \theta / 2 + \psi_1 \sin \theta / 2$ | $\psi'_2 = \psi_2 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_3 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 - mc \psi_3 + p_1 - ip_2 \psi_1 + p_3 \psi_2 = 0$ | $\psi'_3 = \psi_3 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_3 = \psi_3 \cos \theta / 2 - \psi_0 \sin \theta / 2$ | $\psi'_3 = \psi_3 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_2 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 - mc \psi_0 - p_1 - ip_2 \psi_2 + p_3 \psi_1 = 0$ | $\psi'_0 = \psi_0 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_0 = \psi_0 \cos \theta / 2 + \psi_3 \sin \theta / 2$ | $\psi'_0 = \psi_0 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_1 \text{sh } \gamma / 2$ |
| 2 | $p_0 - mc \psi_1 - p_1 + ip_2 \psi_2 - p_3 \psi_3 = 0$ | $\psi'_1 = \psi_1 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \cos \theta / 2 - \psi_0 \sin \theta / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_3 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_2 - p_1 - ip_2 \psi_1 - p_3 \psi_0 = 0$ | $\psi'_2 = \psi_2 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_2 = \psi_2 \cos \theta / 2 - \psi_3 \sin \theta / 2$ | $\psi'_2 = \psi_2 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_0 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_3 - p_1 - ip_2 \psi_0 - p_3 \psi_1 = 0$ | $\psi'_3 = \psi_3 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_3 = \psi_3 \cos \theta / 2 + \psi_2 \sin \theta / 2$ | $\psi'_3 = \psi_3 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_1 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 - mc \psi_0 + p_1 - ip_2 \psi_3 - p_3 \psi_2 = 0$ | $\psi'_0 = \psi_0 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_0 = \psi_0 \cos \theta / 2 + \psi_1 \sin \theta / 2$ | $\psi'_0 = \psi_0 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_2 \text{sh } \gamma / 2$ |
| 3 | $p_0 - mc \psi_1 - p_1 - ip_2 \psi_3 - p_3 \psi_2 = 0$ | $\psi'_1 = \psi_1 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \cos \theta / 2 + \psi_0 \sin \theta / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_2 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_2 - p_1 + ip_2 \psi_0 - p_3 \psi_1 = 0$ | $\psi'_2 = \psi_2 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_2 = \psi_2 \cos \theta / 2 + \psi_3 \sin \theta / 2$ | $\psi'_2 = \psi_2 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_1 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 - mc \psi_3 - p_1 - ip_2 \psi_1 + p_3 \psi_0 = 0$ | $\psi'_3 = \psi_3 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_3 = \psi_3 \cos \theta / 2 - \psi_2 \sin \theta / 2$ | $\psi'_3 = \psi_3 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_0 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_0 - p_1 - ip_2 \psi_2 + p_3 \psi_3 = 0$ | $\psi'_0 = \psi_0 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_0 = \psi_0 \cos \theta / 2 - \psi_1 \sin \theta / 2$ | $\psi'_0 = \psi_0 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_3 \text{sh } \gamma / 2$ |
| 4 | $p_0 - mc \psi_1 - p_1 + ip_2 \psi_0 + p_3 \psi_2 = 0$ | $\psi'_1 = \psi_1 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \cos \theta / 2 + \psi_3 \sin \theta / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_2 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_2 + p_1 + ip_2 \psi_3 + p_3 \psi_1 = 0$ | $\psi'_2 = \psi_2 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_2 = \psi_2 \cos \theta / 2 - \psi_0 \sin \theta / 2$ | $\psi'_2 = \psi_2 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_1 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 - mc \psi_3 + p_1 - ip_2 \psi_2 + p_3 \psi_0 = 0$ | $\psi'_3 = \psi_3 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_3 = \psi_3 \cos \theta / 2 - \psi_1 \sin \theta / 2$ | $\psi'_3 = \psi_3 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_0 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_0 - p_1 - ip_2 \psi_1 + p_3 \psi_3 = 0$ | $\psi'_0 = \psi_0 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_0 = \psi_0 \cos \theta / 2 + \psi_2 \sin \theta / 2$ | $\psi'_0 = \psi_0 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_3 \text{sh } \gamma / 2$ |
| 5 | $p_0 - mc \psi_1 + p_1 + ip_2 \psi_2 - p_3 \psi_0 = 0$ | $\psi'_1 = \psi_1 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \cos \theta / 2 - \psi_3 \sin \theta / 2$ | $\psi'_1 = \psi_1 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_0 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_2 + p_1 - ip_2 \psi_1 - p_3 \psi_3 = 0$ | $\psi'_2 = \psi_2 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_2 = \psi_2 \cos \theta / 2 - \psi_0 \sin \theta / 2$ | $\psi'_2 = \psi_2 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_3 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 - mc \psi_3 + p_1 - ip_2 \psi_0 - p_3 \psi_2 = 0$ | $\psi'_3 = \psi_3 \exp i\alpha / 2$  | $\psi'_3 = \psi_3 \cos \theta / 2 + \psi_1 \sin \theta / 2$ | $\psi'_3 = \psi_3 \text{ch } \gamma / 2 + \psi_2 \text{sh } \gamma / 2$ |
|   | $p_0 + mc \psi_0 + p_1 + ip_2 \psi_3 - p_3 \psi_1 = 0$ | $\psi'_0 = \psi_0 \exp -i\alpha / 2$ | $\psi'_0 = \psi_0 \cos \theta / 2 + \psi_2 \sin \theta / 2$ | $\psi'_0 = \psi_0 \text{ch } \gamma / 2 - \psi_1 \text{sh } \gamma / 2$ |

В табл. 4 и 5 приведены зависимости  $\psi_k$  от  $\varphi_j$  для систем в табл. 3.

Следует подчеркнуть, что формы, представленные в табл. 3, отражают требование о равноправности компонент фундаментальных функций  $\psi_k$ .



Таблица 4. Общий вид решений систем квантовых уравнений из табл. 3

| Компоненты | Общий вид решений системы квантовых уравнений для свободных частиц со спином $s = S$ |   |
|------------|--|---|
|            | Система 1 в табл. 1.2  | Система 1 в табл. 1.2   |
| $\psi_1 =$ | $) - p_0 - mc \varphi_2 + p_3 \varphi_3 - p_1 + ip_2 \varphi_0$                      | $) - p_0 + mc \varphi_0 - p_3 \varphi_2 + p_1 + ip_2 \varphi_3$ |
| $\psi_2 =$ | $) p_0 - mc \varphi_1 + p_1 - ip_2 \varphi_3 - p_3 \varphi_0$                        | $) p_0 - mc \varphi_3 - p_1 - ip_2 \varphi_0 + p_3 \varphi_1$   |
| $\psi_3 =$ | $) p_0 + mc \varphi_0 + p_1 - ip_2 \varphi_2 - p_3 \varphi_1$                        | $) - p_0 - mc \varphi_2 - p_1 + ip_2 \varphi_1 - p_3 \varphi_0$ |
| $\psi_0 =$ | $) - p_0 + mc \varphi_3 + p_1 + ip_2 \varphi_1 + p_3 \varphi_2$                      | $) p_0 + mc \varphi_1 + p_1 - ip_2 \varphi_2 + p_3 \varphi_3$   |

Таблица 5. Общий вид решений систем квантовых уравнений из табл. 3

| Компоненты | Общий вид решений системы квантовых уравнений для свободных частиц со спином $s = S$ |   |
|------------|--|---|
|            | Система 3 в табл. 1.2  | Система 4 в табл. 1.2   |
| $\psi_1 =$ | $) - p_0 - mc \varphi_2 + p_3 \varphi_3 - p_1 + ip_2 \varphi_0$                      | $) p_0 + mc \varphi_3 - p_3 \varphi_0 - p_1 + ip_2 \varphi_2$   |
| $\psi_2 =$ | $) p_0 - mc \varphi_3 - p_3 \varphi_0 + p_1 + ip_2 \varphi_1$                        | $) p_0 - mc \varphi_0 - p_3 \varphi_3 + p_1 + ip_2 \varphi_1$   |
| $\psi_3 =$ | $) - p_0 - mc \varphi_2 - p_3 \varphi_1 - p_1 - ip_2 \varphi_0$                      | $) - p_0 + mc \varphi_1 + p_3 \varphi_2 - p_1 - ip_2 \varphi_0$ |
| $\psi_0 =$ | $) p_0 + mc \varphi_1 + p_3 \varphi_2 + p_1 - ip_2 \varphi_3$                        | $) - p_0 - mc \varphi_2 + p_3 \varphi_1 + p_1 - ip_2 \varphi_3$ |

Аналогичный вид имеет решение системы 5 из табл. 3.

В заключении отметим следующее. В уравнениях Дирака выделена преимущественная ось  $oz$ , т.е. квантовая система движется относительно оси  $oz$ . Так Луи де Бройль [14, с. 11] отмечает: «Уравнения Дирака приписывают особенную роль оси  $oz$  и волновые функции, также как и в теории Паули, дадут ответ на вопросы, в которых играет роль ось  $oz$ ». Математически это нашло свое отражение в распределении комбинаций операторов вида  $p_0 \pm mc$ ,  $p_1 \pm p_2$ ,  $p_3$ .

Изложенный выше подход, основанный на требовании о единстве математического объекта, равноправности его компонент и координат пространственно-временного континуума, позволяет непосредственно написать системы квантовых уравнений относительно других направлений пространственно-временного континуума, аналогичные представленным в данном разделе.

– Системы квантовых уравнений Дирака относительно других направлений в пространственно-временном континууме. Так, например, уравнения Дирака для случая, когда система движется в направлении оси  $oy$ , принимают вид:

$$\begin{aligned}
 p_0 - mc \psi_1 - p_1 - ip_3 \psi_0 - p_2 \psi_3 &= 0 \\
 p_0 - mc \psi_2 - p_1 + ip_3 \psi_3 + p_2 \psi_0 &= 0 \\
 p_0 + mc \psi_3 - p_1 - ip_3 \psi_2 - p_2 \psi_1 &= 0 \\
 p_0 + mc \psi_0 - p_1 + ip_3 \psi_1 + p_2 \psi_2 &= 0
 \end{aligned}
 \tag{31}$$

Аналогично для случая, когда система движется в направлении оси  $ox$ , имеем

$$\begin{aligned}
 p_0 - mc \psi_1 - p_2 - ip_3 \psi_0 - p_1 \psi_3 &= 0 \\
 p_0 - mc \psi_2 - p_2 + ip_3 \psi_3 + p_1 \psi_0 &= 0 \\
 p_0 + mc \psi_3 - p_2 - ip_3 \psi_2 - p_1 \psi_1 &= 0 \\
 p_0 + mc \psi_0 - p_2 + ip_3 \psi_1 + p_1 \psi_2 &= 0
 \end{aligned}
 \tag{32}$$

Для полученных систем нетрудно выписать преобразования компонент  $\psi_k$  и общие решения для свободных частиц через оператор Фока-Клейна-Гордона подобно результатам, представленных в табл. 3 и 4. Так, для системы (31) имеем

$$\begin{aligned} \psi_1 = ) & p_0 + mc \varphi_2 + p_1 - ip_3 \varphi_3 - p_2 \varphi_0 \\ \psi_2 = ) & - p_0 + mc \varphi_1 - p_1 + ip_3 \varphi_0 - p_2 \varphi_3 \\ \psi_3 = ) & - p_0 - mc \varphi_0 - p_1 - ip_3 \varphi_1 + p_2 \varphi_2 \\ \psi_0 = ) & p_0 - mc \varphi_3 + p_1 + ip_3 \varphi_2 + p_2 \varphi_1 \end{aligned} \quad (33)$$

Соответственно для системы (32)

$$\begin{aligned} \psi_1 = ) & p_0 + mc \varphi_2 + p_2 - ip_3 \varphi_3 - p_1 \varphi_0 \\ \psi_2 = ) & - p_0 + mc \varphi_1 - p_2 + ip_3 \varphi_0 - p_1 \varphi_3 \\ \psi_3 = ) & - p_0 - mc \varphi_0 - p_2 - ip_3 \varphi_1 + p_1 \varphi_2 \\ \psi_0 = ) & p_0 - mc \varphi_3 + p_2 + ip_3 \varphi_2 + p_1 \varphi_1 \end{aligned} \quad (34)$$

Аналогично табл. 3 можно выписать соответствующие законы преобразования компонент для систем (31) и (32).

Таким образом, приведенные математические объекты полностью обладают свойствами, присущими модели Дирака.

- О ковариантности уравнений Дирака и симметричные типы уравнений для частиц со спином  $s = S$ . Общее требование релятивистской ковариантности уравнений Дирака сам автор провел следующим образом. Рассматривалась исходная система координат  $oxyz$ , которую будем обозначать через  $S$ , и система координат  $o'x'y'z'$  (система  $S'$ ), которая движется равномерно и прямолинейно вдоль оси  $oz'$  относительно системы координат  $S$ .

Дирак совершает переход от системы координат  $S$  к системе координат  $S'$  следующим образом. Вначале совершается поворот системы  $S$  вокруг оси  $oz$  на определенный угол  $\alpha$  (см. табл. 3). Эту промежуточную систему координат будем называть  $S_\alpha$ . Показывается, что при переходе от  $S$  к  $S_\alpha$  уравнения остаются ковариантными, причем функции  $\psi_k$   $k = 1, 2, 3, 0$  преобразуются при этом по особому закону, не имеющему ничего общего с преобразованиями векторных величин. Далее совершается поворот системы  $S$  на угол  $\beta$  вокруг оси  $ox$ . Полученную таким образом вторую промежуточную систему будем обозначать также через  $S_{\alpha\beta}$ . Далее показывается, что уравнения остаются ковариантными при переходе к системе координат  $S_{\alpha\beta}$ . При этом четыре функции  $\psi_k$  подвергаются новому преобразованию, также ничего не имеющего общего с преобразованиями векторных или тензорных величин (см. табл. 4).

И, наконец, совершается преобразование к системе координат  $S'$ , движущейся равномерно и прямолинейно по отношению к системе координат  $S, S_\alpha$  и  $S_{\alpha\beta}$ .

Дирак показывает, что если функции  $\psi_k$  преобразуются по определенному указанному выше закону, то в системе координат  $S'$  уравнения будут сохранять тот же вид, который они имели в системах координат  $S, S_\alpha$  и  $S_{\alpha\beta}$ .

Другими словами, уравнения Дирака являются общековариантными. Дирак, а позже фон Нейман показали также, что каждое из введенных преобразований может рассматриваться как элемент некоторой группы. Таким образом, был открыт новый в смысле Вундгейлера математический объект, изучение которого привело Ван дер Вардена к созданию спинорного исчисления. Впрочем, вне связи с квантовой механикой Э. Картан еще в 1913 г. разработал основы спинорного исчисления.

Обратим теперь внимание на следующее существенное обстоятельство. Переход от системы координат  $S$  к системе координат  $S'$  производится в следующей последовательности:  $S \rightarrow S_\alpha \rightarrow S_{\alpha\beta} \rightarrow S'$ . Изменение указанной последовательности недопустимо ввиду некоммутативности введенных преобразований. Если бы, например, совершить сначала переход к системе координат, движущейся равномерно и прямолинейно вдоль оси  $oz$  системы  $S$  (причем оси этой системы координат остаются все время параллельными осям системы  $S$ ), а затем совершить два указанных выше поворота, то пришли бы к системе координат, не имеющей ничего общего с системой координат  $S'$ .

Таким образом, матрицы операторов преобразований к системам координат  $S, S_{\alpha\beta}$  и  $S'$  оказываются некоммутативными.

Вместе с тем операторы импульсов  $p_1, p_2, p_3, p_0$  входят в уравнение Дирака неравноправно. Так, операторы  $p_1$  и  $p_2$  входят в виде комплекса  $p_1 \pm ip_2$ , в то время как оператор  $p_3$  входит самостоятельно, а оператор  $p_0$  также входит в виде комплекса  $p_0 \pm mc$ . Эта неравноправность операторов как будто бы противоречит равноправности всех направлений в пространстве и противоречит вытекающей из теории относительности симметрии между пространственными координатами и координатой времени.

Тем не менее, остается фактом, что уравнения Дирака остаются инвариантными относительно групп преобразований  $S_\alpha, S_\alpha S_{\alpha\beta}$  и  $S_\alpha S_{\alpha\beta} S'$ . Причем направление оси  $oz'$  в системе координат  $S'$  может иметь любой угол по сравнению с начальной системой координат  $S$ . Поэтому Луи де Бройли совершенно прав, когда сделал в [14, с. 111] утверждение: «Комбинируя три типа преобразований 1, 2 и 3 можно получить преобразование Лоренца наиболее общего типа». Вместе с тем в [14, с. 229] Луи де Бройли отмечает: «Тем не менее совершенно невозможно претендовать на то, чтобы теория Дирака в ее нынешнем состоянии целиком с концепциями относительности. Одной из ведущих идей теории относительности является то, что она всегда заставляет пространственные и временные координаты входить в уравнение симметрично. Но в теории Дирака эта симметрия переменных  $x, y, z, t$  не осуществляется».

Невольно возникает вопрос: не существует ли аналогичная уравнениям Дирака система уравнений, в которую операторы  $p_i$  входили бы равноправно, была бы релятивистки инвариантной и удовлетворяла квантовому постулату?

Если бы эта система уравнений приводила к тем же результатам для спектра атома водорода (тонкая структура), что и уравнение Дирака, а также к другим физическим эффектам (существование позитрона и др.), то такая система уравнений могла бы быть конкурентоспособной по отношению к уравнениям Дирака. Уравнения эти имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 p_0 - ip_3 \psi_1 - p_1 - ip_2 \psi_0 - mc\psi_3 &= 0 \\
 p_0 - ip_3 \psi_2 - p_1 + ip_2 \psi_3 + mc\psi_0 &= 0 \\
 p_0 + ip_3 \psi_3 - p_1 - ip_2 \psi_2 - mc\psi_1 &= 0 \\
 p_0 - ip_3 \psi_0 - p_1 + ip_2 \psi_1 + mc\psi_2 &= 0
 \end{aligned} \tag{35}$$

$$\begin{aligned}
 p_0 - ip_2 \psi_1 - p_1 - ip_3 \psi_0 - mc\psi_3 &= 0 \\
 p_0 - ip_2 \psi_2 - p_1 + ip_3 \psi_3 + mc\psi_0 &= 0 \\
 p_0 + ip_2 \psi_3 - p_1 - ip_3 \psi_2 - mc\psi_1 &= 0 \\
 p_0 + ip_2 \psi_0 - p_1 + ip_3 \psi_1 + mc\psi_2 &= 0
 \end{aligned} \tag{36}$$

где  $p_j = \hbar \frac{\partial}{\partial x^j} - \frac{ie}{c} A_j$ ;  $p_0 = \frac{\hbar}{ic} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{c} A_0$ .

Нетрудно показать, что такие системы релятивистски инвариантны и что они приводят к тем же собственным значениям, что и уравнения Дирака при рассмотрении задачи о спектре атома водорода. Особенности решений уравнений Дирака типа *Zitterbewegung* и связь с задачами квантового поиска рассмотрены в Части 5 данной работы.

Здесь кратко остановимся модели квантового блуждания в форме уравнения Дирака.

*Пример 8: Дискретные квантовые случайные блуждания и уравнение Фока-Клейна-Гордона (ФКГ).* Рассмотрим выражение:

$$\begin{aligned} \psi_L j,t+1 &= \cos \theta \psi_L j+1,t - i \sin \theta \psi_R j-1,t , \\ \psi_R j,t+1 &= \cos \theta \psi_R j-1,t - i \sin \theta \psi_L j+1,t . \end{aligned}$$

Разрешая последнее уравнение относительно  $\psi_L$  получим:

$$\begin{aligned} \psi_L j+1,t &= \frac{i}{\sin \theta} [\psi_R j,t+1 - \cos \theta \psi_R j-1,t ] , \\ \psi_L j,t+1 &= \frac{i}{\sin \theta} [\psi_R j-1,t+2 - \cos \theta \psi_R j-2,t+1 ] . \end{aligned}$$

Подставляя данные соотношения для  $\psi_R j-1,t$  и  $\psi_R j,t+1$  в вышеприведенные выражения, получим:

$$\begin{aligned} \psi_R j,t+1 + \psi_R j,t-1 &= \cos \theta [\psi_R j+1,t + \psi_R j-1,t ] , \\ \psi_L j,t+1 + \psi_L j,t-1 &= \cos \theta [\psi_L j+1,t + \psi_L j-1,t ] . \end{aligned}$$

Вычитая  $2\psi_R j,t + 2\cos \theta \psi_R j,t$  из обеих сторон первого из приведенных выше уравнений, уравнение в конечных разностях, и которому соответствует дифференциальное уравнение следующего вида:  $[\cos \theta \frac{\partial^2}{\partial j^2} - \frac{\partial^2}{\partial t^2}] \psi_R j,t = 2[1 - \cos \theta] \psi_R j,t$  при единичном шаге во времени и пространстве. Аналогичное уравнение может быть выписано для компоненты  $\psi_L j,t$ .

*Примечание.* Оператор  $\nabla_t$ , которому соответствует дифференциальный оператор  $\frac{\partial}{\partial t}$ , в

конечных разностях имеет вид  $\nabla_t = \frac{\psi(j,t+\frac{h}{2}) - \psi(j,t-\frac{h}{2})}{h}$ . При  $h=1$  оператор  $\nabla_t = \psi j,t+0.5 - \psi j,t-0.5$ , что соответствует дифференциальному оператору  $\frac{\partial}{\partial t}$ .

Поэтому оператор  $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$  может рассматриваться как двойное применение оператора в конечных разностях к двум членам, что означает

$$\nabla_t^2 = \frac{1}{h} \times \frac{\psi j,t+1 - \psi j,t - \psi j,t - \psi j,t-1}{h} = \frac{\psi j,t+1 - 2\psi j,t + \psi j,t-1}{h^2} ;$$

при  $h=1$  имеем в пределе оператор  $\partial^2 / \partial t^2$ . Операторы в конечных разностях  $\nabla_j$  и  $\nabla_j^2$  соответствуют дифференциальным операторам  $\partial / \partial j$  и  $\partial^2 / \partial j^2$  определяется также по аналогии для  $j$  при постоянном  $t$ . Следовательно, из уравнений для каждой компоненты дискретного квантового случайного блуждания  $\psi_R j,t$  и  $\psi_L j,t$  следует уравнение ФКГ:

$$\left( \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \phi - \mu^2 \phi = 0 \quad (37)$$

для свободной релятивистской частицы со спином  $s = 0$ .

*Примечание.* Эквиваленты скорости света  $c$  и массы  $m$  для каждой компоненты  $\psi_R^{j,t}$  и  $\psi_L^{j,t}$  в динамике дискретного квантового случайного блуждания определяются в виде

$$c \equiv \sqrt{\cos \theta}, \quad \mu = \frac{mc}{\hbar} \equiv \sqrt{2[\sec \theta - 1]}. \quad \text{При } \hbar = 1 \text{ можно записать } m \equiv \sqrt{\frac{2 \sec \theta - 1}{\cos \theta}}.$$

Отметим, что максимум скорости получается при  $c = 1$ , что соответствует  $\theta = 0$  и  $m = 0$ , и находится в соответствии с релятивистскими требованиями, что масса частиц света равна нулю. Данный факт не противоречит также утверждению, что динамика квантового блуждания соответствует при  $\theta = 0$  состояниям  $|0\rangle$ , которые расходятся друг от друга без интерференции с максимальной вариацией.

*Пример 9: Дискретные квантовые случайные блуждания в форме уравнения Дирака.* В примере 8 было показано, что система связанных уравнений дискретных квантовых случайных блужданий приводит к уравнению ФКГ в форме релятивистской механики. Аналогичное явление имеет место для структур  $(1 + 1)$  – размерности релятивистского уравнения Дирака (18) в виде:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H}_D \right) \psi = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \frac{\partial}{\partial x} - \beta mc^2 \right) \psi = 0, \quad (38)$$

где  $m$  масса покоя частицы,  $c$  – скорость света,  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  – оператор момента,  $x$  и  $t$  – координаты пространства – времени. Матрицы  $\boldsymbol{\alpha}$  и  $\boldsymbol{\beta}$  являются эрмитовыми и удовлетворяют условию:

$$\boldsymbol{\alpha}^2 + \boldsymbol{\beta}^2 = \mathbf{I}, \quad \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}.$$

Рассмотрим для этого нелинейно связанные уравнения в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} \psi_L^{j,t+1} \\ \psi_R^{j,t+1} \end{pmatrix} = \left[ \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L^{j+1,t} \\ \psi_R^{j-1,t} \end{pmatrix} \right] + \left[ \sin \theta \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L^{j+1,t} \\ \psi_R^{j-1,t} \end{pmatrix} \right]. \quad (39)$$

Так как оператор действия подбрасывания квантовой монеты  $\left( B_{0,\theta,-\frac{\pi}{2}} \right)$  и оператор условного сдвига

$S$  частицы коммутируют при совместном применении к компонентам (39), то выражение (39) можно переписать в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} \psi_L^{j,t+1} \\ \psi_R^{j,t+1} \end{pmatrix} = \left( B_{0,\theta,-\frac{\pi}{2}} \right) \begin{pmatrix} \psi_L^{j+1,t} \\ \psi_R^{j-1,t} \end{pmatrix} = \cos \theta \mathbf{I} + \sin \theta \sigma_3 \sigma_2 \begin{pmatrix} \psi_L^{j+1,t} \\ \psi_R^{j-1,t} \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Вычитая  $\begin{pmatrix} \psi_L^{j,t} \\ \psi_R^{j,t} \end{pmatrix} + \cos \theta \mathbf{I} + \sin \theta \sigma_3 \sigma_2 \begin{pmatrix} \psi_L^{j,t} \\ \psi_R^{j,t} \end{pmatrix}$  из левой и правой частей в (40) получим:

$$\begin{pmatrix} \psi_L^{j,t+1} - \psi_L^{j,t} \\ \psi_R^{j,t+1} - \psi_R^{j,t} \end{pmatrix} = \cos \theta \mathbf{I} + \sin \theta \sigma_3 \sigma_2 \begin{pmatrix} \psi_L^{j+1,t} - \psi_L^{j,t} \\ \psi_R^{j-1,t} - \psi_R^{j,t} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \psi_L^{j,t} \\ \psi_R^{j,t} \end{pmatrix} + \cos \theta \mathbf{I} + \sin \theta \sigma_3 \sigma_2 \begin{pmatrix} \psi_L^{j,t} \\ \psi_R^{j,t} \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Разностная форма (41) может быть представлена в дифференциальной форме как:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix} = \left[ \cos \theta \sigma_3 - \sin \theta \sigma_2 \frac{\partial}{\partial j} + \cos \theta I + \sin \theta \sigma_3 \sigma_2 - I \right] \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Умножая левую и правую часть (42) на  $i\hbar$  и преобразуя простыми алгебраическими выкладками, получим [15]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix} = i\hbar \left[ \cos \theta \sigma_3 - \sin \theta \sigma_2 \frac{\partial}{\partial j} + \cos \theta I + \sin \theta \sigma_3 \sigma_2 - I \right] \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix}. \quad (43)$$

При  $\theta = 0$  получим из (43) выражение:

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - i\hbar \sigma_3 \frac{\partial}{\partial j} \right] \psi_{j,t} = 0. \quad (44)$$

Уравнение (44) является полным аналогом  $(1 + 1)$  – размерности уравнения Дирака для безмассовой частицы  $m = 0$  в (18).

Из формы уравнений ФКГ имеем  $c \equiv \sqrt{\cos \theta} mc^2 \equiv \sqrt{2} \sqrt{1 - \cos \theta}$ . Отметим, что при  $\theta = 0$  и  $m = 0$  имеем максимальную скорость распространения волновой функции  $c = 1$ , что находится в согласии с требованиями релятивистской механики: масса частицы света равна нулю, а динамика квантового блуждания частицы с состояниями  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  распространяются независимо друг от друга по оси без интерференции с максимальным значением вариации. Реализация квантовых случайных блужданий возможно на основе применения чип с квантовой фотоники.

На рис. 12 приведена схема силиконового чипа на квантовой фотоники длиной 2.4 см для реализации управляемых квантовых ячеек<sup>13</sup>.

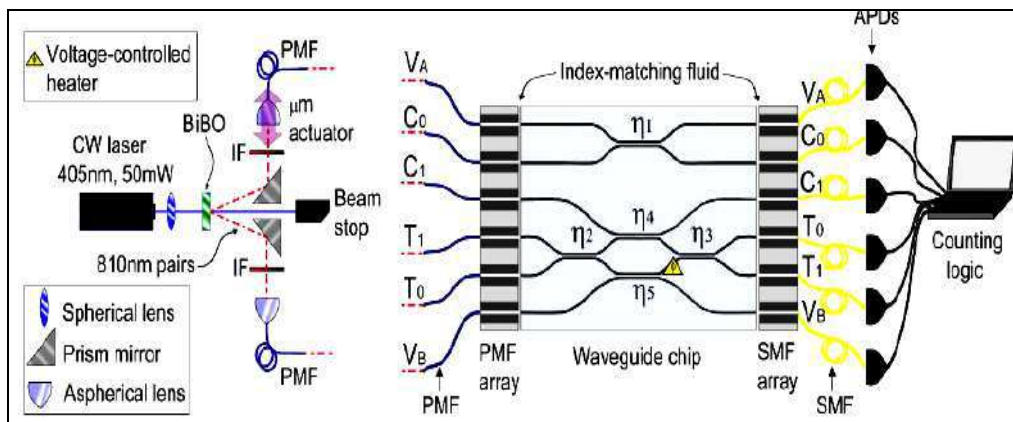


Рис. 12. Конфигурация чипа на квантовой фотонике

Реализация квантовых случайных блужданий для моделирования прототипа решений квантовых уравнений приведена на рис. 13.

<sup>13</sup>Li H.W., Przeslak S., Niskanen A.O. et all. Reconfigurable controlled two-qubit operation on a quantum photonic chip // arXiv:1205.4341v1 [quant-ph] 19 May 2012.

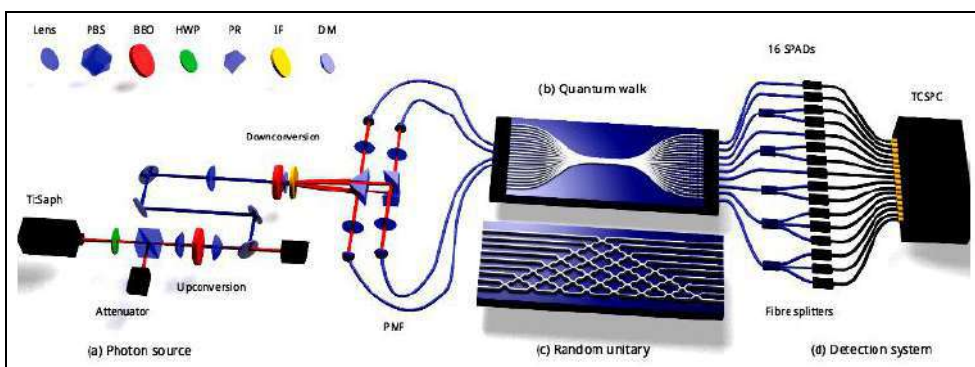


Рис. 13. Схема реализации квантовых случайных блужданий (а) – генератор фотонов; (в,с) – интерференция и (д) – регистрация фотонов

На рис. 14 приведены результаты моделирования и сравнения с операциями случайных унитарных операторов (случайных унитарных матриц Хаара размером  $9 \times 9$ ), показывающие удовлетворительные результаты применения технологии вычислений на основе квантовых случайных блужданий<sup>14</sup>.

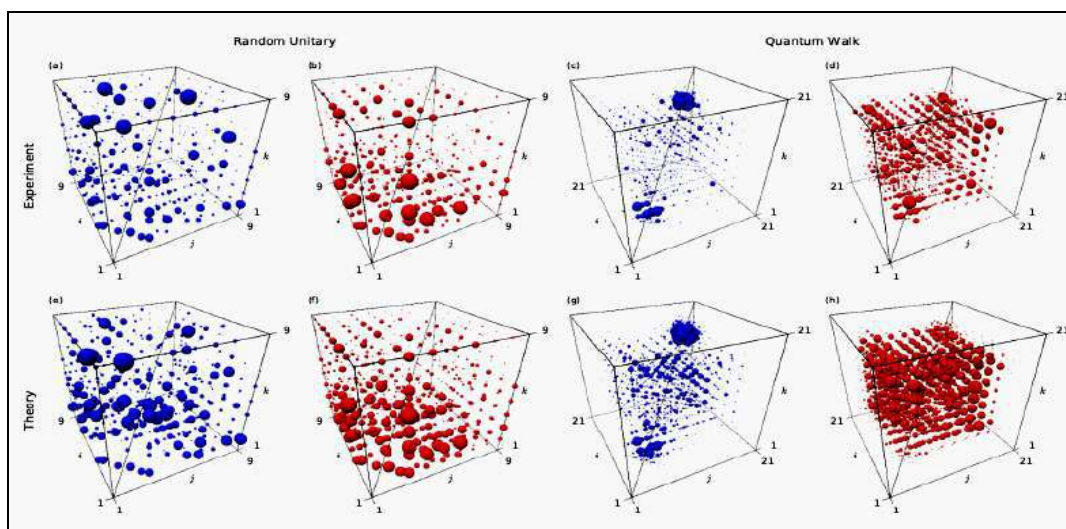


Рис. 14. Результаты моделирования девяти мод случайных унитарных матриц и 21 моды квантовых случайных блужданий

Рассмотрим кратко одно из применений уравнения Дирака в квантовой информатике: квантовый клеточный автомат Дирака. Клеточный автомат является ярким примером исследования интеллектуальных систем и имеет большие приложения как новая парадигма разработки моделей сложных систем в самых различных областях. Идея воспроизведения эволюции макроскопических систем на основе простого правила локального взаимодействия их элементарных составляющих была сформулирована фон Нейманом под названием «клеточный автомат». Рассмотрим более подробно структуру квантового клеточного автомата Дирака и его влияние на исследования основ самой теоретической физики. Приложения квантового клеточного автомата Дирака более подробно освещены в Части 5 данной работы.

*Пример 10: Квантовый клеточный автомат Дирака – Вейля и уравнение Дирака.* В упрощенном виде автомат представляет собой регулярную решетку с ячейками (клетками) с конечным числом состояний. Состояние формируется по простому правилу: клетка из определенного состояния в момент времени  $t$  переходит в другое определенное состояние в момент времени  $t+1$ . Такое

<sup>14</sup>Carolan J., Shadbolt P., Meinecke D.A. et al. On the experimental verification of quantum complexity in linear optics // dearXiv:1311.2913v1 [quant-ph] 12 Nov 2013.

правило должно обладать локальным свойством, т.е. состояние клетки  $x$  в момент времени  $t+1$  зависит только от состояний конечного числа близлежащих клеток в момент времени  $t$ .

Рассмотрим некоторые особенности применения квантовых релятивистских эффектов, которые используются для повышения эффективности применения клеточных автоматов [16 - 18]. В качестве примера обсудим применение уравнения Дирака для построения квантового клеточного автомата с позиции квантовой теории поля и его использование для решения важных задач квантовой информатики, теории интеллектуального управления и основ самой теоретической физики.

– *Модель квантового клеточного автомата на основе уравнения Дирака.* В квантовой теории поля унитарная эволюция поля  $\psi$  с  $N$  числом внутренних степеней свободы описывается следующим образом:

$$\psi(t+1) = U^\dagger \psi(t) U, \quad \psi(x) = \psi_{\hat{\alpha}}(x)_{\hat{\alpha}=1, \dots, N}. \tag{45}$$

Состояние квантового клеточного автомата, которому соответствует одно состояние поля (45), описывается унитарной матрицей  $U$ , которая действует линейно на оператор поля  $\psi$  как:

$$\psi(t+1) = U \psi(t), \quad \psi(x) = \begin{Bmatrix} \dots \\ \psi(x, t) \\ \psi(x+1, t) \\ \dots \end{Bmatrix}, \tag{46}$$

где  $x \in \mathbb{Z}$  и  $t \in \mathbb{Z}$ , которые используются для обозначения нумерации безразмерной клетки (ячейки) решетки и шага времени соответственно.

На рис. 15 показан автомат (46), где световым конусам соответствует локальная структура эволюции автомата, а для каждого состояния  $x \in \mathbb{Z}$  решетки существуют  $N$  систем, соответствующие внутренним компонентам поля.

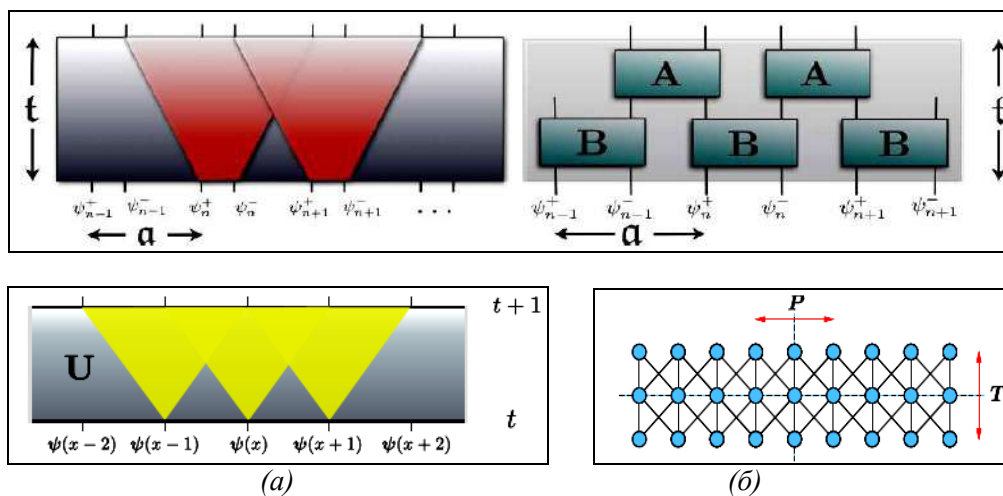


Рис. 15. Геометрическая модель одномерного квантового автомата Дирака с унитарным оператором блуждания (а); топология причинно-следственной сети квантовых блужданий (б)

Каждой клетке  $x$  решетки соответствует эволюция волновой функции  $\psi(x)$  поля. Оператор поля для клетки  $x$  взаимодействует с полем  $\psi(x \pm 1)$  близлежащих клеток. В случае автомата Дирака полевой оператор имеет две компоненты. Например, для одномерной решетки обобщенный инвариант преобразования квантового клеточного автомата с взаимодействием с близлежащими клетками можно представить в следующем виде:

$$U = RS + LS^\dagger + M, \tag{47}$$

где  $S$  означает оператор сдвига  $S\psi(x) = \psi(x+1)$  и  $R, L$  и  $M$  являются матрицы размерности  $N \times N$  и не зависят от размерности решетки, инвариантны при преобразованиях.



Унитарность оператора  $U$  означает выполнение следующих условий:

$$RR^\dagger + LL^\dagger + MM = I, MR^\dagger + LM^\dagger = 0, LR^\dagger = 0. \quad (48)$$

Автомат Дирака как квантовый клеточный автомат минимальной размерности удовлетворяет следующим требованиям: 1) унитарность эволюции; 2) гомогенность топологии взаимодействий; 3) инвариантность к обратимому преобразованию  $t \mapsto -t$ ; 4) инвариантность при четно преобразовании  $x \mapsto -x$ ; 5) минимальная размерность неидентичной эволюции.

Первые два требования уже содержатся в самом определении квантового клеточного автомата.

Требования 3) и 4) отражают симметрию топологии причинно-следственных сетей (см. рис. 15,б) и соответствуют рассмотрению сети как не раскрашенной (без петель). Предположение о взаимодействии с близлежащими клетками не является явным, так как всегда можно свести данное предположение к варианту простой составляющей автомата. Поэтому достаточно предположения о минимальности автомата. В уравнениях поведения автомата предположения 3) и 4) соответствуют следующим условиям:

$$TUT^\dagger = U^\dagger, PUP^\dagger = RS^\dagger + LS + M, \quad (49)$$

где  $T$  – антиунитарный оператор и ассоциирован с обратимым преобразованием времени,  $P$  – унитарный оператор преобразования отображения симметрии на решетке.

Отметим, что член  $PUP^\dagger$  не изменяет свой вид как оператор  $U$  при замене оператора  $S$  на  $S^\dagger$ . При  $N = 1$  только один оператор преобразований квантового клеточного автомата удовлетворяет четной инвариантности – оператор идентичности  $U = I$ . Для случая  $N = 2$  из (49) следует, что операторы  $R$  и  $L$  унитарно эквивалентны, а из (48) следует, оба имеют ранг 1.

Таким образом можно выбрать базис в виде:

$$R = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \psi \ x = \begin{pmatrix} \psi_R \ x \\ \psi_L \ x \end{pmatrix} \quad (50)$$

и имеет две компоненты поля  $\psi_R \ x$  и  $\psi_L \ x$  – составляющая движения «вправо» и «влево» соответственно. Тогда операторы  $P$  и  $T$  принимают следующий вид:

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T = C \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (51)$$

где  $C$  – анти-унитарный оператор комплексной конъюнкции. Данный выбор базиса в (49) дает  $PRP^\dagger = L$  и  $PMP^\dagger = M$  и получим следующие условия:

$$R = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_2 & a_1 \end{pmatrix} \quad M = \begin{pmatrix} a_3 & a_4 \\ a_4 & a_4 \end{pmatrix}, \quad (52)$$

где  $a_i \in \mathbb{C}$  для  $i = 1, \dots, 4$ . Из условия инвариантности и обратимости времени (49) следует, что  $TRT^\dagger = L^\dagger$  и  $TMT^\dagger = M^\dagger$ . Из данных условий следует, что  $|a_1|^2 + |a_4|^2 = 1$   $\text{Re } a_1 \bar{a}_4 = 0$ , что с точностью до фазового множителя приводит к унитарному оператору  $U$  квантового клеточного автомата следующего вида:

$$U = \begin{pmatrix} nS & -im \\ -im & nS^\dagger \end{pmatrix}, \quad n^2 + m^2 = 1. \quad (53)$$

Постоянные  $n$  и  $m$  могут быть положительными величинами. Ограничение унитарности  $n^2 + m^2 = 1$  в (53) приводит к условию на выбор параметра  $m$  в виде  $m \in [0, 1]$ . Сам параметр  $m$  выполняет роль безразмерной массы инерции, а параметр  $n$  является аналогом индекса симметрии вакуума. Для перехода к обычному уравнению Дирака используются параметр длины  $\ell_p$  и времени  $\tau_p$  Планка как параметры преобразования для пространства – времени, в котором роль массы играет масса Планка  $m_p$ . Максимальная скорость света распространения локального состояния в размерном

пространстве – времени равна  $c = \ell_p / \tau_p$ . Величины  $\ell_p$ ,  $\tau_p$  и  $m_p$  являются тремя универсальными фундаментальными параметрами, определяющие размерность L T и M, через которые определяется четвертая фундаментальная постоянная  $\hbar = m_p \ell_p c$ .

Автомат для случая  $m = 0$  соответствует уравнению Вейля и называется автоматом Вейля.

На рис. 16 представлены результаты моделирования эволюции автомата [16] для локального состояния, решение отсутствует в квантовой теории поля, и для гладкого решения, типичного для квантовой теории поля.

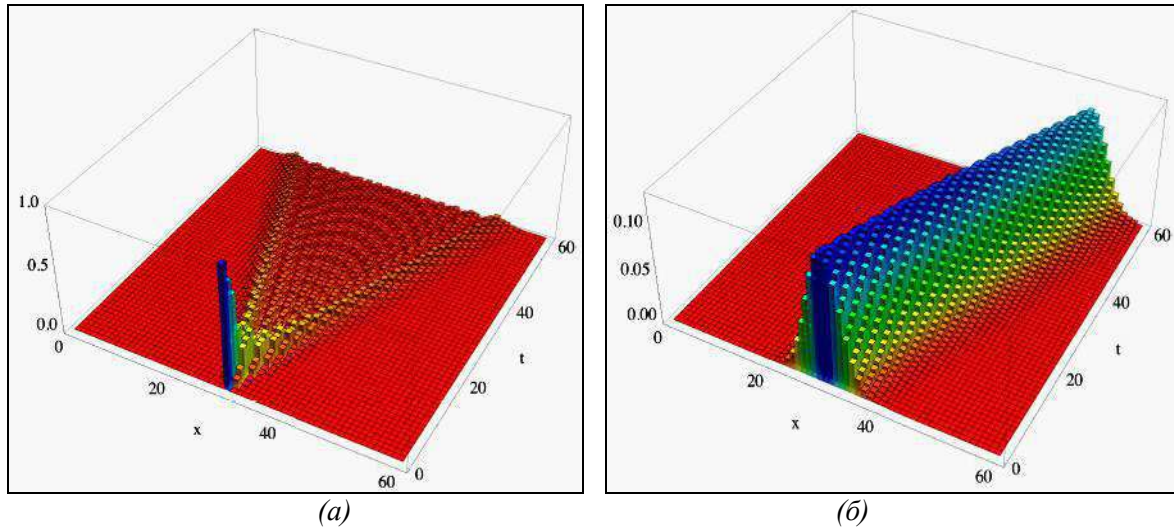


Рис. 16. Результаты моделирования эволюции автомата для локального состояния (а), и для гладкого решения (б)

Отметим частные случаи (46) и (53). Так, например, соответствующая (53) унитарная матрица для одномерного автомата Дирака может быть представлена в виде:

$$U = \begin{pmatrix} nS & im \\ im & nS^\dagger \end{pmatrix}, \quad 0 \leq m \leq 1, \quad n = \sqrt{1 - m^2}, \quad (54)$$

и оператор сдвига  $S\psi_x = \psi_{x+1}$  состояния влево приводит к уравнению Шредингера:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_{x,t} = s \left( iv \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2} D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \tilde{\phi}_{x,t}, \quad \tilde{\phi}_{x,t} = \phi_{x,t} e^{-i[k_0 x - \omega k_0 t]}, \quad (55)$$

где  $\omega k_0$  – дисперсия автомата,  $\phi_{x,t}$  – амплитуда вероятности суперпозиции,  $s = \pm 1$ ,

$$v_{k_0, m} = \sqrt{\frac{n}{1 + m^2 \cot^2 k_0}}, \quad D_{k_0, m} = \frac{nm^2 \cos k_0}{[\sin^2 k_0 + m^2 \cos^2 k_0]^{\frac{3}{2}}}.$$

Для двумерного случая  $d = 2$  унитарная матрица автомата имеет следующий вид:

$$U = \begin{pmatrix} n \begin{pmatrix} S_{xy}^+ & \omega^* S_{xy}^{-\dagger} \\ \omega S_{xy}^- & S_{xy}^{+\dagger} \end{pmatrix} & imI \\ imI & n \begin{pmatrix} S_{xy}^{+\dagger} & -\omega^* S_{xy}^{-\dagger} \\ \omega S_{xy}^- & S_{xy}^+ \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (56)$$

где  $|\omega| = 1$  и  $S_{xy} = S_x \pm S_y^\dagger$  с оператором сдвига  $S_\alpha$  в направлении  $\alpha$  топологической сети с взаимодействующими клетками.

На рис. 17 представлены результаты моделирования двумерного автомата Дирака (57) [17, 18] в различных режимах.

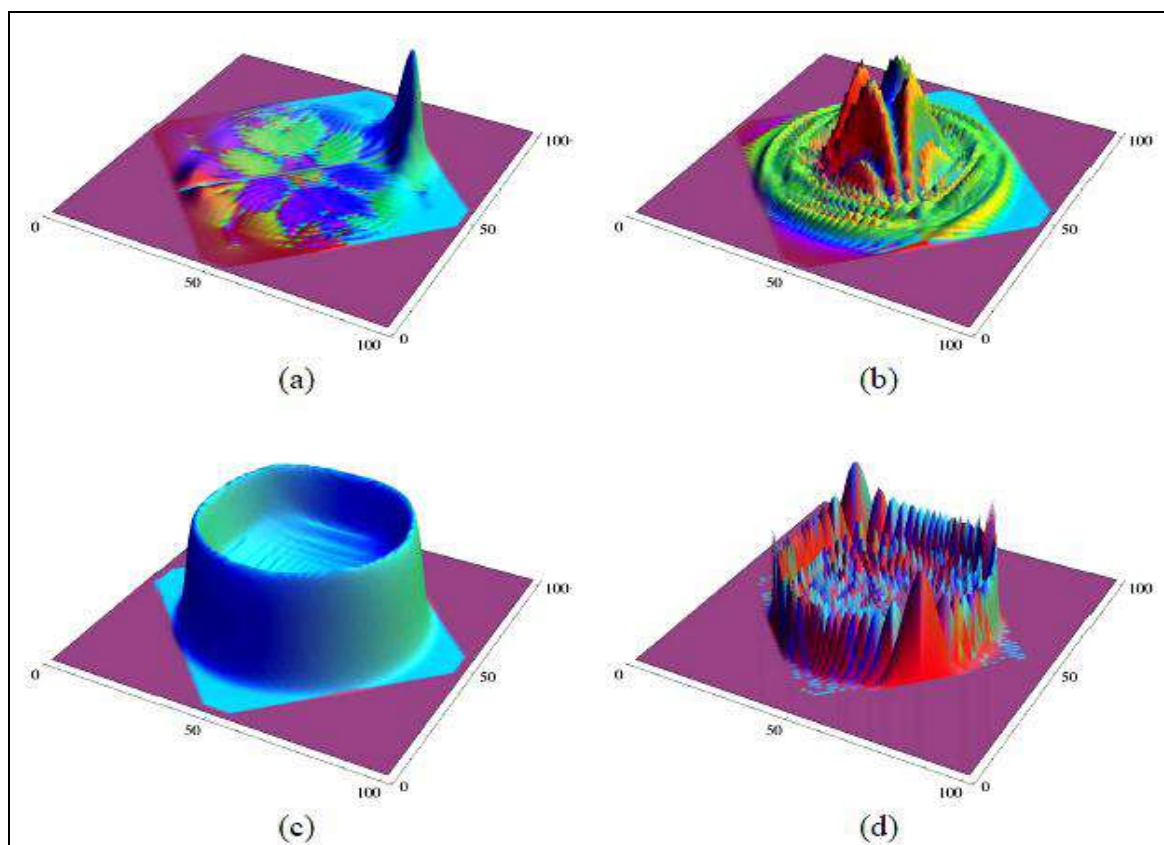


Рис. 17. Поведение двумерного автомата Дирака при различных начальных условиях

Амплитуде представленных на рис. 17 графиков соответствует вероятность найти состояние частицы со спином  $S$  ( $\uparrow$  – направленного вверх) через 45 интервалов времени  $\tau_p$  Планка для различных начальных условий. На рис. 17,a начальное условие – Гауссовский волновой пакет с  $\Delta_x = \Delta_y = 2\ell_p$  (минимальной неопределенности) и соответствует высокому релятивистскому моменту; рис 17,b соответствует ультрарелятивистский момент в ограниченной зоне Бриллюэна; на рис. 17,d начальное состояние локализовано как простая планковская ячейка; рис. 17,c,d. соответствует нулевой момент.

### Список литературы

1. Robinett R.W. Quantum mechanics: classical results, modern systems, and visualized examples. – Oxford University Press. – 2006.
2. Robinett R.W. Quantum wave packet revivals // Physics Reports – 2004. – Vol. 392 – Pp. 1-119.
3. Berry M.V., Balazs N.L. Nonspreading wave packets // Am. J. Phys. – 1979. – Vol. 47. – № 3. – Pp. 264-267.
4. O’Connell A. D., Hofheinz M., Ansmann M., Bialczak R. C., Lenander M., Lucero E., Neeley M., et al. Quantum ground state and single-phonon control of a mechanical resonator // Nature. – 2010. – Vol. 464. – Pp. 697.
5. Teufel J. D., Donner T., Li D., Harlow J.W., Allman M. S., Cicak K., Sirois A. J., Whittaker J. D., Lehnert K.W., Simmonds R.W. Sideband cooling of micromechanical motion to the quantum ground state // Nature. – 2011. – 475. – Pp. 359.
6. Гельфанд И.М., Минлос Р.А., Шапиро З.Я. Представления группы вращений и группы Лоренца, их применения. – М.: Физматгиз, 1958.

7. Новожилов Ю.В. Элементарные частицы. – М.: Наука. – 1972.
8. Малкин И.А., Манько В.И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. – М.: Наука, – 1979.
9. Владимиров С.А. Группы симметрии дифференциальных уравнений и релятивистские поля. – М.: Атомиздат. – 1979.
10. Гриб А.А., Мамаев С.Г., Мостепаненко В.М. Квантовые эффекты в интенсивных внешних полях (методы и результаты не связанные с теорией возмущений). – М.: Атомиздат. – 1980.
11. Invariant wave equations // Lectures Notes in Physics. – N.Y.: Springer Verlag, 1978. – Vol. 73.
12. Гольденблат И.И., Ульянов С.В. Введение в теорию относительности и ее приложения в новой технике. – М.: Физматгиз, 1979.
13. Петров Б.Н., Уланов Г.М., Ульянов С.В. Проблемы управления релятивистскими и квантовыми динамическими системами: Информационные и термодинамические аспекты. – М.: Наука, 1982.
14. Де Бройли Л. Магнитный электрон (теория Дирака). – Харьков: ОНТИ, 1936.
15. Chandrashekar C. M., Banerjee S., Srikanth R. Relations between quantum walks and relativistic quantum mechanics // Physical Review. – 2010. – Vol. A81. – № 6. – Pp. 062340.
16. Bisio A., D'Ariano G.M., Tosini A. Quantum Field as a Quantum Cellular Automaton I: the Dirac free evolution in one dimension // arXiv: 1212.2839v1 [quant-ph] 12 Dec 2012.
17. D'Ariano G.M. The Dirac quantum automation: A preview // arXiv: 1211.2479v1 [quant-ph]. – 11 Nov. 2012.
18. D'Ariano G.M., Perinotti P. Derivation of the Dirac equation from principles of information processing // arXiv:1306.1934v1 [quant-ph]. – 8 Jun. 2013.