arXiv:2304.03355v2 [quant-ph] 3 Dec 2023

某些强简并量子控制系统的高阶陷阱

鲍里斯·O·沃尔科夫*和亚历山大·N·佩琴†

俄罗斯科学院斯捷克洛夫数学研究所量子技术数学方法系，俄罗斯莫斯科市古布金街8号，邮编119991

由于基础研究和量子技术应用的原因，量子系统的控制备受关注 [1]。一个具有 N 个能级的封闭量子系统的受控动力学由薛定谔方程描述。

$$i\dot{U}_t^f = (H_0 + f(t)V)U_t^f$$

初始条件为 $U_{t=0}^f = \mathbb{I}$，单位演化算子为 U_t^f，定义于希尔伯特空间 $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$ 中。其中， $H_0 = H_0^\dagger$ 和 $V = V^\dagger$ 分别为自由哈密顿量和相互作用哈密顿量（ $\mathcal{H}$ 中的厄米算子）， $f \in \mathfrak{H}^0 := L_2$（$[0,T]$；$\mathbb{R}$）为控制函数， $T > 0$ 为某个目标时间。考虑如下形式的梅耶型量子控制目标泛函 $J_O(f) = \mathrm{Tr}(OU_T^f \rho_0 U_T^{f\dagger}) \to \max$，其中 ρ_0 为初始密度矩阵（ $\mathcal{H}$ 中满足 $\rho_0 \geq 0$ 且 $\mathrm{Tr}\rho_0 = 1$ 的厄米算子）， $O = O^\dagger$ 为目标算子（ $\mathcal{H}$ 中的厄米算子）。若存在这样的时间 $T_{\min}$，使得对于所有 $T \geq T_{\min}$ 和 $U \in U(N)$，都存在一个控制 $f \in \mathfrak{H}^0$，使得对于某个 $\alpha \in \mathbb{R}$ 有 $U = U_T^f e^{i\alpha}$，则称量子系统（H_0， V）是完全可控的。

*电子邮件：borisvolkov1986@gmail.com 网址：mathnet.ru/eng/person94935 ORCID 0000-0002-6430-9125

†电子邮件：apechen@gmail.com 网址：mathnet.ru/eng/person17991 ORCID 0000-0001-8290-8300 本研究得到俄罗斯科学基金会资助，项目编号：22-11-00330，https://rscf.ru/en/project/22-11-00330/。

对于量子控制而言，一个重要问题是确定对于一个受控系统，其目标是否具有陷阱行为，或者没有 [2]。目标泛函 J_O的 n阶陷阱，其中 $n \geq 2$，是一个控制 $f_0 \in \mathfrak{H}^0$，满足：(a) f_0 不是 J_O 的全局极值点；以及(b) 目标泛函在点 f_0 处的泰勒展开具有如下形式

$$J_O(f_0+\delta f) = J_O(f_0) + \sum_{j=2}^{n} \frac{1}{j!} J_O^{(j)}(f_0)(\delta f,\ldots,\delta f) + o(\|\delta f\|^n) \text{ as } \|\delta f\| \to 0,$$

其中，非零泛函 $R(\delta f) := \sum_{j=2}^{n} \frac{1}{j!} J_O^{(j)}(f_0)(\delta f,\ldots,\delta f)$ 满足：对于任意 $\delta f \in \mathfrak{H}^0$，存在 $\varepsilon > 0$，使得 $R(t\delta f) \leq 0$ 对所有 $t \in (-\varepsilon, \varepsilon)$都成立。对陷阱的分析十分重要，因为如果陷阱存在，它们将决定寻找全局最优控制的难度，包括在实际应用中的难度。二能级量子系统（$N = 2$）不存在陷阱这一结论已在 [3, 4, 5] 中得到证明。在 [6, 7], 中，针对满足 $N \geq 3$ 的特殊 N–能级简并量子系统，构造了一些三阶陷阱。在 [8] 中，发现了一些具有 $N \geq 4$ 的系统存在陷阱。在本文中，我们证明了特殊高度简并量子系统中任意阶陷阱的存在性。

我们将考虑一个具有哈密顿量（H_0, V）的 N 能级量子系统:

$$H_0 = a|1\rangle\langle 1| + \sum_{k=2}^{N} b|k\rangle\langle k|, \quad V = \sum_{k=1}^{N-1} \overline{v}_k|k\rangle\langle k+1| + v_k|k+1\rangle\langle k|\,.$$

这里， $a \neq b$ 和所有 $v_k \in \mathbb{R}$ 均非零。已知 [9, 8]，对于任意 N，这样的系统都是完全可控的（针对 $N = 4$ 的 $v_k \in \mathbb{C}$ 情形的推广见 [10]）。

定理。设 $N \geq 3$、 $\rho_0 = |N\rangle\langle N|$ 和 $O = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k|k\rangle\langle k|$ 满足 $\lambda_1 > \lambda_N > \lambda_{N-1}$。那么对于任意 $T \geq T_{\min}$，控制 $f_0 \equiv 0$ 是 J_O 的 $2N-3$ 阶陷阱。

为证明这一陈述，注意到，对于这样的 ρ_0 和 O，量子系统的完全可控性意味着控制 $f_0 \equiv 0$ 不是 J_O 在 $T \geq T_{\min}$ [6]上的全局极值点。不失一般性，我们可以假设 $\lambda_N = 0$ [6]。令 $V_t := e^{itH_0} V e^{-itH_0}$为定义为的 n阶形式

$$A_{lk}^n\langle f\rangle := \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \int_0^{t_{n-1}} dt_n f(t_1)\ldots f(t_n)\langle l|V_{t_1}\ldots V_{t_n}|k\rangle.$$

令 $A^0_{lk} = \delta_{lk}$ （克罗内克符号）。通过直接计算，可以得到目标泛函 J_O 在 f_0 处的 n 阶 Fr´echet 微分公式：

$$\frac{1}{n!} J_O^{(n)}(f_0)(f,\dots,f) = \sum_{j=0}^{n} \sum_{l=1}^{N-1} (-1)^{n-j} i^n \lambda_l A^j_{lN} \langle f \rangle \overline{A^{n-j}_{lN} \langle f \rangle} \tag{1}$$

对于 $n = 1$，我们得到 $J'_O(f_0) = 0$。由于 $\langle l|V|N\rangle = 0$对于 $l \neq N-1$， J_O 在 f_0 处的二阶微分具有如下形式

$$\frac{1}{2!} J''_O(f_0)(f,f) = \lambda_{N-1} |A^1_{(N-1)N} \langle f \rangle|^2 = \lambda_{N-1} v^2_{N-1} \left(\int_0^T f(t) dt \right)^2 .$$

引入空间 $\mathfrak{H}^1 = \{f \in \mathfrak{H}^0 \colon \int_0^T f(t)dt = 0\}$。于是，对于 $f \in \mathfrak{H}^0 \setminus \mathfrak{H}^1$， $J''_O(f_0)(f,f) < 0$，对于 $f \in \mathfrak{H}^1$， $J''_O(f_0)(f,f) = 0$。注意，对于量子系统（H_0, V），以下结论成立。如果 $1 < l$ 且 $\eta_T \leq N - n1$，那么$\langle l|V_{t_n} \dots V_{t_1}|N\rangle = \langle l|V^n|N\rangle$，因此，形式 $A^n_{lN}\langle f\rangle = \frac{\langle l|V^n|N\rangle}{n!} \left(\int_0^T f(t)dt \right)$ 在 $\mathfrak{H}^1$ 上为零。此外，如果 $n < N-1$,

那么 $\langle 1|V_{t_n} \dots V_{t_1}|N\rangle = 0$，从而 $A^n_{1N} = 0$。根据公式 (1) 可得，对于 $3 \leq n \leq 2N-3$ 以及 $f \in \mathfrak{H}^1$， $J_O^{(n)}(f_0)(f,\dots,f) = 0$。此外，

$$\frac{1}{(2N-2)!} J_O^{(2N-2)}(f_0)(f,\dots,f) = \lambda_1 |A^{N-1}_{1N} \langle f \rangle|^2 =$$
$$= \lambda_1 \left| \int\limits_{[0,T]^{N-1}} K(t_1,\dots,t_{N-1}) f(t_1) \dots f(t_{N-1}) dt_1 \dots dt_{N-1} \right|^2 \geq 0 \tag{2}$$

对于 $f \in \mathfrak{H}^1$，其中 $K(t_1, t_2, \dots, t_{N-1}) = \frac{1}{(N-1)!} v_1 v_2 \dots v_{N-1} e^{i(a-b)\max(t_1,\dots,t_{N-1})}$。因此，控制 $f_0 \equiv 0$ 是一个 $2N-3$ 阶陷阱。定理得证。

作者感谢 S.A. Kuznetsov 指出了 [9]中的可控性证明。

参考文献

[1]C.P. Koch、U. Boscain、T. Calarco、G. Dirr、S. Filipp、S.J. Glaser、R. Kosloff、S. Montangero、T. Schulte-Herbr¨uggen、D.

Sugny、F.K. Wilhelm，《量子技术中的量子最优控制：欧洲当前研究状况、愿景与目标战略报告》，EPJ Quantum Technology，9，19（2022）。https://doi.org/10.1140/epjqt/s40507-022-00138-x

[2] H.A. Rabitz、M.M. Hsieh、C.M. Rosenthal，《量子最优控制跃迁景观》，《科学》，303，1998–2001（2004）。https://doi.org/10.1126/science.1093649

[3]A. Pechen, N. Il'in，《Landau-Zener系统中的无陷阱操控》，《物理评论A》，86，052117（2012）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.052117

[4] A.N. Pechen, N.B. Il'in，《量子比特可观测量最大化的目标泛函临界点》，《俄罗斯数学调查》，70，782–784（2015）。https://doi.org/10.1070/RM2015v070n04ABEH004962

[5] B.O. Volkov, O.V.Morzhin, A.N. Pechen，《用于超快生成单量子比特相移量子门的量子控制景观》，《物理学杂志A》，54，215303（2021）。https://doi.org/10.1088/1751-8121/abf45d

[6]A.N. Pechen、D.J. Tannor，《量子控制景观中是否存在陷阱？》，Phys. Rev. Lett.，106，120402（2011）。https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.120402

[7] A.N. Pechen、D.J. Tannor，《二阶陷阱附近 Λ 原子的量子控制景观》，Isr. J. Chem.，52，467–472（2012）。https://doi.org/10.1002/ijch.201100165

[8]P. de Fouquieres、S.G. Schirmer，《再探量子控制景观及其对控制优化的意义》，In- fin. Dimens. Anal. Quant. Probab. Rel. Top.，16，1350021（2013）。https://doi.org/10.1142/S0219025713500215

[9]S.G. Schirmer、H.Fu、A.I. Solomon，《量子系统的完全可控性》，《物理评论A》，63，063410（2001）。https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/8/313

[10]S.A. Kuznetsov、A.N. Pechen，论具有"链式"耦合哈密顿量的高度简并四能级量子系统的可控性，《罗巴切夫斯基数学杂志》，43，1683-1692（2022）。https://doi.org/10.1134/S1995080222100225