Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Вэнь-Хуа Ван, Хуай-Синь Цао, Чжэн-Ли Чэнь, Адиабатическое приближение эволюции, порожденной A -равномерно псевдоэрмитовым гамильтонианом, *ТМФ*, 2017, том 192, номер 3, 489–505

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9186>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.234.197.8

26 апреля 2023 г., 15:43:23

© 2017 г. Вэнь-Хуа Ван*, Хуай-Синь Цао[†], Чжэн-Ли Чэнь[†]

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ЭВОЛЮЦИИ, ПОРОЖДЕННОЙ A -РАВНОМЕРНО ПСЕВДОЭРМИТОВЫМ ГАМИЛЬТОНИАНОМ

Обсуждается адиабатическое приближение эволюции квантовой системы, порожденной A -равномерно псевдоэрмитовым гамильтонианом $H(t)$. Он представляет собой зависящий от времени оператор, выражающийся через зависящий от времени эрмитов гамильтониан $G(t)$ с помощью не зависящего от времени обратимого оператора A . С использованием связи между решениями уравнений эволюции для $H(t)$ и $G(t)$ доказано, что $H(t)$ и $H^\dagger(t)$ имеют одни и те же действительные собственные значения, а соответствующие собственные векторы образуют биортогональные базисы Рисса в пространстве состояний. Для адиабатического приближенного решения в случае минимального собственного значения и основного состояния оператора $H(t)$ доказано, что это решение в каждый момент времени совпадает с состоянием системы тогда и только тогда, когда вектор основного состояния не зависит от времени. Также найдены оценки сверху для ошибки адиабатического приближения в терминах нормы разности состояний и в терминах обобщенной степени совпадения. Полученные результаты проиллюстрированы в нескольких примерах.

Ключевые слова: адиабатическая эволюция, адиабатическое приближение, оценка ошибки, однородно псевдоэрмитов гамильтониан.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9186>

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовая адиабатическая теорема является одним из наиболее важных и хорошо изученных результатов квантовой механики [1]. Она утверждает, что если мы имеем медленно меняющийся зависящий от времени гамильтониан и система приготовлена в одном из его мгновенных собственных состояний, то состояние системы

Работа выполнена при финансовой поддержке National Natural Science Foundation of China (гранты № 11601300, 11571213, 11471200, 11401359, 11371012) и Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (грант № GK201703093).

*School of Ethnic Nationalities Education, Shaanxi Normal University, Xi'an, China.

[†]School of Mathematics and Information Science, Shaanxi Normal University, Xi'an, China.
E-mail: caohx@snnu.edu.cn

в произвольный момент времени с точностью до фазового множителя определяется как мгновенное собственное состояние [2]–[13]. Эта теорема имеет широкое применение в различных областях физики, таких как молекулярная физика, ядерная физика, квантовая теория поля, адиабатические квантовые вычисления и т. д.

В традиционной квантовой механике требуется, чтобы гамильтониан был эрмитовым оператором, поскольку эрмитовость гарантирует вещественность спектра и унитарность эволюции. Но в последнее время возрос интерес к неэрмитовой квантовой механике [14]–[21], включая исследование временной эволюции систем с неэрмитовым гамильтонианом [22]–[27]. Поскольку неэрмитовой квантовой системе отвечает неэрмитов гамильтониан, при решении уравнения Шредингера, которое отражает унитарность временной эволюции, возникает ряд проблем, и обычные условия адиабатичности не обязательно выполнены. Поэтому аргументы и наработки, применимые в эрмитовых системах, необходимо пересмотреть и модифицировать [28]–[37].

Вкратце напомним некоторые результаты, полученные при изучении адиабатичности в неэрмитовых системах. В работе [28] была доказана первая адиабатическая теорема для неэрмитовых гамильтонианов, но она была ограничена двухуровневым случаем. Впоследствии в работе [29] было предложено условие адиабатичности, содержащее действительные части энергий, между которыми происходит переход, и экспоненциальный множитель, зависящий от их мнимых частей. При этом использовались теория возмущений и интегрирование по частям. В работе [30] для систем с дискретным или непрерывным спектром, подвергнутых периодическому возбуждению, был применен более изощренный подход к установлению условия адиабатичности. Далее, в работе [31] была представлена адиабатическая теорема для класса неэрмитовых гамильтонианов, полученных комплексным масштабированием эрмитова гамильтониана. Позже была показана возможность адиабатической эволюции, порожденной нильпотентным линейным оператором, для чего был построен набор зависящих от времени проекторов, близких к проекторам на мгновенные собственные состояния нильпотентного оператора в адиабатическом режиме [32].

Вплоть до настоящего времени в большинстве случаев обсуждение адиабатической эволюции неэрмитовых гамильтонианов опиралось на традиционное условие адиабатичности. Тем не менее в последние годы на основании условия адиабатичности было отмечено противоречие при использовании адиабатической теоремы [3]–[6]. Кроме того, полученные адиабатические теоремы для систем с неэрмитовыми гамильтонианами являются скорее качественными, чем количественными описаниями и не содержат оценок ошибки адиабатического приближения.

Таким образом, имеет смысл обсудить количественное описание адиабатической эволюции, описываемой неэрмитовым гамильтонианом. Также интересной задачей является получение оценки ошибки адиабатического приближения.

В настоящей статье мы рассматриваем адиабатическую эволюцию и адиабатическое приближение, которое описывается A -равномерно псевдоэрмитовым гамильтонианом. Работа организована следующим образом. В разделе 2 мы рассматриваем связь между решениями уравнения Шредингера с A -равномерно псевдоэрмитовым гамильтонианом и решениями в случае соответствующего эрмитова гамильтониана. В разделе 3 мы строим адиабатическое приближенное решение и доказываем необходимость и достаточное условие того, что это решение есть состояние системы. Затем мы устанавливаем две верхние границы для ошибки адиабатического приближения: в терминах нормы разности решений и обобщенной степени близости. В разделе 4 приводятся два примера, которые иллюстрируют наши результаты. Некоторые выводы сделаны в разделе 5.

2. ЭВОЛЮЦИЯ, ОПИСЫВАЮЩАЯСЯ ПСЕВДОЭРМИТОВЫМ ГАМИЛЬТОНИАНОМ

Рассмотрим следующую квантовую эволюцию, описываемую уравнением типа Шредингера:

$$i|\dot{\psi}(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \quad (t \in [0, T]), \quad (1)$$

где зависящий от времени неэрмитов гамильтониан $H(t)$ предполагается *псевдоэрмитовым*, т. е. он для всех $t \in [0, T]$ удовлетворяет уравнению

$$W(t)H(t) = H^\dagger(t)W(t) \quad (2)$$

с некоторым положительно определенным обратимым оператором $W(t)$, заданным на конечномерном пространстве K состояний системы. Такой оператор может быть записан как $W(t) = A^\dagger(t)A(t)$, где $A(t)$ – некоторый обратимый оператор на K . Заметим, что для любого унитарного оператора $U(t)$ мы имеем

$$(U(t)A(t))^\dagger(U(t)A(t)) = A^\dagger(t)A(t) = W(t).$$

Отсюда следует, что оператор $A(t)$ неединствен. Нетрудно заметить, что оператор

$$G(t) := A(t)H(t)A^{-1}(t) \quad (3)$$

для всех $t \in [0, T]$ является эрмитовым, и, таким образом, мы получаем квантовую эволюцию, описываемую уравнением Шредингера

$$i|\dot{\varphi}(t)\rangle = G(t)|\varphi(t)\rangle \quad (t \in [0, T]) \quad (4)$$

с зависящим от времени эрмитовым гамильтонианом $G(t)$. Если $\dot{A}(t)|\psi(t)\rangle \equiv 0$ на отрезке $[0, T]$, то $|\psi(t)\rangle$ тогда и только тогда является решением уравнения (1) с начальным состоянием $|\psi\rangle$, когда $|\varphi(t)\rangle = A(t)|\psi(t)\rangle$ есть решение уравнения (4) с начальным состоянием $A(0)|\psi\rangle$.

Руководствуясь рассуждениями, приведенными выше, предположим также, что оператор $A(t)$ не зависит от времени, скажем, $A(t) \equiv A$ при некотором обратимом операторе A , действующем на пространстве K . Будем говорить в этом случае, что оператор $H(t)$ *A-равномерно псевдоэрмитов* на отрезке $[0, T]$ или что он *A-равномерно подобен* оператору $G(t)$ на отрезке $[0, T]$. Уравнения (2), (3) принимают вид

$$A^\dagger A H(t) = H^\dagger(t) A^\dagger A, \quad G(t) = A H(t) A^{-1} \quad (t \in [0, T]). \quad (5)$$

Поэтому $|\psi(t)\rangle$ является решением уравнения (1), если и только если $|\varphi(t)\rangle = A|\psi(t)\rangle$ является решением уравнения (4). Отсюда следует, что функции $|\psi(t)\rangle$ и $|\varphi(t)\rangle$ из уравнений (1) и (4) удовлетворяют следующим соотношениям:

$$|\varphi(t)\rangle = A|\psi(t)\rangle, \quad |\psi(t)\rangle = A^{-1}|\varphi(t)\rangle. \quad (6)$$

Эрмитов оператор $G(t)$ имеет действительные собственные значения $\gamma_n(t)$, а соответствующие им собственные функции $|F_n(t)\rangle$, $n = 1, 2, \dots, d$, где $d = \dim K < \infty$, образуют ортонормированный базис гильбертова пространства K . Следовательно, для всех $t \in [0, T]$

$$G(t)|F_n(t)\rangle = \gamma_n(t)|F_n(t)\rangle, \quad \langle F_m(t)|F_n(t)\rangle = \delta_{m,n}, \quad \sum_n |F_n(t)\rangle \langle F_n(t)| = I. \quad (7)$$

Положим

$$|E_n(t)\rangle = A^{-1}|F_n(t)\rangle, \quad |\hat{E}_n(t)\rangle = A^\dagger|F_n(t)\rangle, \quad (8)$$

тогда

$$H(t)|E_n(t)\rangle = \gamma_n(t)|E_n(t)\rangle, \quad H^\dagger(t)|\hat{E}_n(t)\rangle = \gamma_n(t)|\hat{E}_n(t)\rangle, \quad (9)$$

причем $\{|E_n(t)\rangle\}_{n=1}^d$ и $\{|\hat{E}_n(t)\rangle\}_{n=1}^d$ являются базисами Рисса в пространстве K и удовлетворяют *условию биортогональности*

$$\langle \hat{E}_n(t) | E_m(t) \rangle = \delta_{nm} \quad (10)$$

и *условию полноты*

$$\sum_n |\hat{E}_n(t)\rangle \langle E_n(t)| = \sum_n |E_n(t)\rangle \langle \hat{E}_n(t)| = I. \quad (11)$$

Таким образом, $|E_n(t)\rangle$ и $|\hat{E}_n(t)\rangle$ являются соответственно собственными векторами (не обязательно нормированными на единицу) операторов $H(t)$ и $H^\dagger(t)$ с одним и тем же собственным значением $\gamma_n(t)$. В результате получаем следующее утверждение.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. *Если оператор $H(t)$ является A -равномерно псевдоэрмитовым на отрезке $[0, T]$, то операторы $H(t)$ и $H^\dagger(t)$ имеют одни и те же собственные значения $\gamma_n(t)$, а соответствующие собственные состояния $|E_n(t)\rangle$ и $|\hat{E}_n(t)\rangle$ образуют два биортогональных базиса Рисса в пространстве K и удовлетворяют свойству (11).*

3. ОЦЕНКА ОШИБКИ АДИАБАТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

3.1. Эрмитов гамильтониан. Хорошо известно, что если $H(t)$ – эрмитов оператор для всех $t \in [0, T]$, то традиционное адиабатическое приближение состоит в аппроксимации состояния $|\psi(t)\rangle$ системы (точного решения уравнения Шредингера (1)) собственным состоянием (т.е. основным состоянием $|E_g(t)\rangle$) гамильтониана $H(t)$. Назовем такое приближенное решение *адиабатическим приближенным решением*. Обычно если $\langle \dot{E}(t) | E_g(t) \rangle \equiv 0$ для всех $t \in [0, T]$, то адиабатическое приближенное решение имеет вид

$$|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle = e^{-i \int_0^t \gamma_g(s) ds} |E_g(t)\rangle. \quad (12)$$

Для этого решения в работе [11] были доказаны следующие оценки ошибки адиабатического приближения.

ЛЕММА 1. *Пусть $H(t)$ – эрмитов оператор, собственные состояния $\{|E_n(t)\rangle\}$ которого образуют ортонормированный базис пространства K и удовлетворяют условию $\langle E_g(t) | \dot{E}_g(t) \rangle = 0$ при всех $t \in [0, T]$. Пусть $|\psi(t)\rangle$ – решение уравнения (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$. Тогда для всех $t \in [0, T]$*

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \leq \sqrt{2 \int_0^t \| |\dot{E}_g(s)\rangle \|^2 ds}. \quad (13)$$

Если дополнительно для всех $t \in [0, T]$ справедливо условие Адамара о лакунах спектра,

$$|\gamma_g(t) - \gamma_n(t)| \geq \lambda > 0 \quad \text{для всех } n \neq g,$$

то

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \leq 2\sqrt{\lambda^{-1}T\|\dot{H}\|_T} \quad (t \in [0, T]), \quad (14)$$

где $\|\dot{H}\|_T = \sup_{0 \leq t \leq T} \|\dot{H}(t)\| < \infty$.

Кроме того, для каждого $0 < \delta < 1$ всякий раз, когда $\lambda^{-1}T\|\dot{H}\|_T < \delta^2/4$, для всех $t \in [0, T]$ мы имеем оценку

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| < \delta. \quad (15)$$

СЛЕДСТВИЕ 1. В условиях леммы 1

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{\max_{0 \leq t \leq T} \| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \|}{T} = 0, \quad (16)$$

если выполнено одно из двух предельных соотношений:

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T^2} \int_0^T \| |\dot{E}_g(s)\rangle \| ds = 0 \quad \text{или} \quad \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{\|\dot{H}\|_T}{T\lambda_T} = 0,$$

где

$$\lambda_T = \inf_{\substack{t \in [0, T], \\ n \neq g}} |\gamma_g(t) - \gamma_n(t)| > 0.$$

3.2. А-равномерно псевдоэрмитов гамильтониан. Теперь предположим, что гамильтониан $H(t)$ А-равномерно подобен эрмитову оператору $G(t)$ на $[0, T]$ и имеет собственные значения $\gamma_n(t)$ и соответствующие собственные векторы $|E_n(t)\rangle$, заданные в предложении 1. Мы используем обозначение $\gamma_g(t)$ для минимальной энергии, отвечающей основному состоянию $|E_g(t)\rangle$. Для удобства рассуждений положим $\langle \hat{E}_g(t) | \dot{E}_g(t) \rangle = 0$ для всех $t \in [0, T]$. При этих предположениях определим адиабатическое приближенное решение

$$|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle = e^{-i \int_0^t \gamma_g(s) ds} |E_g(t)\rangle. \quad (17)$$

С учетом соотношений (8) имеем

$$|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle = e^{-i \int_0^t \gamma_g(s) ds} |E_g(t)\rangle = A^{-1} e^{-i \int_0^t \gamma_g(s) ds} |F_g(t)\rangle = A^{-1} |\varphi_g^{\text{adi}}(t)\rangle,$$

где

$$|\varphi_g^{\text{adi}}(t)\rangle = e^{-i \int_0^t \gamma_g(s) ds} |F_g(t)\rangle$$

есть адиабатическое приближенное решение эрмитовой системы (4).

Следующая теорема дает необходимое и достаточное условие того, что $|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ и $|\psi(t)\rangle$ совпадают.

ТЕОРЕМА 1. (Адиабатическая эволюция.) Пусть $|\psi(t)\rangle$ – решение уравнения (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$. Тогда $|\psi(t)\rangle = |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ для всех $t \in [0, T]$, если и только если $|\dot{E}_g(t)\rangle = 0$ для всех $t \in [0, T]$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Предположим, что $|\psi(t)\rangle = |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ для всех $t \in [0, T]$. Подставляя $|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ в уравнение (1), мы получаем, что $|\dot{E}_g(t)\rangle = 0$ для всех $t \in [0, T]$.

Наоборот, если $|\dot{E}_g(t)\rangle = 0$ для всех $t \in [0, T]$, то

$$i \frac{d}{dt} |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle = e^{-i \int_0^t \gamma_g(s) ds} \gamma_g(t) |E_g(t)\rangle = e^{-i \int_0^t \gamma_g(s) ds} H(t) |E_g(t)\rangle = H(t) |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$$

для всех $t \in [0, T]$. Отсюда $|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ является решением уравнения (1) с начальным условием $|\psi_g^{\text{adi}}(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$. Следовательно, $|\psi(t)\rangle \equiv |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ на отрезке $t \in [0, T]$. Доказательство завершено.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Из теоремы 1 мы видим, что адиабатическое приближенное решение $|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ совпадает с точным решением $|\psi(t)\rangle$ уравнения (1), если и только если вектор основного состояния не зависит от времени. Это заключение такое же, как утверждение из работы [10] для эрмитова случая. В общем случае вектор основного состояния зависит от времени и, следовательно, необходимо оценить ошибку решения $|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ как адиабатического приближения точного решения $|\psi(t)\rangle$, т. е. величину

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \|.$$

ТЕОРЕМА 2. (Адиабатическое приближение.) Пусть $|\psi(t)\rangle$ – решение уравнения (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$. Тогда для всех $t \in [0, T]$

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \leq \|A^{-1}\| \sqrt{\|A\|} \sqrt{2 \int_0^t \|\dot{E}_g(s)\| ds}. \quad (18)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Гамильтониан $H(t)$ – это A -равномерно псевдоэрмитов на отрезке $[0, T]$ оператор, отсюда мы получаем, что $G(t) := AH(t)A^{-1}$ является эрмитовым оператором для всех $t \in [0, T]$, и его собственные значения суть $\gamma_n(t)$, а соответствующие собственные векторы $|F_n(t)\rangle = A|E_n(t)\rangle$. Из предложения 1 имеем

$$\begin{aligned} \langle F_n(t) | F_m(t) \rangle &= \langle \hat{E}_n(t) | A^{-1} A | E_m(t) \rangle = \langle \hat{E}_n(t) | E_m(t) \rangle = \delta_{nm}, \\ \langle F_g(t) | \dot{F}_g(t) \rangle &= \langle \hat{E}_g(t) | A^{-1} A | \dot{E}_g(t) \rangle = \langle \hat{E}_g(t) | \dot{E}_g(t) \rangle = 0. \end{aligned}$$

Поскольку функция $|\psi(t)\rangle$ является решением уравнения (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$, функция $|\varphi(t)\rangle = A|\psi(t)\rangle$ есть решение уравнения (4) с начальным условием $|\varphi(0)\rangle = A|E_g(0)\rangle = |F_g(0)\rangle$. Используя лемму 1 для эрмитовой системы (4), мы заключаем, что для всех $t \in [0, T]$

$$\begin{aligned} \|A|\psi(t)\rangle - A|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| &= \|\varphi(t)\rangle - |\varphi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| \leq \\ &\leq \sqrt{2 \int_0^t \|\dot{F}_g(s)\| ds} = \sqrt{2 \int_0^t \|A\dot{E}_g(s)\| ds} \leq \sqrt{\|A\|} \sqrt{2 \int_0^t \|\dot{E}_g(s)\| ds}. \end{aligned}$$

Тогда для всех $t \in [0, T]$

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| = \|A^{-1}A(|\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle)\| \leq \|A^{-1}\| \sqrt{\|A\|} \sqrt{2 \int_0^t \|\dot{E}_g(s)\| ds}.$$

Доказательство завершено.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Если $H^\dagger(t) = H(t)$ для всех $t \in [0, T]$, то, положив $A = I$, мы видим, что теорема 2 согласуется с леммой 1. Можно также добавить, что если выполнено условие Адамара о наличии лакуны в спектре, то мы имеем еще одну верхнюю оценку ошибки приближения.

СЛЕДСТВИЕ 2. Пусть $|\psi(t)\rangle$ – решение уравнения (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$. Предположим, что существует $\lambda > 0$ такое, что для всех $n \neq g$ и для всех $t \in [0, T]$ выполнено следующее условие наличия лакуны:

$$|\gamma_g(t) - \gamma_n(t)| \geq \lambda > 0.$$

Тогда для всех $t \in [0, T]$

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \leq 2\|A^{-1}\|\sqrt{\lambda^{-1}T\|\dot{H}\|_T}, \quad (19)$$

где $\|\dot{H}\|_T = \max_{0 \leq t \leq T} \|\dot{H}(t)\|$. Кроме того, для каждого $0 < \delta < 1$ всякий раз, когда

$$\lambda^{-1}T\|\dot{H}\|_T < \frac{\delta^2}{4\|A^{-1}\|^2},$$

для всех $t \in [0, T]$ мы имеем оценку

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| < \delta. \quad (20)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Поскольку $|\psi(t)\rangle$ – решение уравнения (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$, функция $|\varphi(t)\rangle = A|\psi(t)\rangle$ есть решение уравнения (4) с начальным условием $|\varphi(0)\rangle = A|E_g(0)\rangle = |F_g(0)\rangle$. Используя лемму 1 для эрмитовой системы (4), мы заключаем, что для всех $t \in [0, T]$

$$\|A|\psi(t)\rangle - A|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| = \|\varphi(t)\rangle - |\varphi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| \leq 2\sqrt{\lambda^{-1}T\|\dot{G}\|_T}. \quad (21)$$

Из соотношения $\dot{G}^\dagger(t) = \dot{G}(t) = A\dot{H}(t)A^{-1}$ мы получаем

$$\|\dot{G}(t)\| = \rho(\dot{G}(t)) = \rho(\dot{H}(t)) \leq \|\dot{H}(t)\|,$$

где $\rho(\cdot)$ обозначает спектральный радиус. Отсюда $\|\dot{G}\|_T \leq \|\dot{H}\|_T$. Из оценки (21) вытекает, что для всех $t \in [0, T]$

$$\|A|\psi(t)\rangle - A|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| \leq 2\sqrt{\lambda^{-1}T\|\dot{H}\|_T}.$$

Это показывает, что выполнено неравенство (19). Неравенство (20) следует из (19). Доказательство завершено.

ЗАМЕЧАНИЕ 3. Условие существования лакуны в следствии 2 означает, что имеется ненулевое расстояние между энергией основного состояния $\gamma_g(t)$ и остальными энергиями. Но прочие собственные значения при некоторых t могут пересекаться и иметь неединичную кратность (см. рис. 1).

Рис. 1. Лакуны спектра $d(t) = \inf_{n \neq g} |\gamma_n(t) - \gamma_g(t)|$. Здесь $\min_{t \in [0, T]} d(t) \geq \lambda > 0$.

В традиционной квантовой механике ошибка адиабатического приближения может быть задана с помощью величины степени совпадения (fidelity) [11]. Но когда гамильтониан – это A -равномерно псевдоэрмитов оператор, эволюция может не быть унитарной, а тогда решение уравнения Шредингера не обязательно является квантовым состоянием (т.е. вектором с единичной нормой), даже если в начале мы имеем квантовое состояние. Следовательно, чтобы выразить ошибку адиабатического приближения через степень совпадения, следует вести обобщенную степень совпадения двух ненулевых векторов.

Пусть $|\varphi\rangle$ и $|\phi\rangle$ – два ненулевых вектора гильбертова пространства K . Величины

$$F_\ell(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = \frac{|\langle\varphi|\phi\rangle|}{\|\varphi\|} \quad \text{и} \quad F_r(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = \frac{|\langle\varphi|\phi\rangle|}{\|\phi\|}$$

называются *левой обобщенной степенью совпадения* и *правой обобщенной степенью совпадения* векторов $|\varphi\rangle$ и $|\phi\rangle$, а величина

$$\tilde{F}(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = \max\{F_\ell(|\varphi\rangle, |\phi\rangle), F_r(|\varphi\rangle, |\phi\rangle)\}$$

называется *обобщенной степенью совпадения* векторов $|\varphi\rangle$ и $|\phi\rangle$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2. Пусть $|\varphi\rangle$ и $|\phi\rangle$ – два ненулевых вектора гильбертова пространства K . Тогда имеют место следующие соотношения

$$\begin{aligned} 0 \leq F_\ell(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) \leq \|\phi\|, \quad 0 \leq F_r(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) \leq \|\varphi\|, \\ 0 \leq \tilde{F}(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) \leq \max\{\|\phi\|, \|\varphi\|\}; \end{aligned} \quad (22.1)$$

$$F_\ell(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = 0 \iff F_r(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = 0 \iff \tilde{F}(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = 0 \iff \langle\varphi|\phi\rangle = 0; \quad (22.2)$$

$$F_\ell(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = \|\phi\| \iff F_r(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = \|\varphi\| \iff |\varphi\rangle = \alpha|\phi\rangle; \quad (22.3)$$

$$0 < \tilde{F}(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = F_\ell(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = F_r(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) \iff \|\phi\| = \|\varphi\|; \quad (22.4)$$

$$F_\ell(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = \|\varphi\| \text{ и } F_r(|\varphi\rangle, |\phi\rangle) = \|\phi\| \iff |\varphi\rangle = e^{i\theta}|\phi\rangle; \quad (22.5)$$

здесь $\alpha \in \mathbb{C}$ и $\theta \in \mathbb{R}$ – некоторые числа. В частности, если $\|\lvert\varphi\rangle\| = \|\lvert\phi\rangle\| = 1$, то

$$\tilde{F}(\lvert\varphi\rangle, \lvert\phi\rangle) = F_\ell(\lvert\varphi\rangle, \lvert\phi\rangle) = F_r(\lvert\varphi\rangle, \lvert\phi\rangle) = |\langle\varphi|\phi\rangle| = F(\lvert\varphi\rangle, \lvert\phi\rangle),$$

где $F(\lvert\varphi\rangle, \lvert\phi\rangle)$ – обычная степень совпадения двух квантовых состояний $\lvert\varphi\rangle$ и $\lvert\phi\rangle$.

ТЕОРЕМА 3. (Адиабатическое приближение.) Пусть выполнены условия теоремы 2 и $0 < \delta < 1$. Если для всех $t \in [0, T]$ выполнено условие

$$\|A^{-1}\| \sqrt{\|A\|} \sqrt{2 \int_0^t \|\dot{g}(s)\| ds} < \delta, \quad (23)$$

или если существует постоянная $\lambda > 0$ такая, что $|\gamma_g(t) - \gamma_n(t)| \geq \lambda$ для всех $n \neq g$ и всех $t \in [0, T]$, и, кроме того, справедливо неравенство

$$2\|A^{-1}\| \sqrt{\lambda^{-1} T \|\dot{H}\|_T} < \delta, \quad (24)$$

то

$$|\tilde{F}(\lvert\psi(t)\rangle, \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) - \max\{\|\lvert\psi(t)\rangle\|, \|\lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\|\}| < \delta. \quad (25)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для всех $t \in [0, T]$ мы имеем

$$\begin{aligned} \left| \|\lvert\psi(t)\rangle\| - F_\ell(\lvert\psi(t)\rangle, \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) \right| &= \left| \frac{\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle}{\|\lvert\psi(t)\rangle\|} - \frac{|\langle\psi(t)|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle|}{\|\lvert\psi(t)\rangle\|} \right| \leq \\ &\leq \frac{|\langle\psi(t)|\psi(t) - \psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle|}{\|\lvert\psi(t)\rangle\|} \leq \|\lvert\psi(t)\rangle - \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\|, \\ \left| \|\lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| - F_r(\lvert\psi(t)\rangle, \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) \right| &= \left| \frac{\langle\psi_g^{\text{adi}}(t)|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle}{\|\lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\|} - \frac{|\langle\psi(t)|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle|}{\|\lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\|} \right| \leq \\ &\leq \frac{|\langle\psi_g^{\text{adi}}(t) - \psi(t)|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle|}{\|\lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\|} \leq \|\lvert\psi(t)\rangle - \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\|. \end{aligned}$$

Далее с учетом условия (23) или (24) из теоремы 2 или следствия 2 получаем, что $\|\lvert\psi(t)\rangle - \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| < \delta$, поэтому справедливы оба неравенства

$$\left| \|\lvert\psi(t)\rangle\| - F_\ell(\lvert\psi(t)\rangle, \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) \right| < \delta, \quad \left| \|\lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| - F_r(\lvert\psi(t)\rangle, \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) \right| < \delta,$$

другими словами,

$$\begin{aligned} \|\lvert\psi(t)\rangle\| - \delta &< F_\ell(\lvert\psi(t)\rangle, \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) < \|\lvert\psi(t)\rangle\| + \delta, \\ \|\lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| - \delta &< F_r(\lvert\psi(t)\rangle, \lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) < \|\lvert\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| + \delta. \end{aligned}$$

Отсюда следует оценка (25). Доказательство завершено.

ЗАМЕЧАНИЕ 4. 1. Если выполнено условие (23) или (24), то при малых δ мы получаем из соотношений (22.4) и (22.5), что $|\psi(t)\rangle$ близко к $|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ с точностью до общего фазового множителя, т. е. $|\psi(t)\rangle \approx e^{i\theta(t)}|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ при некотором $\theta(t) \in \mathbb{R}$.

2. Если гамильтониан $H(t)$ эрмитов, то мы имеем унитарную эволюцию, и решение уравнения Шредингера (1) представляет собой квантовое состояние, если таковым является начальное состояние. При этом неравенство (25) сводится к

$$1 - |\langle \psi(t) | E_g(t) \rangle| < \delta,$$

и это согласуется с определением, данным в работе [10]. Кроме того, если ни при каком $t \in [0, T]$ для вектора основного состояния не выполнено условие

$$\langle \hat{E}_g(t) | \dot{E}_g(t) \rangle = 0,$$

то мы можем переопределить адиабатическое приближенное решение как

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\rangle &= e^{-\int_0^t (i\gamma_g(s) + \langle \hat{E}_g(s) | \dot{E}_g(s) \rangle) ds} |E_g(t)\rangle = \\ &= e^{-\int_0^t i\gamma_g(s) ds} |h_g(t)\rangle := |h_g^{\text{adi}}(t)\rangle \quad (t \in [0, T]), \end{aligned}$$

где вектор

$$|h_g(t)\rangle = e^{-\int_0^t \langle \hat{E}_g(s) | \dot{E}_g(s) \rangle ds} |E_g(t)\rangle \quad (t \in [0, T])$$

также является собственным состоянием с собственным значением $\gamma_g(t)$ и удовлетворяет условию $\langle \hat{h}_g(t) | \dot{h}_g(t) \rangle = 0$ для всех $t \in [0, T]$. Заменяя собственное состояние $|E_g(t)\rangle$ на $|h_g(t)\rangle$ и применяя теоремы 2 и 3, мы получаем следующий результат.

СЛЕДСТВИЕ 3. Пусть $|\psi(t)\rangle$ – решение уравнения (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$. Тогда для всех $t \in [0, T]$

$$|\tilde{F}(|\psi(t)\rangle, |\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\rangle) - \max\{\| |\psi(t)\rangle \|, \| |\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \}| < \Delta(t), \quad (26)$$

где

$$\Delta(t) = \|A^{-1}\| \sqrt{\|A\|} \sqrt{2 \int_0^t \| \langle \hat{E}_g(s) | \dot{E}_g(s) \rangle |E_g(s)\rangle - |\dot{E}_g(s)\rangle \| ds}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из теорем 2 и 3 мы получаем, что для всех $t \in [0, T]$

$$\begin{aligned} | \| |\psi(t)\rangle \| - F_\ell(|\psi(t)\rangle, |\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\rangle) | &= | \| |\psi(t)\rangle \| - F_\ell(|\psi(t)\rangle, |h_g^{\text{adi}}(t)\rangle) | \leq \\ &\leq \| |\psi(t)\rangle - |h_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \leq \|A^{-1}\| \sqrt{\|A\|} \sqrt{2 \int_0^t \| |\dot{h}_g(s)\rangle \| ds} = \\ &= \|A^{-1}\| \sqrt{\|A\|} \sqrt{2 \int_0^t \| \langle \hat{E}_g(s) | \dot{E}_g(s) \rangle |E_g(s)\rangle - |\dot{E}_g(s)\rangle \| ds} = \Delta(t). \end{aligned}$$

Аналогично, $|\| |\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\rangle\| - F_r(|\psi(t)\rangle, |\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\rangle)| \leq \Delta(t)$. Следовательно,

$$\begin{aligned} \|\psi(t)\| - \Delta(t) &< F_\ell(|\psi(t)\rangle, |\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\rangle) < \|\psi(t)\| + \Delta(t), \\ \|\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\| - \Delta(t) &< F_r(|\psi(t)\rangle, |\tilde{\psi}_g^{\text{adi}}(t)\rangle) < \|\psi_g^{\text{adi}}(t)\| + \Delta(t). \end{aligned}$$

Отсюда следует неравенство (26).

4. ПРИМЕРЫ

Теорема 1 утверждает, что если вектор основного состояния $|E_g(t)\rangle$ A -равномерно псевдоэрмитова гамильтониана $H(t)$ не зависит от времени, то $|\psi(t)\rangle$ совпадает с $|E_g(t)\rangle$ с точностью до фазового множителя на всем промежутке $[0, T]$. В частности, теорема 1 верна для не зависящего от времени A -равномерно псевдоэрмитова гамильтониана H . При этом существуют A -равномерно псевдоэрмитовы гамильтонианы $H(t)$, для которых $|\psi(t)\rangle = |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$, если $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$. Мы увидим это в следующем примере.

ПРИМЕР 1. Пусть

$$\begin{aligned} H(t) &= \left(1 + \frac{t}{T}\right) \cdot I + \left(1 + \frac{t}{T}\right) \cos \frac{\pi}{4} \cdot \sigma_x + \left(1 + \frac{t}{T}\right) \sin \frac{\pi}{4} \cdot \sigma_z = \\ &= \begin{bmatrix} (1 + \frac{t}{T})^{\frac{1+i}{\sqrt{2}}} & 1 + \frac{t}{T} \\ 1 + \frac{t}{T} & (1 + \frac{t}{T})^{\frac{1-i}{\sqrt{2}}} \end{bmatrix} \quad (t \in [0, T]). \end{aligned}$$

Собственные значения этого гамильтониана суть $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = \sqrt{2}(1 + t/T)$, соответствующий биортогональный базис Рисса образован векторами

$$\begin{aligned} |E_1\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (1-i)\sqrt{\sqrt{2}+1} + (1+i)\sqrt{\sqrt{2}-1} \\ (i-1)\sqrt{\sqrt{2}-1} - (1+i)\sqrt{\sqrt{2}+1} \end{pmatrix}, \\ |E_2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (1+i)\sqrt{\sqrt{2}+1} + (1-i)\sqrt{\sqrt{2}-1} \\ (1+i)\sqrt{\sqrt{2}-1} - (i-1)\sqrt{\sqrt{2}+1} \end{pmatrix}, \\ |\widehat{E}_1\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (1-i)\sqrt{\sqrt{2}-1} + (1+i)\sqrt{\sqrt{2}+1} \\ -(i+1)\sqrt{\sqrt{2}-1} + (i-1)\sqrt{\sqrt{2}+1} \end{pmatrix}, \\ |\widehat{E}_2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (1+i)\sqrt{\sqrt{2}-1} + (1-i)\sqrt{\sqrt{2}+1} \\ (1-i)\sqrt{\sqrt{2}-1} + (i+1)\sqrt{\sqrt{2}+1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

При этом $\lambda = \min_{n \neq g} |\gamma_n(t) - \gamma_g(t)| = \sqrt{2}$. Положим

$$A = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{\sqrt{2}+1} + \sqrt{\sqrt{2}-1} & i(\sqrt{\sqrt{2}-1} - \sqrt{\sqrt{2}+1}) \\ i(\sqrt{\sqrt{2}+1} - \sqrt{\sqrt{2}-1}) & \sqrt{\sqrt{2}+1} + \sqrt{\sqrt{2}-1} \end{bmatrix},$$

тогда

$$A^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{\sqrt{2}+1} + \sqrt{\sqrt{2}-1} & i(\sqrt{\sqrt{2}+1} - \sqrt{\sqrt{2}-1}) \\ i(\sqrt{\sqrt{2}-1} - \sqrt{\sqrt{2}+1}) & \sqrt{\sqrt{2}+1} + \sqrt{\sqrt{2}-1} \end{bmatrix}$$

и

$$G(t) := AH(t)A^{-1} = \frac{\sqrt{2}}{2} \left(1 + \frac{t}{T}\right) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Следовательно, соответствующие собственные состояния оператора $G(t)$ таковы:

$$|F_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |F_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Вычисляя, получаем

$$\|\dot{H}\|_T = \sqrt{2}T^{-1}\sqrt{\sqrt{2}+1}, \quad \|\dot{G}\|_T = \sqrt{2}T^{-1}, \quad \|A\| = \|A^{-1}\| = 2\sqrt{\sqrt{2}+1}.$$

Пусть $|\psi(t)\rangle$ – решение уравнения (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_g(0)\rangle$. Поскольку $|\dot{E}_1\rangle = |\dot{F}_1\rangle = 0$, мы имеем $\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| = 0$ для всех $t \in [0, T]$. Следовательно, для всех $t \in [0, T]$

$$|\psi(t)\rangle \equiv |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle = |E_1\rangle.$$

Приведем пример еще одного гамильтониана $H(t)$, для которого можно вычислить ошибку адиабатического приближения.

ПРИМЕР 2. Пусть

$$H(t) = \omega_0 \begin{bmatrix} -e^{i2\pi t/T^k} & -i\sqrt{2} \sin \frac{\pi t}{T^k} \\ \sqrt{2}e^{i2\pi t/T^k} & e^{i2\pi t/T^k} \end{bmatrix} \quad (t \in [0, T]),$$

где постоянные $\omega_0 > 0$, $k > 1$. При этом собственные значения гамильтониана $H(t)$ суть $\gamma_1 = \omega_0$, $\gamma_2 = -\omega_0$, соответствующий биортогональный базис Рисса образован векторами

$$\begin{aligned} |E_1(t)\rangle &= \begin{pmatrix} -i\sqrt{2} \sin \frac{\pi t}{T^k} \\ e^{i\pi t/T^k} \end{pmatrix}, & |E_2(t)\rangle &= \begin{pmatrix} \sqrt{2} \cos \frac{\pi t}{T^k} \\ -e^{i\pi t/T^k} \end{pmatrix}, \\ |\hat{E}_1(t)\rangle &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\pi t/T^k} \\ \cos \frac{\pi t}{T^k} \end{pmatrix}, & |\hat{E}_2(t)\rangle &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\pi t/T^k} \\ -i \sin \frac{\pi t}{T^k} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Нетрудно показать, что $H(t)$ является A -равномерно подобным эрмитову гамильтониану $G(t)$, где

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix}, \quad G(t) = \omega_0 \begin{bmatrix} 0 & e^{-i2\pi t/T^k} \\ e^{i2\pi t/T^k} & 0 \end{bmatrix}.$$

Путем несложных вычислений мы получаем, что для всех $t \in [0, T]$

$$\langle \hat{E}_i(t) | E_j(t) \rangle = \delta_{ij}, \quad \langle \hat{E}_i(t) | \dot{E}_i(t) \rangle = 0, \quad i, j = 1, 2,$$

и при этом

$$\lambda = 2\omega_0, \quad \|\dot{H}\|_T = 2\omega_0 \frac{\pi}{T^k} \sqrt{3 + 2\sqrt{2}}, \quad \|A\| = \sqrt{1 + \frac{1}{\sqrt{2}}}, \quad \|A^{-1}\| = \sqrt{2 + \sqrt{2}}.$$

Теперь рассмотрим адиабатическую эволюцию, задающуюся уравнением (1) с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |E_1(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Тогда адиабатическое приближенное решение имеет вид

$$|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle = e^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} -i\sqrt{2} \sin \frac{\pi t}{T^k} \\ e^{i\pi t/T^k} \end{pmatrix} \quad (t \in [0, T]).$$

Поскольку

$$\|A^{-1}\| \sqrt{\lambda^{-1} T \|\dot{H}\|_T} = (2 + \sqrt{2})^{1/2} \cdot (3 + 2\sqrt{2})^{1/4} \sqrt{\frac{\pi}{T^{k-1}}} = \sqrt{4 + 3\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{T^{k-1}}},$$

с учетом следствия 2 мы получаем, что для всех $t \in [0, T]$

$$\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \leq 2 \cdot \sqrt{4 + 3\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{T^{k-1}}}.$$

Более того, для $0 < \delta < 1$ мы имеем $\| |\psi(t)\rangle - |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \leq \delta$ для всех $t \in [0, T]$, если

$$2 \cdot \sqrt{4 + 3\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{T^{k-1}}} \leq \delta$$

или, эквивалентно,

$$T \geq \left(\frac{4 \cdot (4 + 3\sqrt{2}) \cdot \pi}{\delta^2} \right)^{1/(k-1)}.$$

Следовательно, для всех $t \in [0, T]$

$$| \| |\psi(t)\rangle \| - F_\ell(|\psi(t)\rangle, |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) | < \delta, \quad | \| |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| - F_r(|\psi(t)\rangle, |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) | < \delta.$$

Таким образом,

$$|\tilde{F}(|\psi(t)\rangle, |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle) - \max\{\| |\psi(t)\rangle \|, \| |\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle \| \}| < \delta.$$

Можно получить точное решение уравнения (1) с гамильтонианом из нашего примера и начальным состоянием $|E_1(0)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{2}(-i \cos Ct \sin Bt + i \frac{B}{C} \cos Bt \sin Ct - \frac{A}{C} \sin Bt \sin Ct) \\ (\cos Ct - i \frac{A+B}{C} \sin Ct) e^{iBt} \end{pmatrix} \quad (t \in [0, T]),$$

где $A = \omega_0$, $B = \pi/T^k$, $C = \sqrt{A^2 + B^2}$.

На рис. 2 представлены графики точного решения $|\psi(t)\rangle$ в сравнении с адиабатическим приближенным решением $|\psi_g^{\text{adi}}(t)\rangle$ для задачи из примера 2. На рис. 3

Рис. 2. Составляющие точного решения $\psi(t) = (\psi_1(t), \psi_2(t))^T$ (сплошные кривые) и составляющие приближенного решения $\psi_g^{\text{adi}}(t) = (\psi_{g1}^{\text{adi}}(t), \psi_{g2}^{\text{adi}}(t))^T$ (крестики); параметры выбраны как $\omega_0 = 0.1$, $k = 2$ и $T = 100$.

приведены графики верхней границы ошибки $\delta(t)$ адиабатического приближения, заданной как

$$a(T) =: 2\|A^{-1}\|\sqrt{\lambda^{-1}T\|\dot{H}\|_T} = 2 \cdot \sqrt{4 + 3\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{Tk-1}},$$

и глобальной ошибки $b(T) =: \max_{t \in [0, T]} \delta(t)$. Здесь ошибка $\delta(t) =: \|\psi(t) - \psi_g^{\text{adi}}(t)\|$ записывается как

$$\begin{aligned} \delta(t) = & \left[(\cos Ct - \cos At)^2 + \left(\sin At - \frac{A+B}{C} \sin Ct \right)^2 + \right. \\ & + 2 \left(\sin Bt \sin At - \frac{A}{C} \sin Bt \sin Ct \right)^2 + \\ & \left. + 2 \left(\sin Bt \cos At - \sin Bt \cos Ct + \frac{B}{C} \cos Bt \sin Ct \right)^2 \right]^{1/2}. \end{aligned}$$

Рис. 3. Верхняя граница $a(T)$ ошибки адиабатического приближения (сплошная кривая) и глобальная ошибка $b(T)$ (штриховая кривая); параметры выбраны как $\omega_0 = 0.1$ и $k = 2$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной статье получено количественное описание адиабатической эволюции и адиабатического приближенного решения уравнения Шредингера для d -мерной квантовой системы. Была использована связь между решениями с A -равномерно псевдоэрмитовым гамильтонианом и соответствующим эрмитовым гамильтонианом. Основные результаты работы сформулированы в виде теорем 1–3. В теореме 1 предложено необходимое и достаточное условие того, что система имеет решение вида $e^{-i \int_0^t \gamma_g(s) ds} |E_g(t)\rangle$. Утверждения теорем 2, 3 устанавливают верхнюю границу ошибки адиабатического приближения в терминах нормы разности решений и в терминах степени совпадения.

Заметим, что в наших рассуждениях мы полагали, что начальное состояние системы приготовлено как основное состояние, но это может быть и произвольное собственное состояние. Соответствующее адиабатическое приближенное решение тогда должно быть модифицировано и записано в терминах того собственного состояния, которое было выбрано при $t = 0$, и соответствующего собственного значения. Кроме того, для полноты нашего теоретического анализа мы рассмотрели только конечномерный случай. Случаи пространства бесконечной размерности и пространства Крейна также представляют интерес, и мы рассмотрим их в последующих работах. К этому можно добавить, что адиабатическая теорема для неэрмитовых квантовых систем важна для построения улучшенных адиабатических алгоритмов квантовой механики.

Список литературы

- [1] Т. Kato, “On the adiabatic theorem of quantum mechanics”, *J. Phys. Soc. Japan*, **5**:6 (1950), 435–439.
- [2] G. A. Hagedorn, A. Joye, “Elementary exponential error estimates for the adiabatic approximation”, *J. Math. Anal. Appl.*, **267**:1 (2002), 235–246.

- [3] K.-P. Marzlin, B. C. Sanders, “Inconsistency in the application of the adiabatic theorem”, *Phys. Rev. Lett.*, **93**:16 (2004), 160408, 4 pp.
- [4] Z. Wu, H. Yang, “Validity of the quantum adiabatic theorem”, *Phys. Rev. A*, **72**:1 (2005), 012114, 5 pp.
- [5] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, C. H. Oh, “Sufficiency criterion for the validity of the adiabatic approximation”, *Phys. Rev. Lett.*, **98**:15 (2007), 150402, 4 pp.
- [6] D. M. Tong, “Quantitative condition is necessary in guaranteeing the validity of the adiabatic approximation”, *Phys. Rev. Lett.*, **104**:12 (2010), 120401, 4 pp.
- [7] J.-D. Wu, M.-S. Zhao, J.-I. Chen, Y.-D. Zhang, *Adiabatic approximation condition*, arXiv: 0706.0264.
- [8] S. Jansena, M.-B. Ruskai, R. Seiler, “Bounds for the adiabatic approximation with applications to quantum computation”, *J. Math. Phys.*, **48**:10 (2007), 102111, 15 pp.
- [9] J. E. Avron, M. Fraas, G. M. Graf, P. Grech, “Adiabatic theorems for generators of contracting evolutions”, *Commun. Math. Phys.*, **314**:1 (2012), 163–191.
- [10] H. X. Cao, Z. H. Guo, Z. L. Chen, W. H. Wang, “Quantitative sufficient conditions for adiabatic approximation”, *Sci. China Phys. Mech. Astron.*, **56**:7 (2013), 1401–1407.
- [11] W. H. Wang, Z. H. Guo, H. X. Cao, “An upper bound for the adiabatic approximation error”, *Sci. China Phys. Mech. Astron.*, **57**:2 (2014), 218–224.
- [12] B. M. Yu, H. X. Cao, Z. H. Guo, G. W. H. Wang, “Computable upper bounds for the adiabatic approximation errors”, *Sci. China Phys. Mech. Astron.*, **57**:11 (2014), 2031–2038.
- [13] W. H. Wang, H. X. Cao, L. Lu, B. M. Yu, “An upper bound for the generalized adiabatic approximation error with a superposition initial state”, *Sci. China Phys. Mech. Astron.*, **58**:3 (2015), 1–7.
- [14] F. H. M. Faisal, J. V. Moloney, “Time-dependent theory of non-Hermitian Schrödinger equation: Application to multiphoton-induced ionisation decay of atoms”, *J. Phys. B*, **14**:19 (1981), 3603–3620.
- [15] X.-C. Gao, J.-B. Xu, T.-Z. Qian, “Invariants and geometric phase for systems with non-Hermitian time-dependent Hamiltonians”, *Phys. Rev. A*, **46**:7 (1992), 3626–3630.
- [16] I. Gilary, A. Fleischer, N. Moiseyev, “Calculations of time-dependent observables in non-Hermitian quantum mechanics: The problem and a possible solution”, *Phys. Rev. A*, **72**:1 (2005), 012117, 8 pp.
- [17] C. M. Bender, S. Boettcher, “Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having $\mathcal{PT}$ symmetry”, *Phys. Rev. Lett.*, **80**:24 (1998), 5243–5246.
- [18] C. M. Bender, “Making sense of non-Hermitian Hamiltonians”, *Rep. Prog. Phys.*, **70**:6 (2007), 947–1018, arXiv: hep-th/0703096.
- [19] D. Ashok, “Pseudo-Hermitian quantum mechanics”, *J. Phys.: Conf. Ser.*, **287**:1 (2011), 012002, 13 pp.
- [20] A. Mostafazadeh, “Pseudo-Hermiticity versus $\mathcal{PT}$ symmetry: the necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian”, *J. Math. Phys.*, **43**:1 (2002), 205–214, arXiv: math-ph/0107001.
- [21] H.-X. Cao, Z.-H. Guo, Z.-L. Chen, “CPT-frames for non-Hermitian Hamiltonians”, *Commun. Theor. Phys.*, **60**:3 (2013), 328–334.
- [22] A. Mostafazadeh, “Time-dependent pseudo-Hermitian Hamiltonians defining a unitary quantum system and uniqueness of the metric operator”, *Phys. Lett. B*, **650**:2–3 (2007), 208–212, arXiv: 0706.1872.
- [23] Z. H. Guo, H. X. Cao, L. Lu, “Adiabatic approximation in $\mathcal{PT}$ -symmetric quantum mechanics”, *Sci. China Phys. Mech. Astron.*, **57**:10 (2014), 1835–1839.
- [24] C. F. de Morisson Faria, A. Fring, “Time evolution of non-Hermitian Hamiltonian systems”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **39**:29 (2006), 9269–9289.
- [25] M. Znojil, “Time-dependent version of crypto-Hermitian quantum theory”, *Phys. Rev. D*, **78**:8 (2008), 085003, 5 pp.

- [26] A. Mostafazadeh, “Time-dependent pseudo-Hermitian Hamiltonians defining a unitary quantum system and uniqueness of the metric operator”, *Phys. Lett. B*, **650**:2–3 (2007), 208–212.
- [27] A. Mostafazadeh, “Pseudo-Hermitian representation of quantum mechanics”, *Internat. J. Geom. Methods Modern Phys.*, **7**:7 (2010), 1191–1306, arXiv:0810.5643.
- [28] G. Nenciu, G. Rasche, “On the adiabatic theorem for nonself-adjoint Hamiltonians”, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **25**:21 (1992), 5741–5751.
- [29] C.-P. Sun, “High-order adiabatic approximation for non-Hermitian quantum system and complexification of Berry’s phase”, *Phys. Scr.*, **48**:4 (1993), 393–398.
- [30] A. Fleischer, N. Moiseyev, “Adiabatic theorem for non-Hermitian time-dependent open systems”, *Phys. Rev. A*, **72**:3 (2005), 032103, 11 pp.
- [31] W.K. Abou Salem, J. Fröhlich, “Adiabatic theorems for quantum resonances”, *Commun. Math. Phys.*, **273**:3 (2007), 651–675.
- [32] A. Joye, “General adiabatic evolution with a gap condition”, *Commun. Math. Phys.*, **275**:1 (2007), 139–162.
- [33] M. V. Berry, R. Uzdin, “Slow non-Hermitian cycling: exact solutions and the Stokes phenomenon”, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **44**:43 (2011), 435303, 26 pp.
- [34] A. Leclerc, D. Viennot, G. Jolicard, “The role of the geometric phases in adiabatic population tracking for non-Hermitian Hamiltonians”, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **45**:41 (2012), 415201, 15 pp.
- [35] A. Leclerc, G. Jolicard, J. P. Killingbeck, “Discussion of the adiabatic hypothesis in control schemes using exceptional points”, *J. Phys. B*, **46**:14 (2013), 145503.
- [36] J. B. Guo, Q. H. Wang, “Time-dependent $\mathcal{PT}$ -symmetric quantum mechanics”, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **46**:48 (2013), 485302, 20 pp.
- [37] S. Ibáñez, J. G. Muga, “Adiabaticity condition for non-Hermitian Hamiltonians”, *Phys. Rev. A*, **89**:3 (2014), 033403, 10 pp.

Поступила в редакцию 4.03.2016,
после доработки 23.11.2016