S©MR ISSN 1813-3304

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

http://semr.math.nsc.ru

Том 6, стр. 199–210 (2009) УДК 519.214

MSC 60F99

КВАНТОВАЯ ТЕОРЕМА ПОЙА

А. Н. БОНДАРЕНКО, В. А. ДЕДОК

Abstract. In this paper we discuss return probability properties of quantum random walk on the line. In the classical case this property is well known as the Polya theorem. We study in detail not only usually discussed "Hadamar walk". In the general case quantum random walk depends on parameter θ ($0 \leq \theta \leq \pi$). It was shown that in the most of cases when $0 < \theta < \pi$ quantum random walk is weak localized and recurrent and the return probability tends to 0 with the speed $1/t$. Other cases are also studied and described.

Keywords: quantum random walk, return probability, Polya theorem.

1. Введение

Классическая модель случайного блуждания на прямой представляет собой хорошо изученный объект: получено достаточно много результатов, описывающих свойства блуждающей частицы. Помимо собственных свойств блуждания интересны приложения модели классического блуждания в других областях.

Основное отличие блуждающей квантовой частицы от классической является дополнительная внутренняя степень свободы: "киральность". Квантовый закон эволюции состояния киральности дает гораздо большую свободу блуждающей частицы.

В данной работе мы рассматриваем блуждание квантовой частицы на прямой. Модель квантового случайного блуждания активно изучается в последнее

Bondarenko, A.N., Dedok, V.A., Quantum Polya theorem.

Работа поддержана РФФИ (грант 08-01-00312-а), грантом Президента РФ поддержки ведущих научных школ НШ-1440.2008.1, Intel Scholarship Grant.

Поступила 16 марта 2009 г., опубликована 10 сентября 2009 г.

десятилетие в связи с возможными применениями результатов в теории квантовых вычислений, ускорении алгоритмов, основанных на случайном блуждании [2]. Более того, указанная модель имеет неожиданные приложения в теории прямых и обратных задач рассеяния [1, 6].

Центральным объектом исследования является свойство возвратности блуждающей квантовой частицы. В классическом случае данное свойство известно как теорема Пойа. Нами получен квантовый аналог этого утверждения. Исследуется не только "классический" случай адамаровского блуждания, рассматривается общий случай блуждания, зависящий от параметра θ $(0 \le \theta \le \pi)$.

Работа состоит из трех основных частей. В первой мы даем определение квантовому случайному блужданию, во второй – описываем основные свойства квантового блуждания и отличия от классического варианта и в третьей – доказываем основную теорему о классификации возвратных и невозвратных состояний блуждающей квантовой частицы на прямой.

2. Классические случайные процессы. Теорема Пойа

В классической теории вероятностей известна задача о случайном блуждании частицы по целым числам на прямой [8]. Перемещение частицы происходит через равные промежутки времени. В следующий момент времени частица из точки k перемещается вправо в точку $k+1$ с вероятностью p и влево в точку $k-1$ с вероятностью $q = 1-p$. Такой системе отвечает цепь Маркова с состояниями - целыми точками на прямой,

$$X_n = X_{n-1} + \xi_n = X_0 + S_n, \quad S_n = \sum_{i=1}^{n} \xi_i,$$

где ξ_i принимает значения 1 и -1 с вероятностями p и q. Обычно рассматривается случай симметричного блуждания, когда $p = q$.

Обобщение симметричных случайных блужданий, очевидно, возможно и на случай пространства $\mathbb{Z}^k$, $k \ge 2$ (см. например [5]). Если частица находится в точке $(m_1, m_2, \ldots, m_k)$ в любую из соседних вершин куба $|x_j - m_j| = 1$, т.е. в точки с координатами $(m_1 \pm 1, m_2 \pm 1, \ldots, m_k \pm 1)$ с вероятностью $\frac{1}{2^k}$.

Свойство возвращения в исходную точку симметрично блуждающей частицы в пространствах разной размерности описывается следующей теоремой [8]:

Теорема 1. (Пойа) *При одномерном и двумерном случайном блуждании частица с вероятностью единица рано или поздно (и поэтому бесконечно много раз) возвратится в свое начальное положение. Однако в случае трех измерений эта вероятность равна всего лишь примерно* 0.35 *[математическое ожидание числа возвращений равно тогда* $0.65 * \sum k(0.35)^k = 0.35/0.65 \approx 0.53$*].*

Поэтому, пословица "все дороги ведут в Рим" верна только для пространства не более чем двух измерений.

3. Квантовые марковские цепи

Следуя одной из первых работ по квантовым случайным блужданиям [4] дадим определение дискретному квантовому случайному блужданию на прямой. Гильбертово пространство состояний частицы H состоит из пространства положений H_P с базисом $\{|m\rangle | m \in Z\}$ и пространства киральности

$$H_C = \{|L\rangle, |R\rangle\}.$$

Оператор перемещения частицы имеет вид

$$S = \sum_m |m-1\rangle\langle m| \otimes |L\rangle\langle L| + \sum_m |m+1\rangle\langle m| \otimes |R\rangle\langle R|.$$

Шаг по времени заключается во вращении вектора киральности частицы, заданного унитарной матрицей U и условного перемещения T. Оператор эволюции, описывающий шаг квантового случайного блуждания выглядит следующим образом:

$$M = T \circ (I \otimes U).$$

Обозначим $|\psi(0)\rangle$ начальное состояние квантовой частицы. Тогда, очевидно состояние квантовой частицы будет определяться последовательным применением оператора эволюции к начальному состоянию

$$|\psi(t)\rangle = M^t |\psi(0)\rangle.$$

Распределение вероятностей нахождения описанной блуждающей квантовой частицы задается следующим образом:

$$P(m,t) = |\langle m, L|\psi(t)\rangle|^2 + |\langle m, R|\psi(t)\rangle|^2$$

Волновую функцию блуждающей частицы можно описать в виде двукомпонентного вектора

$$\psi(m,t) = \begin{pmatrix} \psi_L(m,t) \\ \psi_R(m,t) \end{pmatrix},$$

где компоненты соответствуют амплитуде вероятности нахождения частицы в точке m, в момент времени t, с состоянием киральности $|L\rangle$ и $|R\rangle$. Тогда

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_m (\psi_L(m,t)|m, L\rangle + \psi_R(m,t)|m, R\rangle).$$

Роль симметричного квантового случайного блуждания играет адамаровское блуждание с преобразованием состояния киральности матрицей Адамара:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Волновая функция соответственно изменяется по правилу:

$$\psi(m,t+1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \psi(m-1,t) + \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \psi(m+1,t).$$

Интересно отметить, что разница между классическим и квантовым случайным блужданием проявляется достаточно быстро. Вычисление распределения вероятностей нахождения частицы в узлах после некоторого числа шагов для классического и квантового блуждания представляет собой несложное арифметическое упражнение.

Так, для 6-ти шагов по времени вероятности нахождения классической частицы выглядят следующим образом:

t	-6	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6
0							1						
1						$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$					
2					$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{4}$				
3				$\frac{1}{8}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{1}{8}$			
4			$\frac{1}{16}$		$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{8}$		
5		$\frac{1}{32}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{5}{16}$		$\frac{5}{16}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{32}$	
6	$\frac{1}{64}$		$\frac{3}{32}$		$\frac{15}{64}$		$\frac{5}{16}$		$\frac{15}{64}$		$\frac{3}{32}$		$\frac{1}{64}$

И аналогичная таблица для квантовой частицы с начальным положением $(1,0)^T$:

t	-6	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6
0							1						
1						$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$					
2					$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{4}$				
3				$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$			
4			$\frac{1}{16}$		$\frac{5}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{16}$		
5		$\frac{1}{32}$		$\frac{17}{32}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{32}$	
6	$\frac{1}{64}$		$\frac{13}{32}$		$\frac{13}{64}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{64}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{64}$

Несмотря на то, что квантовое блуждание сохраняет некоторые свойства классического: за четное число шагов вероятность нахождения в узле с нечетным номерам равна нулю, и за нечетное число шагов вероятность нахождения в узле с четными номерами равна нулю, разница в распределении вероятностей обнаруживается уже на 3-м шаге.

4. Параметризация квантового случайного блуждания

В общем случае, унитарное преобразование зависит от четырех параметров. Однако, как было отмечено в [4], достаточно рассмотреть зависимость от одного параметра, характеризующего семейства блужданий.

Таким образом, общее случайное блуждание может быть описано следующим преобразованием:

$$M(\theta) = T \circ (I \otimes U_\theta), \quad \text{где}$$
$$T = T_- \otimes |L\rangle\langle L| + T_+ \otimes |R\rangle\langle R| \quad \text{и}$$
$$U_\theta = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma_y}$$

Оператор $M(\theta)$ описывает эволюцию квантовой частицы: $|\Psi(t+1)\rangle = M(\theta)|\Psi(t)\rangle$, оператор T реализует левый (правый) сдвиг: $T_+|n\rangle = |n+1\rangle$, $T_-|n\rangle = |n-1\rangle$, а унитарное преобразование U_θ осуществляет унитарное преобразование над состоянием киральности.

Адамаровское случайное блуждание соответствует значению параметра $\theta = \frac{\pi}{2}$:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = -i\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = -ie^{i\frac{\pi}{2}\sigma_z}U_{\frac{\pi}{2}}.$$

Где дополнительное вращение может быть нивелировано подходящим переопределением фазы состояния киральности.

В более удобном для использования виде эволюция частицы может быть записана как:

$$(1)\quad \Psi(n,t+1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ sin\frac{\theta}{2} & -cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \Psi(n-1,t) + \begin{pmatrix} cos\frac{\theta}{2} & sin\frac{\theta}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Psi(n+1,t).$$

Унитарность преобразования доказывает следующая теорема:

Теорема 2. *Параметризованное параметром θ ($0 \leq \theta \leq \pi$) случайное блуждание унитарно, а именно*

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\Psi_L^2(n,t+1) + \Psi_R^2(n,t+1)\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\Psi_L^2(n,t) + \Psi_R^2(n,t)\right).$$

Доказательство

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\Psi_L^2(n,t+1) + \Psi_R^2(n,t+1)\right) =$$
$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(cos\frac{\theta}{2}\Psi_L(n+1,t) + sin\frac{\theta}{2}\Psi_R^2(n+1,t)\right)^2 +$$
$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(sin\frac{\theta}{2}\Psi_L(n-1,t) - cos\frac{\theta}{2}\Psi_R^2(n-1,t)\right)^2 =$$
$$cos^2\frac{\theta}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Psi_L^2(n+1,t) + sin^2\frac{\theta}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Psi_R^2(n+1,t) +$$
$$2sin\frac{\theta}{2}cos\frac{\theta}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Psi_L(n+1,t)\Psi_R(n+1,t) +$$
$$sin^2\frac{\theta}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Psi_L^2(n-1,t) + cos^2\frac{\theta}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Psi_R^2(n-1,t) -$$
$$2sin\frac{\theta}{2}cos\frac{\theta}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Psi_L(n-1,t)\Psi_R(n-1,t) =$$
$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\Psi_L^2(n,t) + \Psi_R^2(n,t)\right).$$

□

5. Эволюция квантовой частицы на прямой

Используя выражение для волновой функции (1) несложно вычислить распределение вероятностей нахождения квантовой частицы для различных начальных состояний частицы и различных значениях параметра θ.

Результаты расчетов для вероятности возвращения квантовой частицы даже для не очень большого числа шагов позволяют сделать вывод, что распределения вероятностей нахождения квантовой частицы в заданной точке достаточно сильно зависят как от начального состояния частицы, так и от параметра θ.

6. Вероятность возвращения в исходную точку

Центральным объектом нашего исследования является вероятность возвращения квантовой частицы в исходную точку.

Для параметра θ есть два пограничных значения: $\theta = 0$ и $\theta = \pi$.

Случай $\theta = 0$ соответствует блужданию с "сохранением направления движения", т.е. вероятность нахождения частицы в исходной точке после n - шагов равна нулю.

Лемма 1. *Пусть $\theta = 0$. Тогда $P(0,t) = 0$ для всех $t \geq 1$ и любого начального состояния квантовой частицы $\Psi(0,0)$.*

Доказательство получается очевидным применением формулы (1).
□

Случай $\theta = \pi$ соответствует блужданию "зиг-заг", т.е. ненулевая вероятность нахождения частицы в точке n ($|n| \geq 2$) после любого количества шагов равна нулю.

Лемма 2. *Пусть $\theta = \pi$. Тогда $P(n,t) = 0$ для всех $t \geq 1$, любого n ($|n| \geq 2$) и любого начального состояния квантовой частицы $\Psi(0,0)$.*

Доказательство получается очевидным применением формулы (1).
□

Рассмотрим промежуточные случаи:

Лемма 3. *Пусть $0 < \theta < \pi$. Тогда*

$$P(0,t) = \frac{C}{t} + O\left(\frac{1}{t^2}\right)$$

для любого начального состояния квантовой частицы $\Psi(0,0)$.

Доказательство

Вычислим преобразование Фурье волновой функции $\Psi(n,t+1)$:

$$\widetilde{\Psi}(k,t+1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (M_{-\theta}\Psi(n-1,t) + M_{+\theta}\Psi(n+1,t))e^{ikn} =$$
$$e^{ik}M_{-\theta}\widetilde{\Psi}(k,t) + e^{-ik}M_{+\theta}\widetilde{\Psi}(k,t) = M_\theta\widetilde{\Psi}(k,t),$$

где

$$M_\theta = \left(\begin{array}{cc} e^{-ik}\cos\frac{\theta}{2} & e^{-ik}\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{ik}\sin\frac{\theta}{2} & -e^{ik}\cos\frac{\theta}{2} \end{array} \right).$$

Используя эту формулу $t+1$ раз, получаем

$$\widetilde{\Psi}(k,t+1) = M_\theta^{t+1}\widetilde{\Psi}(k,0) \quad \text{или} \quad \widetilde{\Psi}(k,t) = M_\theta^t\widetilde{\Psi}(k,0).$$

Для вычисления степеней матрицы M_θ^t воспользуемся следующим методом. Обозначим $a = e^{ik}$, тогда собственные значения матрицы M_θ будут выглядеть как:

$$\lambda_{1,2} = -\frac{1}{2a}\left((a^2-1)\cos(\theta/2) \pm \sqrt{(a^4-2a^2+1)\cos(\theta/2)+4a^2}\right)$$

Подставляя выражение для a и упрощая, получим

$$\lambda_{1,2} = -i\sin(k)\cos(\theta/2) \mp \sqrt{1-\sin^2(k)\cos^2(\theta/2)}.$$

Замечая, что $|\lambda_{1,2}|^2 = 1$, заключаем $\lambda_1 = e^{i\psi_1}$, $\lambda_2 = e^{i\psi_2}$ или

$$\lambda_1 = e^{-i\arcsin(\sin(k)\cos(\theta/2))},$$
$$\lambda_2 = e^{-i(\arcsin(\sin(k)\cos(\theta/2))+\pi)} = -e^{i\arcsin(\sin(k)\cos(\theta/2))}.$$

Опять же для краткости обозначим $\omega_k = \arcsin(\sin(k)\cos(\theta/2))$. Тогда собственные векторы запишутся как:

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_1 e^{ik}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - \cot(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\omega_k}e^{ik}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - \cot(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix},$$
$$v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_2 e^{ik}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - \cot(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\omega_k}e^{ik}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - \cot(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}$$

В нормализованном виде это будет выглядеть как:

$$u_1 = N_-(k)\begin{pmatrix} e^{-ik} \\ e^{-i\omega_k}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - e^{-ik}\cot(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix},$$
$$u_2 = N_+(k)\begin{pmatrix} e^{-ik} \\ -e^{i\omega_k}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - e^{-ik}\cot(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix},$$

где

$$N_-(k) = \left(1 + (e^{-i\omega_k}\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}} - e^{-ik}\cot\frac{\theta}{2})(e^{i\omega_k}\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}} - e^{ik}\cot\frac{\theta}{2})\right)^{-1/2},$$
$$N_+(k) = \left(1 + (e^{i\omega_k}\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}} + e^{-ik}\cot\frac{\theta}{2})(e^{-i\omega_k}\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}} + e^{ik}\cot\frac{\theta}{2})\right)^{-1/2}.$$

Используя диагональное представление матрицы M получим, что

$$M_\theta^t = TD^tT^{-1} = T\begin{pmatrix} e^{-i\omega_k t} & 0 \\ 0 & (-1)^t e^{i\omega_k t} \end{pmatrix}T^{-1},$$

где

$$T = \begin{pmatrix} N_- e^{-ik} & N_+ e^{-ik} \\ N_-\left(e^{-i\omega_k}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - e^{-ik}\cot(\frac{\theta}{2})\right) & N_+\left(-e^{i\omega_k}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - e^{-ik}\cot(\frac{\theta}{2})\right) \end{pmatrix},$$
$$T^{-1} = T^{*^T} = \begin{pmatrix} N_- e^{ik} & N_-\left(e^{i\omega_k}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - e^{ik}\cot(\frac{\theta}{2})\right) \\ N_+ e^{ik} & N_+\left(-e^{-i\omega_k}\frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} - e^{ik}\cot(\frac{\theta}{2})\right) \end{pmatrix}.$$

Как отмечалось ранее,

$$\widetilde{\Psi}(k,t) = M_\theta^t\widetilde{\Psi}(k,0),$$

а

$$\Psi(n,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\widetilde{\Psi}(k,t)e^{-ikn}dk.$$

Для удобства, запишем матрицу M_θ^t как

$$M_\theta^t = \begin{pmatrix} a(k) & b(k) \\ c(k) & d(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega_k t} & 0 \\ 0 & (-1)^t e^{i\omega_k t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{a(k)} & \overline{c(k)} \\ \overline{b(k)} & \overline{d(k)} \end{pmatrix}$$

Пусть $\Psi(0,0) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, $\Psi(n \neq 0, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, тогда $\widetilde{\Psi}(k,0) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$.

$$\Psi(n,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} M_\theta^t \widetilde{\Psi}(k,0) e^{-ikn} dk =$$
$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} M_\theta^t \left[\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right] e^{-ikn} dk =$$
$$\frac{\alpha}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} M_\theta^t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikn} dk + \frac{\beta}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} M_\theta^t \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-ikn} dk =$$
$$\alpha\Psi_1(n,t) + \beta\Psi_2(n,t)$$

Вычислим отдельно волновые функции для "базисных" начальных условий $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

$$\widetilde{\Psi}_{1L}(k,t) = a(k)\overline{a(k)} e^{-i\omega_k t} + (-1)^t b(k)\overline{b(k)} e^{i\omega_k t},$$
$$\widetilde{\Psi}_{1R}(k,t) = \overline{a(k)} c(k) e^{-i\omega_k t} + (-1)^t \overline{b(k)} d(k) e^{i\omega_k t}.$$

$$\Psi_{1L}(0,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \left[a(k)\overline{a(k)} e^{-i\omega_k t} + (-1)^t b(k)\overline{b(k)} e^{i\omega_k t}\right] dk =$$
$$\frac{1+(-1)^t}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \left[a(k)\overline{a(k)} + b(-k)\overline{b(-k)}\right] e^{-i\omega_k t} dk =$$
$$\frac{1+(-1)^t}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f_1(k) e^{-i\omega_k t} dk, \tag{2}$$
$$\Psi_{1R}(0,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \left[\overline{a(k)} c(k) e^{-i\omega_k t} + (-1)^t \overline{b(k)} d(k) e^{i\omega_k t}\right] dk =$$
$$\frac{1+(-1)^t}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \left[\overline{a(k)} c(k) + \overline{b(-k)} d(-k)\right] e^{-i\omega_k t} dk =$$
$$\frac{1+(-1)^t}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f_2(k) e^{-i\omega_k t} dk, \tag{3}$$

Вычислим асимптотику (2), (3) методом стационарной фазы, для чего найдем критические точки фазовой функции $S(k) = -\arcsin(\sin(k)\cos(\theta/2))$.

$$S'(k) = -\frac{\cos(k)\cos(\theta/2)}{\sqrt{1-\sin^2(k)\cos^2(\theta/2)}},$$
$$S''(k) = \frac{\sin(k)\cos(\theta/2)\sin^2(\theta/2)}{\left(1-\cos^2(\theta/2)\sin^2(k)\right)^{3/2}}.$$

Так как теперь $\theta \neq 0$ и $\theta \neq \pi$, тем самым, фазовая функция имеет две критических точки $k = \pm\frac{\pi}{2}$, тогда

$$
\begin{aligned}
I_L &= I_L(k_1) + I_L(k_2) + O(t^{-\infty}), \quad t \to \infty, \\
I_R &= I_R(k_1) + I_R(k_2) + O(t^{-\infty}), \quad t \to \infty.
\end{aligned}
$$

Выражения для $I_L(k_1), I_L(k_2), I_R(k_1), I_R(k_2)$ получаются применением принципа локализации [7]. Итак,

$$
\begin{gathered}
k_1 = -\frac{\pi}{2}, \quad k_2 = \frac{\pi}{2}, \\
S(k_1) = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}, \quad S(k_2) = -\frac{\pi}{2} + \frac{\theta}{2}, \\
S''(k_1) = -\cot\frac{\theta}{2}, \quad S''(k_2) = \cot\frac{\theta}{2}, \\
f_1(k_1) = 1, \quad f_2(k_1) = -i, \\
f_1(k_2) = 1, \quad f_2(k_2) = i.
\end{gathered}
$$

Главные члены асимптотики имеют вид:

$$
\begin{gathered}
\Psi_{1L}(t) = \sqrt{\frac{2\pi}{t\cot\frac{\theta}{2}}}\left(1 + O(t^{-1})\right)\exp\left(it\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) - i\frac{\pi}{2}\right) + \\
\sqrt{\frac{2\pi}{t\cot\frac{\theta}{2}}}\left(1 + O(t^{-1})\right)\exp\left(it\left(-\frac{\pi}{2} + \frac{\theta}{2}\right) + i\frac{\pi}{2}\right) + O(t^{-\infty}), \quad t \to \infty \\
\Psi_{1R}(t) = \sqrt{\frac{2\pi}{t\cot\frac{\theta}{2}}}\left(-i + O(t^{-1})\right)\exp\left(it\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) - i\frac{\pi}{2}\right) + \\
\sqrt{\frac{2\pi}{t\cot\frac{\theta}{2}}}\left(i + O(t^{-1})\right)\exp\left(it\left(-\frac{\pi}{2} + \frac{\theta}{2}\right) + i\frac{\pi}{2}\right) + O(t^{-\infty}), \quad t \to \infty.
\end{gathered}
$$

Аналогично вычислим $\Psi_2(n,t)$.

$$
\begin{aligned}
\widetilde{\Psi}_{2L}(k,t) &= a(k)\overline{c(k)}e^{-i\omega_k t} + (-1)^t b(k)\overline{d(k)}e^{i\omega_k t}, \\
\widetilde{\Psi}_{2R}(k,t) &= c(k)\overline{c(k)}e^{-i\omega_k t} + (-1)^t d(k)\overline{d(k)}e^{i\omega_k t}.
\end{aligned}
$$

$$\Psi_{2L}(0,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\left[a(k)\overline{c(k)}e^{-i\omega_k t} + (-1)^t b(k)\overline{d(k)}e^{i\omega_k t}\right]dk =$$
$$\frac{1+(-1)^t}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\left[a(k)\overline{c(k)} + b(-k)\overline{d(-k)}\right]e^{-i\omega_k t}dk =$$
$$\frac{1+(-1)^t}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f_1(k)e^{-i\omega_k t}dk, \tag{4}$$
$$\Psi_{2R}(0,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\left[c(k)\overline{c(k)}e^{-i\omega_k t} + (-1)^t d(k)\overline{d(k)}e^{i\omega_k t}\right]dk =$$
$$\frac{1+(-1)^t}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\left[c(k)\overline{c(k)} + d(-k)\overline{d(-k)}\right]e^{-i\omega_k t}dk =$$
$$\frac{1+(-1)^t}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f_2(k)e^{-i\omega_k t}dk, \tag{5}$$

Аналогично Ψ_1 применим принцип локализации:

$$k_1 = -\frac{\pi}{2}, \quad k_2 = \frac{\pi}{2},$$
$$S(k_1) = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}, \quad S(k_2) = -\frac{\pi}{2} + \frac{\theta}{2},$$
$$S''(k_1) = -\cot\frac{\theta}{2}, \quad S''(k_2) = \cot\frac{\theta}{2},$$
$$f_1(k_1) = i, \quad f_2(k_1) = 1,$$
$$f_1(k_2) = -i, \quad f_2(k_2) = 1.$$

И главные члены асимптотики имеют вид:

$$\Psi_{2L}(t) = \sqrt{\frac{2\pi}{t\cot\frac{\theta}{2}}}\left(i + O(t^{-1})\right)\exp\left(it\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) - i\frac{\pi}{2}\right) +$$
$$\sqrt{\frac{2\pi}{t\cot\frac{\theta}{2}}}\left(-i + O(t^{-1})\right)\exp\left(it\left(-\frac{\pi}{2} + \frac{\theta}{2}\right) + i\frac{\pi}{2}\right) + O(t^{-\infty}), \quad t \to \infty$$
$$\Psi_{2R}(t) = \sqrt{\frac{2\pi}{t\cot\frac{\theta}{2}}}\left(1 + O(t^{-1})\right)\exp\left(it\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) - i\frac{\pi}{2}\right) +$$
$$\sqrt{\frac{2\pi}{t\cot\frac{\theta}{2}}}\left(1 + O(t^{-1})\right)\exp\left(it\left(-\frac{\pi}{2} + \frac{\theta}{2}\right) + i\frac{\pi}{2}\right) + O(t^{-\infty}), \quad t \to \infty.$$

Вспоминая разложение волновой функции через "базисные" и используя асимптотики для "базисных" волновых функций, получим асимптотику для вероятности возвращения квантовой частицы в зависимости от начальных условий:

$$P_\theta(0,t) = |\alpha\Psi_{L1}(0,t) + \beta\Psi_{L2}(0,t)|^2 + |\alpha\Psi_{R1}(0,t) + \beta\Psi_{R2}(0,t)|^2 =$$
$$\frac{C_1(\theta)}{t}\left|2\cos\left(\frac{t\pi}{2} - \frac{t\theta}{2} - \frac{\pi}{2}\right)(\alpha + i\beta)\right|^2 + \frac{C_1(\theta)}{t}\left|2\sin\left(\frac{t\pi}{2} - \frac{t\theta}{2} - \frac{\pi}{2}\right)(\alpha + i\beta)\right|^2$$
$$+O(t^{-2}) = \frac{C(\theta)}{t} + O(t^{-2}).$$

Отметим, что константа C зависит только от параметра θ и не зависит от времени t. Что и доказывает лемму.

□

Определение. Квантовое случайное блуждание назовем *возвратным*, если $\sum_{n=0}^{\infty} p_r(n) = \infty$. Здесь $p_r(n)$ – вероятность возвращения квантовой частицы в начальную точку за n шагов.

Отметим, что данное определение совпадает с определением *слабо локализованой* частицы, данное в [3]. Нам удобно будет пользоваться обоими терминами, одно из которых несет математический смысл, а другое – физический.

В итоге, из лемм 1, 2 и 3 следует теорема, описывающая возвратность квантовой частицы:

Теорема 3. (Одномерная квантовая теорема Пойа)

Пусть $\theta = 0$, тогда квантовое блуждание на прямой с любым начальным состоянием не возвратно.

Пусть $0 < \theta < \pi$, тогда квантовое блуждание на прямой с любым начальным состоянием возвратно (слабо локализовано). При этом главный член асимптотики не зависит от начального состояния.

Пусть $\theta = \pi$, тогда квантовое блуждание на прямой с любым начальным состоянием возвратно (слабо локализовано). При этом при $|n| >= 2$ $P_\theta(n,t) = 0$.

Таким образом нами получена классификация возвратных и невозвратных состояний квантовой частицы. Основная теорема позволяет описать свойство возвратности в терминах параметра случайного блуждания, и тем самым является квантовым аналогом результата Пойа о возвратности классической частицы.

Список литературы

[1] A. N. Bondarenko, V. A. Dedok. *Anderson Localization in 1-D Quantum Random Walk*. Proceedings. The 9th Russian-Korean International Symposium on Science and Technology. **1** (2005), 27–32.

[2] A. M. Childs, R. Cleve, … *Exponential algorithmic speedup by quantum walk*. arXiv:quant-ph/0209131.

[3] K. Ishii. *Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System*. Prog. Theor. Phys. Suppl. No.53 (1973), 77–138.

[4] A. Nayak, A. Vishwanath. *Quantum Walk on the Line (Extended Abstract)*. arXiv:quant-ph/0010117.

[5] А. А. Боровков. *Курс теории вероятностей*. М.: Наука, 1972.

[6] В. Г. Романов *Обратные задачи математической физики*. Монография. М.: Наука, 1984.

[7] М. В. Федорюк. *Асимптотика: интегралы и ряды*. М.: Наука, 1987.

[8] В. Феллер. *Введение в теорию вероятностей*. М.: МИР, т.1.

Анатолий Николаевич Бондаренко, Василий Александрович Дедок
Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН,
пр. академика Коптюга 4,
630090, Новосибирск, Россия
E-mail address: bond@math.nsc.ru, vasily.a.dedok@gmail.com