

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Кулагин Алексей Владимирович

**Темные состояния и квантовые эффекты
в контексте исследования конечномерных моделей**

Специальность 1.2.2 —
«Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2025

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Развитие математических и программных методов компьютерного и суперкомпьютерного моделирования квантовой динамики поля и атомов является ключевым этапом в развитии технологий квантовых устройств, в частности, в построении **квантового компьютера** [1]. В особенности, это важно для отечественных исследований в данной области, где первые принципы квантовой теории для сложных систем лучше всего проверять в **оптических полостях** — весьма дорогостоящем оборудовании. Открытые публикации, как правило, ограничиваются общим описанием эксперимента: технические нюансы его проведения и прибористика остаются намеренно нераскрытыми, что затрудняет воспроизводимость полученных результатов и ограничивает возможность их использования другими исследователями. Поэтому особую значимость на сегодняшний день приобретает разработка математических и программных методов компьютерного и суперкомпьютерного моделирования многочастичных квантовых процессов. Это позволяет нам не только быть в курсе производимых в мире современных экспериментальных работ, но и предвидеть новые, практически важные эффекты квантовой природы, которые можно было бы получить на таком оборудовании. **Экспоненциальный рост вычислительной сложности** [1] требует создания эффективных компьютерных программ, моделирующих квантовую динамику в конечномерных моделях. Важнейшими здесь являются модели **Джейнса-Каммингса** [2], **Тависа-Каммингса** [3; 4] и их многоуровневые модификации.

Построение **квантового компьютера** по первоначальной схеме Р. Фейнмана [1] не удастся из-за проблемы **декогерентности** [5; 6], носящей фундаментальный характер и в настоящее время описываемой лишь в рамках теории открытых квантовых систем [7]. Важнейшей задачей здесь является описание так называемых **темных состояний** [8] — состояний ансамблей атомов, не взаимодействующих с полем. Будучи свободными от декогерентности, темные состояния могут быть использованы для достаточно длительного хранения сложных состояний в **квантовых вычислениях**, к примеру, в задачах организации **квантовой памяти** [9]. Поэтому изучение структуры и разработка методов их практического получения чрезвычайно важны для развития нанотехнологий в целом. В частности, простейший вид темных состояний, называемых синглетами, используется в квантовой криптографии (квантовый криптографический протокол АКМ-2017 [10]).

Методы компьютерного и суперкомпьютерного моделирования позволяют дать более точное определение качества **квантовых гейтов** (что играет важную роль в построении **квантового компьютера** [1]) и, как следствие, помогают выбрать наиболее эффективный и технологичный

путь их реализации.

Целью данной работы является разработка математических и программных средств компьютерного моделирования сложной динамики атомных ансамблей и поля в конечномерных моделях квантовой электродинамики.

В диссертации предложена методика моделирования сложных квантовых процессов на основе конечномерных моделей КЭД и комплекс программ, реализующих ее. Важнейшей областью приложения данной методики являются расчет квантовых эффектов, моделирование квантовых гейтов и исследование темных подпространств, свободных от декогерентности — главного препятствия квантовых вычислений.

Конкретные **задачи**, к которым применяются предложенные методы, следующие:

- исследование квантовой динамики больших многочастичных систем,
- получение темных состояний ансамблей многоуровневых атомов,
- проверка гипотезы об общем явном виде темного подпространства ансамблей трехуровневых атомов как линейных комбинаций антисимметричных базисных состояний,
- моделирование запутывающего гейта coCSign в системе оптических полостей.

Научная новизна:

1. Программный комплекс, разработанный в рамках диссертации, позволяет моделировать сложные квантовые системы в пространстве нескольких десятков кубитов. С его помощью удалось обнаружить и произвести детальный анализ ряда нетривиальных квантовых эффектов.
2. Предложен новый, достаточно простой в реализации метод получения темных состояний, основанный на оптическом отборе. Проведено его компьютерное моделирование в применении к двухуровневым и трехуровневым атомным ансамблям.
3. Для ансамблей, состоящих из не более чем двух десятков трехуровневых атомов, была численно определена размерность темного подпространства, а также подтверждена гипотеза об общем явном виде темного подпространства как линейных комбинаций антисимметричных базисных состояний для ограниченного числа атомов.
4. Произведена оценка качества запутывающего гейта coCSign и исследованы факторы, влияющие на его снижение.

Практическая значимость диссертационной работы состоит в создании математических и программных средств компьютерного и суперкомпьютерного моделирования квантовых процессов в конечномерных моделях, которые позволили

- произвести детальный анализ квантовых эффектов, которые не удается предсказать при помощи стандартных математических методов (примером может быть найденный пикообразный характер осцилляций атомных ансамблей в оптических полостях),
- предложить метод отбора темных состояний, важный для их практического применения в наноустройствах и в задачах квантовой криптографии,
- произвести определение размерности темного подпространства состояний трехуровневых атомов ограниченной численности,
- произвести компьютерное моделирование запутывающего гейта соCSign, а также дать оценку точности его срабатывания.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Методы компьютерного моделирования сложных квантовых процессов в конечномерных моделях квантовой электродинамики.
2. Метод получения темных состояний ансамблей многоуровневых атомов при помощи отбора, основанного на томографии состояния поля вне оптической полости.
3. Метод определения размерности темного подпространства состояний трехуровневых атомных ансамблей, позволяющий явно описать его структуру.
4. Компьютерное моделирование запутывающего гейта соCSign и исследование факторов, влияющих на точность его срабатывания.

Степень достоверности и апробация работы.

Основные результаты диссертационной работы были представлены на следующих конференциях и научных семинарах:

1. Кулагин А. В. Темные состояния и квантовые эффекты в контексте исследования конечномерных моделей (по материалам диссертации на соискание степени кандидата физико-математических наук) // Центр «Квантовая оптика и квантовая информатика» Института физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь, 27 сентября 2024 (научный семинар)
2. Кулагин А. В. Темные состояния и квантовые эффекты в контексте исследования конечномерных моделей (по материалам диссертации на соискание степени кандидата физико-математических наук) // Физико-технологический институт К. А. Валиева РАН, 2 апреля 2024 (научный семинар)

3. Кулагин А. В. Компьютерное моделирование квантовых эффектов в конечномерных моделях (по материалам диссертации на соискание степени кандидата физико-математических наук) // Физико-технологический институт К. А. Валиева РАН, 23 ноября 2023 (научный семинар)
4. Кулагин А. В., Афанасьев В. И., Ли В., Кэли Чж., Мiao X.-X., Плужников И., Ожигов Ю. И., Викторова Н. Б. Химический квантовый компьютер // Ломоносовские чтения 2021, секция «Вычислительная математика и кибернетика», Москва, Россия, 20-29 апреля 2021
5. Ozhigov Y., Kulagin A., Afanasiev V., Keli Zh., Li V., Miao H.-H. About chemical modifications of finite dimensional models of QED // Quantum Informatics 2021, Москва, Россия, 30 марта - 4 апреля 2021
6. Dull R., Ozhigov Y., Kulagin A., Li V., Miao H.-H., Keli Zh. Quality of quantum control by Tavis-Cummings-Hubbard model // Quantum Informatics 2021, Москва, Россия, 30 марта - 4 апреля 2021
7. Kulagin A., Ozhigov Y. Realization of algorithm GSA on the asynchronous atomic excitations // Quantum Informatics 2021, Москва, Россия, 30 марта - 4 апреля 2021
8. Ожигов Ю. И., Кулагин А. В., Ли В., Кэли Чж., Мiao X.-X., Дюль Р. Управление атомными ансамблями в модели Тависа-Каммингса-Хаббарда // Тихоновские чтения 2020, МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия, 26-31 октября 2020
9. Сковорода Н. А., Ожигов Ю. И., Ладунов В. Ю., Викторова Н. Б., Кулагин А. В. Ансамбли возбужденных атомов в одномодовых резонаторах // Ломоносовские чтения 2019, секция «Вычислительная математика и кибернетика», МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия, 15-25 апреля 2019
10. Ожигов Ю. И., Сковорода Н. А., Кулагин А. В., Ладунов В. Ю. Компьютерное моделирование системы зарядов и поля в конечных моделях КЭД // Ломоносовские чтения 2018, секция «Вычислительная математика и кибернетика», МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия, 16-27 апреля 2018.

Личный вклад. Все результаты работы, включая предложенный метод оптического отбора темных состояний, получены автором полностью самостоятельно, опубликованы в рецензируемых журналах и были представлены на научных конференциях. В публикации [A4] автором был представлен алгоритм определения размерности темного подпространства состояний трехуровневых атомов, основанный на редукции сверхбольших графов. Построение алгоритмов, разработка комплексов программ и все

численные расчеты проведены автором также самостоятельно. Автор благодарит научного руководителя за постановку задач и обсуждение работы на различных этапах.

Публикации. Основные положения и выводы диссертационного исследования в полной мере изложены в 7 печатных работах, из них 7 статей [A1-A7] в рецензируемых журналах (Web of Science, SCOPUS).

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения и приложения. Полный объем диссертации составляет 151 страницу, включая 41 рисунок. Список литературы содержит 128 наименований.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, производится обзор научной литературы по изучаемой проблематике, формулируются цели, излагается научная новизна, а также теоретическая и практическая значимость работы.

Особое внимание также уделено изложению концепции квантового компьютера Р. Фейнмана [1], роли квантовой запутанности в квантовых вычислениях, конечномерным моделям квантовой электродинамики, темным состояниям и теории открытых квантовых систем.

В первой главе производится обзор численных методов моделирования квантовой динамики конечномерных систем, а также сравнительный анализ их эффективности.

Вторая глава посвящена рассмотрению важного типа динамики — осцилляциям между возбужденным состоянием атомного ансамбля и поля, при которых вся энергия системы переходит от атомов к полю и обратно с большой амплитудой.

В многоатомном ансамбле имеется множество состояний, по которым амплитуда распределяется в ходе процесса так, что ее концентрация на строго неравновесных состояниях не является очевидной и не может быть непосредственно выведена из вида гамильтониана. Само существование таких осцилляций не следует естественным образом из подобных осцилляций Раби для одного атома. В случае сложных систем такие осцилляции могут быть проанализированы только в результате численного компьютерного и суперкомпьютерного моделирования.

В разделе 2.1 производится постановка задачи, **раздел 2.2** посвящен формализму состояний ансамблей идентичных двухуровневых атомов. Пусть ансамбль двухуровневых атомов разделен на две равные половины

A_1 и A_2 с номерами $1, 2, \dots, n/2$ и $n/2, \dots, n$ соответственно и первоначально в полости находится m фотонов («накачка»).

Рассмотрим два состояния

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= |m\rangle_{\text{ph}} |0 \dots 0\rangle_{A_1} |1 \dots 1\rangle_{A_2}, \\ |\Psi_1\rangle &= |m\rangle_{\text{ph}} |1 \dots 1\rangle_{A_1} |0 \dots 0\rangle_{A_2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Переходы между этими состояниями в ходе унитарной эволюции называются **ансамблевыми осцилляциями**.

Качество таких осцилляций определяется естественным образом с помощью функций

$$\begin{aligned} f_0(t) &= |\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle|^2, \\ f_1(t) &= |\langle \Psi_1 | \Psi(t) \rangle|^2, \end{aligned} \quad (2)$$

соответствующих вероятностям получения данных состояний при измерении состояния $|\Psi(t)\rangle$ системы в момент времени t .

В случае неунитарной эволюции смешанного состояния $\rho(t)$ вместо функций f_0, f_1 следует использовать **функции согласованности (fidelity, или точность Ульмана-Йожи – Uhlmann-Jozsa fidelity)** [11]

$$F_0(t) = \left(\text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_0} \rho(t) \sqrt{\rho_0}} \right)^2$$

и

$$F_1(t) = \left(\text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_1} \rho(t) \sqrt{\rho_1}} \right)^2$$

соответственно, где $\rho_0 = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$, $\rho_1 = |\Psi_1\rangle\langle\Psi_1|$.

В последующих разделах будет рассмотрена квантовая динамика состояний вида

$$|\Psi_0\rangle = |m\rangle_{\text{ph}} |0 \dots 0\rangle_{A_1} |1 \dots 1\rangle_{A_2}$$

в базисе $|m\rangle_{\text{ph}} \{i, j\}_{\text{at}}$, где

$|m\rangle_{\text{ph}}$ — начальное состояние поля оптического резонатора,

$\{i, j\}_{\text{at}} = \{i\}_{A_1} \{j\}_{A_2}$ — состояние (энергия возбуждения) атомных групп.

Периодический повтор во времени состояний с близкими к единице показателями качества является критерием наличия ансамблевых осцилляций. Такие точки мы называем **пиковыми**.

$n = 10$
10 фотонов в полости

$w_c = 21.506$ GHz
 $w_a = 21.506$ GHz
 $g/w_c = 0.01$

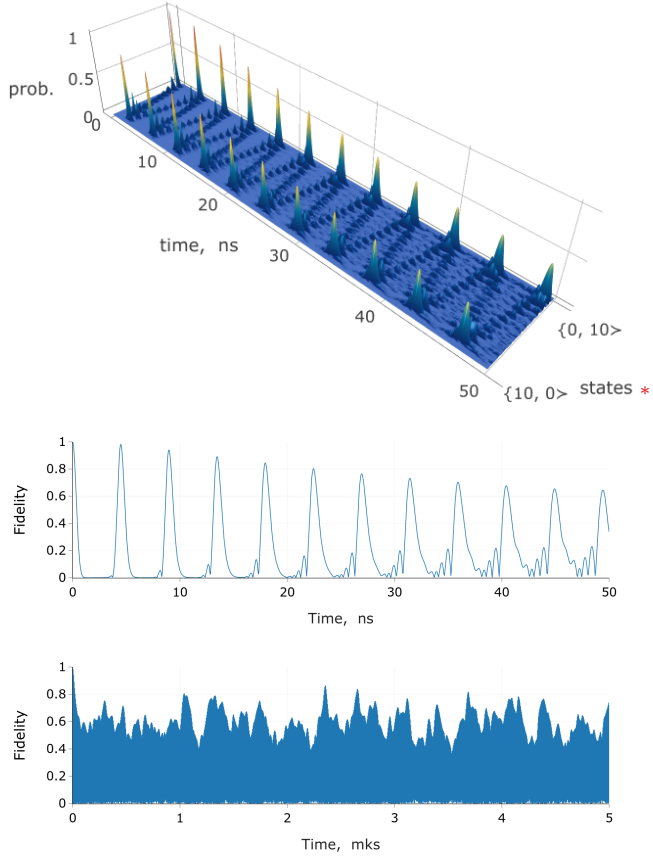


Рис. 1 — Коллективные осцилляции для системы 10×10
 $|\Psi_0\rangle = |10\rangle_{\text{ph}} \{0, 10\}_{\text{at}} = |10\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{10} A_1 \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{10} A_2$
 $|\Psi_1\rangle = |10\rangle_{\text{ph}} \{10, 0\}_{\text{at}} = |10\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{10} A_1 \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{10} A_2$

*на вертикальной оси — вероятность $p(t)$ получения состояния $\{i, j\}_{\text{at}}$ в момент времени t , на горизонтальных — рассматриваемый временной интервал и состояния системы $|\Psi_0\rangle, |\Psi_1\rangle$

В **разделе 2.3** установлен резкий характер осцилляций между двумя группами атомов равной численности и равной силы взаимодействия атомов с полем. Также показано, что резкость осцилляций в ансамбле с четным числом атомов предсказуемо растет с увеличением фотонной накачки в полости. В **разделе 2.4** продемонстрировано, что произвольные состояния вида

$$\alpha|0\dots 0\rangle_{A_1}|1\dots 1\rangle_{A_2} + \beta|1\dots 1\rangle_{A_1}|0\dots 0\rangle_{A_2}, \quad (3)$$

отличные от состояний (1), также дают осцилляции хорошего качества в условиях фотонной накачки. Группы же с произвольно выбранными в них количествами атомных возбуждений при этом вовсе не осциллируют.

В **разделе 2.5** моделирование квантовой динамики производится в отсутствие свободных фотонов в полости, что неизбежно приводит к снижению пиковых амплитуд и нарушению периодичности: коллапсы и возрождения начального состояния носят невыраженный характер. **Раздел 2.6** посвящен исследованию зависимости качества осцилляций от числа атомов и силы их взаимодействия с полем. В частности,

- было установлено дальнейшее снижение пиковых амплитуд и нарушение периодичности осцилляций при увеличении числа атомов в группе в отсутствие фотонной накачки,
- увеличение силы взаимодействия атомов с полем, равно как и усиление фотонной накачки, приводит к существенному уменьшению периода осцилляций. При стремлении к нулю интенсивности взаимодействия атомов с полем период осцилляций стремится к бесконечности,
- представленные изочастотные графики для $n = 10, 20, 30$ атомов в группе демонстрируют возможность наращивания этого числа, а также возможность уменьшения силы взаимодействия атомов с полем с одновременным сохранением периода осцилляций,
- усиление фотонной накачки в полости резонатора сопровождается асимптотическим стремлением к нулю периода осцилляций при различных значениях интенсивности взаимодействия атомов с полем.

Характерная картина ансамблевых осцилляций сохраняется и при условии, когда группы атомов A_1 и A_2 распределены между двумя взаимодействующими полостями (**раздел 2.8**). Обнаружено хорошо регистрируемое «квантовое эхо»: переход состояния атомного ансамбля из одной полости в другую и возврат этого состояния в первоначальную полость. Установлено высокое качество такого эха. По итогам многократных численных экспериментов для ряда квантовых систем была установлена граница его возникновения, которая выражается через соотношение интенсивности фотонной утечки и силы взаимодействия атомов с полем.

Третья глава посвящена исследованию эффекта квантового бутылочного горлышка для процесса интенсивного охлаждения атома, который переходит в необратимое состояние, находясь в возбужденном состоянии. Превышение некоторого порога интенсивности охлаждения ведет к росту вероятности такого перехода, что невозможно при классическом описании процесса.

Раздел 3.1 посвящен постановке задачи: модель Тависа-Каммингса будет применена для анализа вероятности перехода атома в необратимое состояние в результате спонтанной реакции в зависимости от времени при условии интенсивного оттока фотонов из полости.

Природа реакции, вызывающей такой переход, или **превращение**, предполагается химической, однако это может быть и радиоактивный распад, индуцированный фотонами. В результате реакции атом прекращает взаимодействовать с полем. Предполагается также, что такая реакция происходит только с атомом, находящимся в возбужденном состоянии $|1\rangle$, в противоположность основному состоянию $|0\rangle$, в котором атом не может подвергнуться превращению. Соответственно, рост числа фотонов в полости будет эмуляцией вероятности возбуждения атомов, а уменьшение — эмуляцией вероятности их релаксации.

В **разделе 3.2** подробно описывается процесс моделирования квантовой динамики рассматриваемой системы. В дополнение к стандартным состояниям атома (основному — $|0\rangle$ и возбужденному — $|1\rangle$) вводится особое состояние $|2\rangle$, называемое **превращенным**. Действие атомных операторов σ , σ^+ на атомный кубит определяется стандартным образом: $\sigma|0\rangle = \sigma^+|1\rangle = 0$, $\sigma|1\rangle = |0\rangle$, $\sigma^+|0\rangle = |1\rangle$. Оператор же атомного превращения L_2 определяется так: $L_2|1\rangle = |2\rangle$, $L_2|0\rangle = L_2|2\rangle = 0$.

В превращенном состоянии атом не может взаимодействовать с полем. Его физический смысл состоит в том, что атом либо вступает в химическую реакцию, либо участвует в ядерном превращении. В обоих случаях взаимодействие такого атома с полем в рамках модели Тависа-Каммингса становится невозможным. Ни продукты распада (в случае ядерного превращения), ни энергия того, во что этот атом превратится, в данном случае интереса не представляют, так что мы будем учитывать только динамику модели Тависа-Каммингса с дополнительными операторами, выражающими само превращение атома, ведущее к его выходу из данной модели.

Динамика системы описывается основным квантовым уравнением [7]

$$i\hbar\dot{\rho} = [H_{\text{TC}}^{\text{RWA}}, \rho] + iL(\rho), \quad L(\rho) = \sum_{i=1}^2 \gamma_i \left(L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ \rho, L_i^\dagger L_i \} \right) \quad (4)$$

с операторами Линдблада двух типов: $L_1 = a$ [7; 12] — вылет фотона из резонатора, и оператор атомного превращения L_2 . Интенсивности данных операторов обозначим через $\gamma_1 = \gamma_{\text{out}}$ и $\gamma_2 = \gamma_{\text{ex}}$ соответственно.

Нас интересует зависимость вероятности превращения атома от интенсивности $\gamma_1 = \gamma_{\text{out}}$ вылета фотона из резонатора. В данном случае механизм квантового бутылочного горлышка заключается в том, что при большой величине $\gamma_1 = \gamma_{\text{out}}$ время жизни возбужденного состояния атома удлиняется, что приводит к росту вероятности его превращения. Данный эффект имеет чисто квантовую природу.

Выберем базис $|i\rangle_{\text{ph}}|j\rangle_{\text{at}}$.

Здесь

$|i\rangle_{\text{ph}}$ – фоковское состояние поля (число фотонов в полости, $i = \overline{0,1}$),
 $|j\rangle_{\text{at}}$ – состояние атома ($j = \overline{0,2}$).

Данная система при наличии одного фотона и одного атома имеет 4 базисных состояния:

$|0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}}$ (превращенное состояние атома),
 $|0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}}$ (фотон вне полости),
 $|0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}}$ (атом возбужден),
 $|1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}}$ (фотон в полости).

Все матрицы, участвующие в процессе компьютерного моделирования, были реализованы как разреженные, поскольку для обнаружения эффекта квантового бутылочного горлышка потребовался достаточно малый шаг dt по времени (в пределах 0.1-1 ns) на промежутке 1 nks. Решение основного квантового уравнения (4) производилось при помощи метода Эйлера.

Наиболее сложной задачей в рамках данной главы было выявление (за разумное время) тех диапазонов интенсивностей $\gamma_1 = \gamma_{\text{out}}$ и $\gamma_2 = \gamma_{\text{ex}}$, а также их соотношения с интенсивностью фотонно-атомного взаимодействия g , при которых эффект квантового бутылочного горлышка был бы выявлен, и притом, качественно.

Представленные ниже результаты компьютерного моделирования были получены на суперкомпьютере Ломоносов-2. Вычисления производились параллельно в 100 вычислительных узлов. Каждый узел моделировал динамику для конкретного значения $\gamma_1 = \gamma_{\text{out}}$ и всего выбранного диапазона $\gamma_2 = \gamma_{\text{ex}}$. Также в ходе численного эксперимента анализировалась квантовая картина как для условий ультраслабого взаимодействия, так и для условий границы применимости приближения RWA.

В разделе 3.4 приведены результаты компьютерного моделирования:

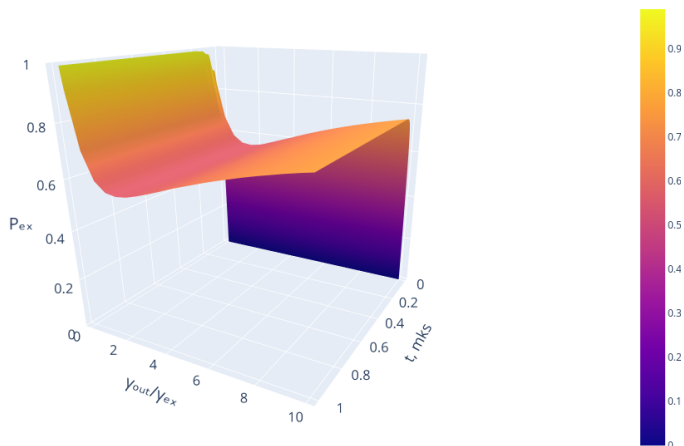


Рис. 2 — Зависимость вероятности превращения атома от интенсивности γ_{out} вылета фотона и времени t
 $\gamma_{out_min} = 0.01g$ $\gamma_{out_max} = 10g$ $\gamma_{ex} = g$

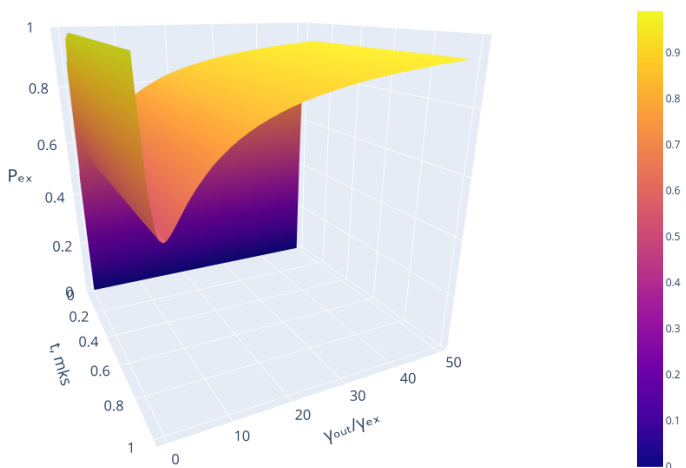


Рис. 3 — Зависимость вероятности превращения атома от интенсивности γ_{out} вылета фотона и времени t
 $\gamma_{out_min} = 0.01g$ $\gamma_{out_max} = 50g$ $\gamma_{ex} = g$

Четвертая глава посвящена разработке метода оптического отбора темных состояний, основанного на томографии электромагнитного поля вне полости, и его компьютерному моделированию.

В **разделе 4.1** дается кратное введение в **темные состояния** [8] как класс собственных состояний модели Тависа-Каммингса, представляющих собой особый интерес. Так называют атомные состояния, которые не могут ни испустить, ни поглотить фотон в силу того, что интерференция атомов блокирует их взаимодействие с полем. Тем самым атомы мешают друг другу испустить или поглотить фотон.

К примеру, для состояния

$$|s\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad (5)$$

испускание вторым атомом фотона переведет состояние $|0\rangle_{\text{ph}}|s\rangle$ в состояние $|1\rangle_{\text{ph}}|00\rangle$, а испускание фотона первым атомом переведет состояние $|0\rangle_{\text{ph}}|s\rangle$ в состояние $-|1\rangle_{\text{ph}}|00\rangle$. В итоге, попытка испускания фотона состоянием (5) не возымеет никакого эффекта.

Состояние (5) является **темным** и называется **синглетом**.

В **разделе 4.2** перечислены практические применения темных состояний и подчеркивается их значимость в организации квантовых вычислений.

В **разделе 4.4** непосредственно описывается алгоритм оптического отбора на примере ансамбля, состоящего из двух двухуровневых атомов.

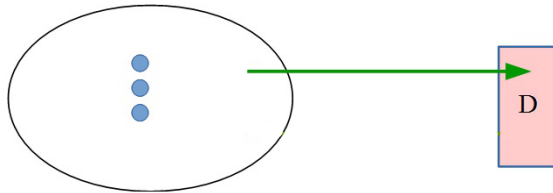


Рис. 4 — Оптический отбор.

Линдбладовский оператор $L_1 = a^+a$ реализует улет фотона.

Детектор щелкает всякий раз, когда в него попадает фотон.

После чего производится запуск очередного фотона в полость.

Предположим, что мы имеем один из двух вариантов первоначально го состояния атомов в полости: $|\Psi_0\rangle_{\text{at}} = |00\rangle$, либо $|\Psi_0\rangle_{\text{at}} = |s\rangle$. В первом случае состояние является темным, и среднее время жизни a_s фотона в полости будет коротким. Для второго случая среднее время жизни фотона a_t будет длиннее, поскольку фотон может с ненулевой вероятностью поглотиться атомным ансамблем.

В первом случае время срабатывания детектора, усредненное по большому числу испытаний, будет в силу центральной предельной теоремы очень близко к t_s , во втором — к t_t . Поскольку $t_t - t_s$ — достаточно большая величина, мы сможем статистически достоверно различить эти два случая.

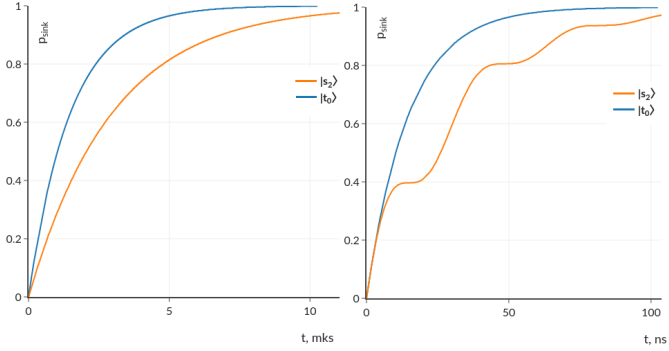


Рис. 5 — Функция распределения времени жизни фотона в полости $|t_0\rangle = |00\rangle, |s_2\rangle = |s\rangle$
(слева: при $\gamma = 0.01g$, справа: при $\gamma = g$)

γ — интенсивность фотонной утечки
 g — интенсивность взаимодействия атомов с полем

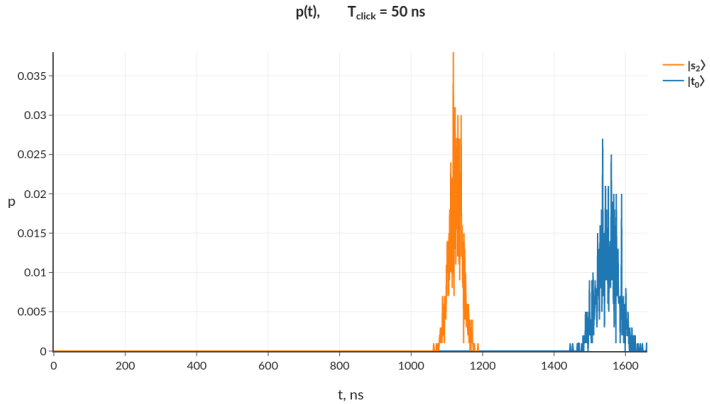


Рис. 6 — Плотность распределения среднего времени жизни фотона в полости
(точность моделирования: $dt = 1$ ns)

В разделе 4.5 представлены результаты компьютерного моделирования метода оптического отбора темных трехуровневых атомов.

Параметры моделирования: $\mathbf{dt} = 1 \text{ ns}$ (шаг по времени), $\gamma = g$ (интенсивность фотонной утечки), $\mathbf{dt}_{\text{click}} = 100 \text{ ns}$ (частота срабатывания фотодетектора), $\mathbf{N} = 1000$ (число испытаний).

Также определено среднее время жизни фотона в полости для всевозможных начальных состояний, содержащих темную атомную компоненту:

$$\begin{aligned}
 a_{|10\rangle_{\text{ph}}|D_3\rangle} &= 16.596 \text{ mks} & a_{|10\rangle_{\text{ph}}|0_1 0_2 0_3\rangle_{\text{at}}} &= 22.243 \text{ mks} \\
 a_{|10\rangle_{\text{ph}}(|0_1 1_2\rangle - |1_1 0_2\rangle)|0_3\rangle} &= 22.423 \text{ mks} & a_{|10\rangle_{\text{ph}}|0_2\rangle(|0_1 1_3\rangle - |1_1 0_3\rangle)} &= 22.423 \text{ mks} \\
 a_{|10\rangle_{\text{ph}}|0_1\rangle(|0_2 1_3\rangle - |1_2 0_3\rangle)} &= 22.423 \text{ mks} \\
 \end{aligned}$$

(здесь D_3 – полностью темное трехтомное состояние)

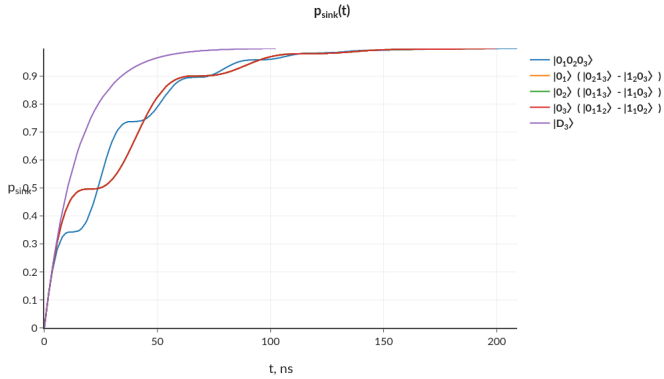


Рис. 7 — Функция распределения времени жизни фотона в полости ($\gamma = g$)

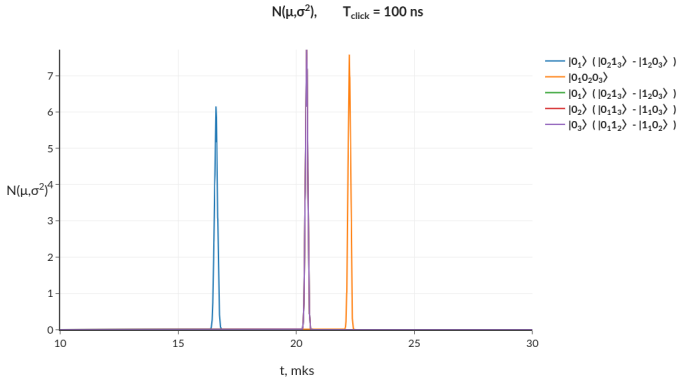


Рис. 8 — Плотность распределения среднего времени жизни фотона в полости ($l = g$)

В **пятой главе** предложен алгоритм численного определения размерности темного подпространства состояний трехуровневых атомных ансамблей.

Алгебраическое описание темных состояний ансамблей многоуровневых атомов можно найти в работе [8], однако их явный вид был найден только для ансамблей двухуровневых атомов. В работе [13] Ю. Ожиговым было сформулировано и доказано утверждение о том, что размерность темного подпространства состояний n двухуровневых атомов равна

$$\dim(D_n^2) = \begin{cases} C_n^k - C_n^{k-1} & \text{при } n = 2k, \\ 0 & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (6)$$

и все наборы темных состояний (для четного числа атомов в группе) с учетом нормировки имеют вид

$$\frac{1}{2^{n/4}} \bigotimes_{j=1}^{n/2} (|01\rangle_j - |10\rangle_j), \quad (7)$$

где индекс j означает номер пары $j = 1, \dots, n/2$ при произвольном разбиении n атомов на пары.

Результат (7) справедлив и строго доказан только для случая двухуровневых атомных ансамблей. Аналогичное утверждение для ансамблей трехуровневых атомов в качестве гипотезы формулируется следующим образом:

Гипотеза 1. Темное подпространство состояний n трехуровневых атомов есть линейная оболочка состояний $\bigotimes_{j=1}^{n/3} D_3^{(j)}$, где $D_3^{(j)}$ — **трехатомное состояние, имеющее вид**

$$\sum_{\pi \in S_3} |\pi(1)\rangle |\pi(2)\rangle |\pi(3)\rangle (-1)^{\sigma(\pi)} \quad (8)$$

(разбиение n атомов на тройки произвольно).

Примером темного трехуровневого состояния является состояние

$$|\Psi\rangle = |012\rangle + |120\rangle + |201\rangle - |021\rangle - |102\rangle - |210\rangle$$

(оно же единственное для $n = 3$).

В разделе 5.1 приводится критерий темноты атомного состояния. Обозначим через $\bar{\sigma}$ и $\bar{\sigma}^+$ операторы [14], действующие на атомный ансамбль:

$$\bar{\sigma} = \sum_{i=1}^n \sigma_i = \sigma_1 \otimes I_2 \otimes \cdots \otimes I_n + I_1 \otimes \sigma_2 \otimes I_3 \otimes \cdots \otimes I_n + \cdots + I_1 \otimes \cdots \otimes I_{n-1} \otimes \sigma_n,$$

$$\bar{\sigma}^+ = \sum_{i=1}^n \sigma_i^+ \text{ определяется аналогичным образом.}$$

Здесь наличие оператора σ_j/σ_j^+ означает релаксацию/возбуждение j -го атома, наличие оператора I_j означает отсутствие воздействия на состояние j -го атома. Их действие позволит нам определить возможность испускания/поглощения одиночного фотона хотя бы одним атомом ансамбля.

Только для темных состояний одновременное действие обоих операторов будет давать нулевой эффект:

$$\begin{cases} \bar{\sigma}^+|\Psi\rangle_{\text{at}} = 0 & \text{(атомы не могут поглотить фотон),} \\ \bar{\sigma}|\Psi\rangle_{\text{at}} = 0 & \text{(атомы не могут испустить фотон).} \end{cases} \quad (9)$$

$|\Psi\rangle_{\text{at}}$ — произвольное состояние атомного ансамбля

Таким образом, условие (9) является критерием темноты атомного ансамбля, что непосредственно следует из определения темного состояния.

В разделе 5.2 дается постановка задачи. Отмечается, что множество решений системы

$$\begin{cases} \bar{\sigma}^+|\Psi\rangle_{\text{at}} = 0, \\ \bar{\sigma}|\Psi\rangle_{\text{at}} = 0, \end{cases} \Leftrightarrow Ax = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}^+ \\ \bar{\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \dots \\ \lambda_N \end{pmatrix} = 0 \quad (10)$$

однородных уравнений с соответствующей матрицей системы $A = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}^+ \\ \bar{\sigma} \end{pmatrix}$ размерности $M \times N$ есть линейное подпространство размерности $(N - \text{rang } A)$. Размерность матрицы системы для трехуровневых атомов равна $(M, N) = (6 \cdot 3^n, 3^n)$. Таким образом, определение размерности темного подпространства сводится к задаче определения ранга матрицы A системы (10) для различных значений n .

Размерность матрицы системы для трехуровневых атомов равна $(M, N) = (6 \cdot 3^n, 3^n)$. Таким образом, определение размерности темного подпространства сводится к задаче определения ранга матрицы A системы (10) для различных значений n .

Отмечается также следующее:

- изначально (до процедуры приведения к ступенчатому виду) матрица является двоичной: состоит из нулей и единиц,
- матрица является сильно разреженной с множеством нулевых строк,
- подавляющее большинство строк матрицы нетривиальны: не соответствуют строкам единичной матрицы, а в значительной части из них количество единиц сильно превосходит количество нулей,
- размерность матрицы в случае трехуровневой системы равна $6 \cdot 3^n \times 3^n$, поскольку возможны возбуждения и релаксации атомов трех типов — $\sigma_i^{+\{0,1\}}/\sigma_i^{\{0,1\}}$, $\sigma_i^{+\{1,2\}}/\sigma_i^{\{1,2\}}$, $\sigma_i^{+\{0,2\}}/\sigma_i^{\{0,2\}}$.

Зависимость размерности матрицы системы от числа n атомов в ансамбле носит экспоненциальный характер:

n	3	...	18	21
$M \times N$	162×27	...	$2.3 \cdot 10^9 \times 387 \cdot 10^6$	$62 \cdot 10^9 \times 10.4 \cdot 10^9$

Возникающие при этом вычислительные трудности:

- плотные вещественные матрицы размера $(6 \cdot 3^n) \times 3^n$, начиная уже с малых значений n , не умецаются целиком в оперативную память,
- алгоритм должен **точно вычислять ранг**: ошибки округления при работе с вещественными числами могут повлиять на корректность вычислений.

Такие инциденты, как

$$\begin{pmatrix} 0 & \dots & 0.333333 & \dots \\ 0 & \dots & 0.333334 & \dots \end{pmatrix}$$

приводят к вычислению неверного ранга.

Кроме того, было обнаружено, что многие существующие на сегодняшний день алгоритмы и пакеты программ для вычисления ранга разреженных матриц дают неверный ответ (в частности, метод `linalg.interpolative.estimate_rank` библиотеки `scipy`, начиная с $n = 9$).

Данный факт означает **необходимость вычисления ранга матрицы в целых числах**.

- применение алгоритма Гаусса приведения матрицы к ступенчатому виду занимает неприемлемо большое вычислительное время и не может быть использовано для матриц подобных размеров.

В разделе 5.3 приводится описание алгоритма, состоящего из трех частей:

1. построение разреженной матрицы системы A ;

2. элементарные преобразования над матрицей системы путем редукции соответствующего ей графа;
3. окончательное целочисленное приведение матрицы к ступенчатой форме с помощью алгоритма Гаусса.

Элементы разреженной матрицы системы (10) хранятся в виде графа. Граф позволяет достаточно быстро производить удаление дубликатов и вычитание строк друг из друга, находящихся на любом удалении, что необходимо для существенного уменьшения размерности исходной матрицы системы. Таким образом, задача целочисленного определения ранга сверхбольшой двоичной матрицы сводится к параллельной редукции графа, распределенного по сетке процессоров. Размерность темного подпространства была численно установлена на суперкомпьютере Ломоносов-2 для ансамблей, содержащих до 21 трехуровневого атома включительно. Кроме того, для ансамблей, состоящих из 1, 3, 6 и 9 трехуровневых атомов, была подтверждена гипотеза о структуре и явном виде темных состояний как линейной оболочки мультисинглетов.

В шестой главе производится оценка качества запутывающего гейта соCSign, основанного на асинхронных атомных возбуждениях в полости оптического резонатора. Среди факторов, негативно влияющих на него, выделяются следующие: неточность определения времени перехода фотона между полостями в случае идеальной модели, технические ограничения ячейки Поккельса, реализующей перелет фотона, конечное время жизни фотона в несовершенном резонаторе и увеличение ширины спектральных линий рабочей моды резонатора. Проблема несовершенства резонатора на сегодняшний день носит сугубо технический характер и ее рассмотрение выходит за пределы данной работы. Основным фактором декогеренции является последний: он имеет фундаментальную природу и вытекает из соотношения неопределенности «время-энергия». Чем быстрее передается фотон, тем более неопределенной становится его частота и тем короче становится его время жизни в резонаторе.

В заключении приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Была проанализирована динамика квантовых состояний ансамблей двухуровневых атомов и одномодового поля в резонаторе в рамках модели Тависа-Каммингса, а также модели Тависа-Каммингса-Хаббарда для случая двух взаимодействующих полостей в приближении RWA.

По результатам компьютерного моделирования:

- установлен резкий характер осцилляций между двумя группами атомов одинаковой численности и одинаковой силы взаимодействия атомов с полем,

- установлено, что резкость осцилляций в ансамбле с четным числом атомов предсказуемо растет с увеличением фотонной накачки в полости и намного превосходит резкость осцилляций Раби для одного атома,
- численно найдена зависимость качества осцилляций от силы взаимодействия атомов с полем. Показано, что удлинение периода осцилляций при уменьшении силы взаимодействия может быть скомпенсировано увеличением числа атомов в группе и усилением фотонной накачки,
- обнаружено хорошо регистрируемое «квантовое эхо»: переход состояния атомного ансамбля из одной полости в другую и возврат этого состояния в первоначальную полость. Установлено высокое качество такого «эха» и его зависимость от интенсивности перехода фотонов между полостями. По итогам многократных численных экспериментов для ряда квантовых систем была установлена граница его возникновения, выражающаяся через соотношение интенсивности фотонной утечки и силы взаимодействия между атомами и полем.

Фактически такое возрождение квантовых состояний является прямым аналогом эффекта, обнаруженного и продемонстрированного экспериментально группой С. Моисеева [15], — процесса поглощения пучка фотонов средой с последующим возвратом средой энергии в виде фотонного эха. Такого рода эхо является важным феноменом, поскольку его можно использовать в качестве временного конденсатора энергии при квантовых вычислениях.

2. Установлен эффект квантового бутылочного горлышка для процесса интенсивного охлаждения атома, который переходит в необратимое состояние, находясь в возбужденном состоянии. В результате численного моделирования было обнаружено, что превышение некоторого порога интенсивности охлаждения ведет к росту вероятности такого перехода, что невозможно при классическом описании процесса.
3. Предложен новый и достаточно простой в реализации метод получения темных состояний ансамблей многоуровневых атомов с помощью отбора, основанного на томографии состояния поля вне оптической полости.
4. Был предложен алгоритм определения размерности темного подпространства состояний трехуровневых атомных ансамблей, основанный на целочисленном вычислении ранга сверхбольшой

двоичной матрицы путем параллельной редукции соответствующего ей графа.

Данный алгоритм позволил установить размерность темного подпространства состояний ансамблей, содержащих до 21 трехуровневого атома включительно. Для некратного трем количества атомов в группе работа алгоритма завершилась установлением размерности темного подпространства, равной нулю, означающему отсутствие темных состояний в этом пространстве.

Гипотеза о структуре и явном виде темных состояний была подтверждена для 1, 3, 6 и 9 трехуровневых атомов в группе. Было показано, что все темные состояния в данном случае есть линейные комбинации мультисинглетов.

5. Проведены оценки качества управления гейтом соCSign: установлено, что главный фактор его снижения в рамках модели JCH обусловлен влиянием конечной ширины спектральных линий — соотношением неопределенности «энергия-время».

Приложение содержит листинг программного комплекса первой главы.

Благодарности

Автор выражает большую признательность Ожигову Юрию Игоревичу за поддержку, помощь, обсуждение результатов и научное руководство. Отдельную благодарность автор выражает Суперкомпьютерному центру ВМК МГУ за предоставленный доступ к вычислительным ресурсам, а также Российскому Фонду Фундаментальных Исследований.

Публикации автора по теме диссертации в изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus и RSCI

- A1. *Kulagin, A. V. Realization of Grover Search Algorithm on the Optical Cavities / A. V. Kulagin, Y. I. Ozhigov // Lobachevskii Journal of Mathematics. — 2022. — Vol. 43, no. 4. — P. 864–872. — DOI: [10.1134/S1995080222070162](https://doi.org/10.1134/S1995080222070162). — (Web of Science, SCOPUS – 0.7) [0.6/0.5].*

Автором было произведено компьютерное моделирование алгоритма Гровера и оценка количества кубитов, на которых он может быть реализован в рамках асинхронных атомных возбуждений в оптических полостях.

- A2. *About Chemical Modifications of Finite Dimensional QED Models / Y. I. Ozhigov [et al.] // Nonlinear Phenomena in Complex*

Systems. — 2021. — Vol. 24, no. 3. — P. 230–241. — DOI: [10.33581/1561-4085-2021-24-3-230-241](https://doi.org/10.33581/1561-4085-2021-24-3-230-241). — (SCOPUS – 0.468) [0.8/0.7].

Автором было проведено компьютерное моделирование электронных переходов между трехуровневыми атомами со спектром типа лямбда. Установлены возможные темные состояния ансамблей из пары таких атомов. Показана возможность масштабирования модели Тависа-Каммингса-Хаббарда на большие ансамбли атомов, в том числе многоуровневые.

- A3. Quality of Control in the Tavis-Cummings-Hubbard Model / R. Düll [et al.] // Computational Mathematics and Modeling. — 2021. — Vol. 32, no. 1. — P. 75–85. — DOI: [10.1007/s10598-021-09517-y](https://doi.org/10.1007/s10598-021-09517-y). — (SCOPUS – 0.602) [0.8/0.7].

Автором была произведена оценка качества квантового вентиля типа CSign, основанного на асинхронных атомных возбуждениях и на оптической интерпретации движения свободной частицы. Показано, что основная причина снижения качества управления гейтом в модели TCH обусловлена конечной шириной атомных спектральных линий.

- A4. *Kulagin, A. V.* Supercomputer Algorithm for Determining the Dimension of Dark Subspace / A. V. Kulagin // Lobachevskii Journal of Mathematics. — 2021. — Vol. 42, no. 7. — P. 1521–1531. — DOI: [10.1134/s1995080221070143](https://doi.org/10.1134/s1995080221070143). — (Web of Science, SCOPUS – 0.7) [0.8/0.8].

- A5. *Kulagin, A. V.* Optical Selection of Dark States of Multilevel Atomic Ensembles / A. V. Kulagin, Y. I. Ozhigov // Computational Mathematics and Modeling. — 2020. — Vol. 31, no. 4. — P. 431–441. — DOI: [10.1007/s10598-021-09504-3](https://doi.org/10.1007/s10598-021-09504-3). — (SCOPUS – 0.602) [0.8/0.6].

Автором был предложен метод получения темных состояний на основе оптического отбора. Проведено его компьютерное моделирование для двух- и трехуровневых атомов. Показана возможность сепарации темных и светлых квантовых состояний по признаку среднего времени жизни фотона в полости, полученного в результате многократного повторения численного эксперимента.

- A6. *Викторова, Н. Б.* Квазиклассическое описание эффекта «Квантовое бутылочное горлышко» для термической релаксации атома в резонаторе / Н. Б. Викторова, А. В. Кулагин, Ю. И. Ожигов // Прикладная математика и информатика: Труды факультета ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова. — 2019. — Т. 62. — С. 5–12. — (RINC) [0.6/0.5]. Перевод: *Kulagin, A. V.* Quasi-Classical Description of the “Quantum Bottleneck” Effect for Thermal Relaxation of an Atom in a Resonator / A. V. Kulagin, Y. I. Ozhigov, N. B. Victorova // Computational Mathematics and Modeling. — 2020. — Vol. 31, no. 1. — P. 1–7. — DOI: [10.1007/s10598-020-09470-2](https://doi.org/10.1007/s10598-020-09470-2). — (SCOPUS – 0.602) [0.5/0.4].

Автором было произведено компьютерное моделирование эффекта квантового бутылочного горлышка в условиях единичного атома,

подверженного термической дефазировке. Было установлено, что увеличение интенсивности утечки приводит к совершенно обратному эффекту: фотоны начинают все слабее покидать полость.

- A7. Homogeneous atomic ensembles and single-mode field: review of simulation results / A. V. Kulagin [et al.] // Proceedings of SPIE, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2018, The International Society for Optical Engineering. — 2019. — Issue 11022C. — P. 110222C-1-110222C-12. — DOI: [10.1117/12.2521763](https://doi.org/10.1117/12.2521763). — (SCOPUS – 0.37) [0.9/0.7].

Автором был обнаружен эффект коллективных осцилляций квантовых состояний больших атомных ансамблей, сопровождаемых коллапсами и возрождениями данных состояний. Проведено его компьютерное моделирование.

Список литературы

1. *Feynman, R. P.* Simulating physics with computers / R. P. Feynman // International journal of theoretical physics. — 1982. — Vol. 21, no. 6. — P. 467—488. — DOI: [10.1007/BF02650179](https://doi.org/10.1007/BF02650179).
2. *Jaynes, E. T.* Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser / E. T. Jaynes, F. W. Cummings // Proceedings of the IEEE. — 1963. — Vol. 51, no. 1. — P. 89—109. — DOI: [10.1109/PROC.1963.1664](https://doi.org/10.1109/PROC.1963.1664).
3. *Tavis, M.* Exact Solution for an N -Molecule-Radiation-Field Hamiltonian / M. Tavis, F. W. Cummings // Phys. Rev. — 1968. — Vol. 170, no. 2. — P. 379—384. — DOI: [10.1103/PhysRev.170.379](https://doi.org/10.1103/PhysRev.170.379).
4. *Tavis, M. T.* A Study of an N Molecule Quantized-Radiation-Field Hamiltonian / M. T. Tavis. — 2017. — arXiv: [1206.0078](https://arxiv.org/abs/1206.0078) [[quant-ph](https://arxiv.org/abs/1206.0078)].
5. *Fedichkin, L.* Evaluation of decoherence for quantum control and computing / L. Fedichkin, A. Fedorov, V. Privman // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. — 2004. — Vol. 1, issue 2. — P. 132—143. — DOI: [10.1166/jctn.2004.011](https://doi.org/10.1166/jctn.2004.011).
6. *Shor, P. W.* Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory / P. W. Shor // Phys. Rev. A. — 1995. — Vol. 52, issue 4. — R2493—R2496. — DOI: [10.1103/PhysRevA.52.R2493](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.52.R2493).
7. *Бройер, Х. П.* Теория открытых квантовых систем / Х. П. Бройер, Ф. Петруччионе. — Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика, 2010. — 824 с.

8. *Kok, P.* Properties of multi-partite dark states / P. Kok, K. Nemoto, W. J. Munro. — 2002. — URL: <http://lanl.arxiv.org/abs/quant-ph/0201138>.
9. *Quach, J. Q.* Using dark states to charge and stabilise open quantum batteries / J. Q. Quach, W. J. Munro // *Phys. Rev. Appl.* — 2020. — Vol. 14, issue 2. — P. 024092. — DOI: [10.1103/PhysRevApplied.14.024092](https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.14.024092).
10. Квантовая криптографическая система АКМ2017 на основе ресурса несепарабельности состояния спиновой синглет / Ф. К. Алиев [и др.] // *Системы высокой доступности.* — 2018. — Т. 14, № 4. — С. 61–72. — DOI: [10.18127/j20729472-201804-11](https://doi.org/10.18127/j20729472-201804-11).
11. *Jozsa, R.* Fidelity for Mixed Quantum States / R. Jozsa // *Journal of Modern Optics.* — 1994. — Vol. 41, no. 12. — P. 2315–2323. — DOI: [10.1080/09500349414552171](https://doi.org/10.1080/09500349414552171).
12. Photon emission statistics of a driven microwave cavity / P. Portugal [et al.] // *Phys. Rev. Res.* — 2023. — Vol. 5, issue 3. — P. 033091. — DOI: [10.1103/PhysRevResearch.5.033091](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.5.033091).
13. *Ожигов, Ю. И.* О размерности пространства темных состояний в модели Тависа–Каммингса / Ю. И. Ожигов // *Математическое моделирование.* — 2022. — Т. 111, № 3. — С. 433–442. — DOI: [10.4213/mzm13464](https://doi.org/10.4213/mzm13464).
14. *Мессиа, А.* Квантовая механика. Т1 / А. Мессиа. — Москва : Наука, 1978. — 478 с.
15. Experimental realization of revival of silenced echo memory protocol in optical cavity / M. Minnegaliev [et al.] // *EPJ Web Conf.* Vol. 190. — 2018. — P. 03007. — DOI: [10.1051/epjconf/201819003007](https://doi.org/10.1051/epjconf/201819003007).