

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»

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научные руководители:
доктор физико-математических наук,
профессор Ожигов Ю. И.

Москва — 2025

Работа выполнена на кафедре Суперкомпьютеров и квантовой информатики факультета Вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М. В. Ломоносова.

Автор выражает благодарность Суперкомпьютерному центру ВМК МГУ за предоставленный доступ к вычислительным ресурсам, а также Российскому Фонду Фундаментальных Исследований.

Оглавление

Стр.

Введение	6
Глава 1. Компьютерное моделирование конечномерных квантовых систем	26
1.1 Моделирование неунитарной динамики	26
1.2 Сравнительный анализ численных методов	34
1.3 Моделирование больших квантовых систем	42
Глава 2. Коллективные осцилляции многоатомных ансамблей .	45
2.1 Постановка задачи	45
2.2 Выбор базиса, построение гамильтониана	46
2.3 Осцилляции с накачкой фотонов	49
2.4 Осцилляции произвольных атомных ансамблей	51
2.5 Осцилляции без накачки фотонов: коллапсы и возрождения ансамблевых состояний	53
2.6 Зависимость качества осцилляций от числа атомов в группе и силы взаимодействия атомов с полем	54
2.7 Осцилляции в условиях взаимодействия с внешним окружением .	59
2.8 Возрождение состояний атомных ансамблей в системе оптических полостей	61
2.9 Анализ полученных результатов	63
2.10 Программная реализация	64
2.11 Выводы главы	69
Глава 3. Квантовое бутылочное горлышко в атомных превращениях	70
3.1 Постановка задачи	70
3.2 Фотон-индуцированное превращение атомов	71
3.3 Программная реализация	74
3.4 Результаты компьютерного моделирования	76
3.5 Выводы главы	79

Глава 4. Оптический отбор темных состояний ансамблей многоуровневых атомов	80
4.1 Темные состояния	80
4.2 Практическая значимость темных состояний	81
4.3 Многомерные синглеты	82
4.4 Метод оптического отбора темных состояний	84
4.5 Оптический отбор многоуровневых темных состояний	93
4.6 Выводы главы	94
Глава 5. Определение размерности темного подпространства состояний трехуровневых атомных ансамблей	95
5.1 Введение	95
5.2 Постановка задачи	98
5.3 Описание алгоритма	102
5.3.1 Построение разреженной матрицы системы	102
5.3.2 Элементарные преобразования над матрицей системы путем редукции соответствующего ей графа	103
5.3.3 Окончательное целочисленное приведение матрицы к ступенчатой форме с помощью алгоритма Гаусса	109
5.4 Выводы главы	113
Глава 6. Оценка качества запутывающего гейта coCSign на асинхронных атомных возбуждениях	114
6.1 Запутывающие гейты на оптических полостях	115
6.2 Общая схема гейта coCSign	116
6.3 Численное моделирование гейта coCSign	118
6.4 Оценка точности гейта coCSign	120
6.5 Выводы главы	122
Заключение	123
Публикации автора по теме диссертации	126
Список сокращений и условных обозначений	127
Список литературы	128

Приложение. Коллективные осцилляции многоатомных ансамблей (программный комплекс)	141
---	-----

Введение

Диссертационная работа посвящена созданию математических и программных средств компьютерного моделирования сложной динамики атомных ансамблей и поля в оптических полостях в рамках конечномерных моделей квантовой электродинамики. Ключевой задачей диссертации является разработка подходов к изучению и практическому получению темных состояний многоуровневых атомов, что позволяет пролить свет на понимание структуры темного подпространства.

Актуальность работы

Развитие математических и программных методов моделирования квантовой динамики поля и атомов является ключевым этапом в развитии технологий квантовых устройств, в частности, в построении **квантового компьютера** [1–4]. В особенности, это важно для отечественных исследований в данной области, где первые принципы квантовой теории для сложных систем лучше всего проверять в **оптических полостях** [5–7] — 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** [8–12], **Тависа-Каммингса** [13–17] и их многоуровневые модификации [18–20].

Построение **квантового компьютера** по первоначальной схеме Р. Фейнмана [1] не удастся из-за проблемы **декогерентности** [21; 22], носящей

фундаментальный характер и в настоящее время описываемой лишь в рамках теории открытых квантовых систем [22]. Важнейшей задачей здесь является описание так называемых **темных состояний** [23] — 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** [24]. Поэтому изучение структуры и разработка методов их практического получения чрезвычайно важны для развития нанотехнологий в целом. В настоящей работе предложен достаточно простой в технической реализации метод получения темных состояний двухуровневых и многоуровневых атомов. Описанию данного метода и его компьютерному моделированию посвящена глава 4. Отдельное внимание в данной работе также уделено определению размерности и изучению структуры темного подпространства ансамблей трехуровневых атомов (глава 5).

Особую значимость на сегодняшний день также приобретает компьютерное моделирование **квантовых гейтов** [25; 26], позволяющее, в частности, дать более точную оценку их качества. Это играет большую роль в непосредственной разработке элементов квантового компьютера и, как следствие, помогает выбрать наиболее эффективный и технологичный путь их реализации. Глава 6 данной работы посвящена компьютерному моделированию запутывающего гейта coCSign и оценке его эффективности. Основным запутывающим гейтом CNOT (управляемый NOT) реализуется на его основе при помощи однокубитных гейтов.

Целью работы является разработка методов моделирования сложных квантовых процессов в рамках конечномерных моделей квантовой электродинамики, а также разработка комплекса программ, реализующих данные методы.

Важнейшей областью их приложения являются расчет квантовых эффектов, моделирование квантовых гейтов, а также 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.

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 coCSign и исследование факторов, влияющих на точность его срабатывания.

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

- произвести детальный анализ квантовых эффектов, которые не удастся 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 coCSign , а также дать оценку точности его срабатывания.

Квантовый компьютер

Квантовый компьютер, концепция которого впервые была предложена американским физиком-теоретиком Ричардом Фейнманом [1] в начале 1980-х годов, представляет собой революционную идею в области вычислительной техники. Он выдвинул предположение о том, что классические компьютеры принципиально не способны моделировать поведение сложных квантовых систем из-за экспоненциального роста требуемых для этого ресурсов. В связи с этим им была предложена идея создания нового типа компьютера, который бы использовал принципы квантовой механики, что позволило бы значительно ускорить процесс обработки информации.

Квантовый компьютер представляет собой вычислительное устройство, которое использует квантовомеханические явления, такие как суперпозиция и запутанность, для выполнения операций над данными. В отличие от классических компьютеров, которые оперируют битами, принимающими значения 0 или 1, квантовые компьютеры работают с квантовыми битами, или **кубитами** [4], каждый из которых может одновременно находиться в состояниях $|0\rangle$ и $|1\rangle$ (суперпозиции состояний) с определенными вероятностями.

Математически состояние кубита может быть представлено в виде линейной комбинации двух ортонормированных базисных состояний:

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

где $|0\rangle$ и $|1\rangle$ — базисные состояния кубита (аналогичные 0 и 1 для классического бита), α и β — амплитуды вероятностей этих состояний. Согласно правилу Борна [55], квадрат модуля амплитуды равен вероятности того, что в результате измерения кубита будет получено соответствующее базисное состояние.

Кубиты могут быть физически реализованы с использованием различных технологий [3; 27; 28]: ионы в ловушках, сверхпроводящие кубиты, кубиты на основе дефектов в кристаллических решетках и многое другое. Выбор технологии для создания кубитов зависит от множества факторов, включая легкость управления, устойчивость к декогерентности, возможность масштабирования и способность к интеграции с другими кубитами для выполнения квантовых операций.

Важным принципом Фейнмановского квантового компьютера является возможность проведения вычислений при помощи квантовых вентилях, или

квантовых гейтов (quantum gates) [3; 4], — унитарных операторов, реализующих различные квантовые операции, такие как инверсия, вращение, фазовый сдвиг и прочие преобразования состояний одного или нескольких кубитов. **Универсальным** называется набор квантовых гейтов, достаточных для осуществления любого квантового преобразования над произвольным числом кубитов. Его можно получить, взяв, к примеру, все однокубитные гейты и любой **запутывающий гейт** (скажем, **CNOT** — управляемый NOT) [29]. Основная трудность физической реализации квантовых гейтов заключается в обеспечении точного управления состояниями кубитов и минимизации ошибок, связанных с этим.

Гейтовая модель — одна из наиболее распространенных моделей организации квантовых вычислений. В этой модели осуществление квантовых вычислений производится путем последовательного применения к кубитам — квантовым аналогам битов.

Квантовый алгоритм в гейтовой модели — это представление квантовых вычислений в виде схемы, состоящей из квантовых гейтов, которые применяются к кубитам с тем, чтобы преобразовать входное квантовое состояние в целевое выходное состояние. В отличие от классических битов, которые могут быть только в состоянии 0 или 1, кубиты могут находиться в суперпозиции этих состояний, что позволяет решать некоторые задачи более эффективно, чем это возможно сегодня на классических компьютерах.

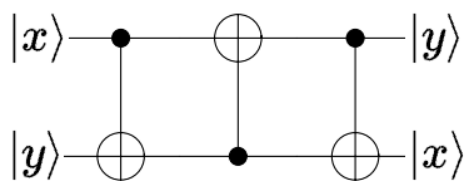


Рисунок 1 — Пример: операция SWAP перестановки кубитов может быть реализована троекратным применением гейта CNOT

Фейнмановская идея квантовых вычислений также предполагает возможность реализации **быстрых квантовых алгоритмов**, дающих **экспоненциальное ускорение**. Такие алгоритмы могут принципиально отличаться от классических и решать определенные задачи за время, недостижимое для современных компьютеров.

К числу таких алгоритмов относятся

– **алгоритм Шора факторизации целых чисел [30]**

Опубликованный в 1994 году алгоритм Шора позволяет факторизовать число n за время $O(\log^3 n)$, используя $O(\log n)$ кубитов. Его работа была продемонстрирована экспериментально в 2001 году группой специалистов из IBM [31]: разложение числа 15 на простые множители с использованием 7 кубитов. При достаточном числе кубитов алгоритм Шора способен взламывать такие криптографические протоколы, как RSA, за время, едва превосходящее время шифрования на классическом компьютере.

– **алгоритм Гровера поиска элемента в базе данных [32]**

Алгоритм использует итеративный процесс применения квантового оператора для увеличения амплитуды искомого элемента в суперпозиции всех элементов, что позволяет найти искомый элемент в неупорядоченном списке за время $O(\sqrt{N})$, где N — количество элементов в списке. Данный алгоритм демонстрирует квадратичное ускорение по сравнению с классическими алгоритмами поиска.

С тех пор как Фейнман выдвинул свою идею, квантовые вычисления претерпели значительные теоретические и экспериментальные усовершенствования [2–4; 21; 28; 33–37]. Разработка квантовых компьютеров стала возможной благодаря прогрессу в области квантовой оптики, сверхпроводимости, а также в результате открытий, сделанных в квантовой информатике и теории вычислительной сложности. В то же время, несмотря на значительные успехи в создании квантовых устройств, ряд технических проблем, таких как **декогерентность** [21; 22], ошибки в квантовых гейтах и сложность масштабирования, остаются нерешенными. Квантовая коррекция ошибок [38–40] и разработка надежных квантовых гейтов [26; 41] являются ключевыми направлениями исследований на пути к реализации полноценного квантового компьютера, описанного Фейнманом.

Фейнмановский квантовый компьютер представляет собой воплощение фундаментальных принципов квантовой теории в практических вычислительных устройствах и, несмотря на все трудности, продолжает оставаться одним из наиболее перспективных направлений в развитии современной вычислительной техники.

Роль квантовой запутанности в квантовых вычислениях

Квантовые вычисления представляют собой область информатики, которая исследует возможности применения квантовых явлений, таких как суперпозиция и квантовая запутанность, для представления и обработки информации на микроскопическом уровне, что теоретически позволяет достичь значительного ускорения в решении определенного класса вычислительных задач. Ключевым элементом квантовых вычислений является **квантовая запутанность** [27], которая играет важнейшую роль в функционировании квантовых гейтов и построении квантовых алгоритмов.

Явление квантовой запутанности возникает, когда группа частиц генерируется или взаимодействует таким образом, что квантовое состояние каждой из них не может быть описано независимо от состояний других, вне зависимости от расстояния между ними.

К примеру, множество всех максимально запутанных двухкубитных квантовых состояний задается состояниями Белла [27]

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), & \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), & \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle). \end{aligned}$$

Наличие квантовой запутанности позволяет производить операции над несколькими кубитами одновременно, что дает квантовым алгоритмам экспоненциальное ускорение в сравнении с их классическими аналогами. С другой стороны, многочастичная запутанность на сегодняшний день остается главным препятствием на пути к созданию масштабируемого квантового компьютера. Одной из фундаментальных проблем здесь является **проблема декогерентности** [21; 22] — процесса разрушения квантового состояния под воздействием внешнего окружения. В этом случае системы теряют свои квантовые свойства (в частности, запутанность), что приводит к "классическому" поведению кубитов и, как следствие, нарушению работы квантовых алгоритмов.

Внедрение широкого использования темных состояний — один из подходов к минимизации влияния декогерентности на квантовые системы, что критически важно для развития и практической реализации квантовых вычислительных технологий.

Конечномерные модели квантовой электродинамики

Конечномерные модели квантовой электродинамики (КЭД) являются ключом к компьютерному моделированию взаимодействия света и вещества. Они позволяют описывать динамику на уровне отдельных атомов и поля, при котором мы можем точно вычислять квантовые эффекты и непосредственно сравнивать их с экспериментом, в отличие, к примеру, от моделей на твердотельных структурах, где участвуют миллионы атомов (что само по себе приводит к невозможности использования точных вычислительных методов). В особенности, это преимущество конечномерных моделей проявляется при рассмотрении запутанных состояний, играющих важную роль в защите квантовой информации от декогерентности [38].

В статье 1963 года [8] Э. Джейнс и Ф. Каммингс предложили одну из таких моделей — модель, описывающую поведение атома, взаимодействующего с модой квантового электромагнитного поля. Удержание квантов возбуждения поля (фотонов) осуществляется при помощи двух зеркал, расположенных друг напротив друга и образующих тем самым своеобразную **полость**, или **оптический резонатор**.

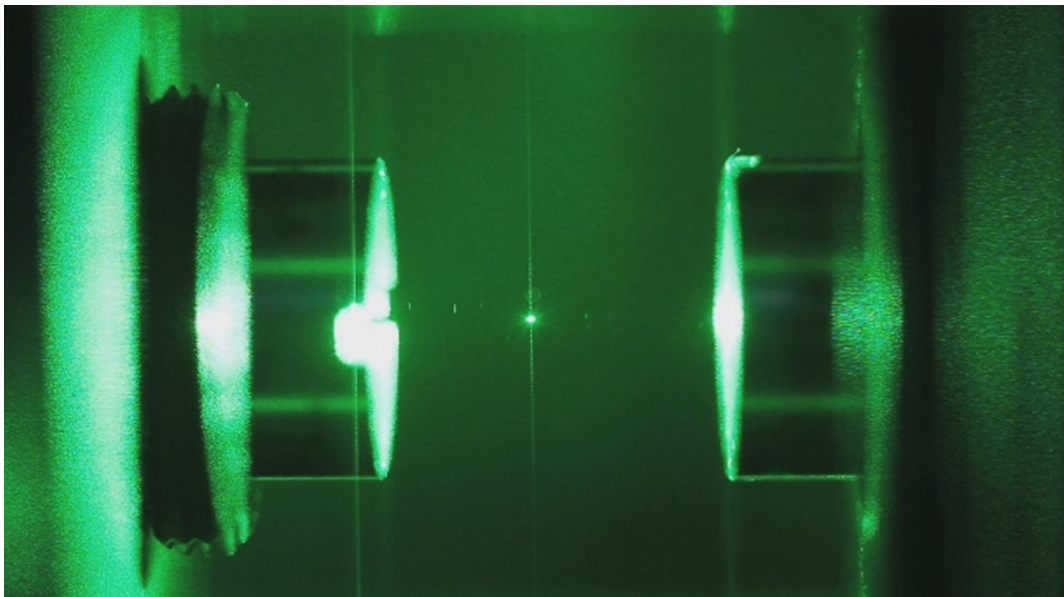


Рисунок 2 — Оптический резонатор

Двухуровневый¹ атом, помещенный в такую полость, может взаимодействовать с полем внутри нее: если энергия перехода между уровнями составляет $E = \hbar w_a$ и частота атомного перехода w_a примерно совпадает с частотой моды поля w_c , атом переходит из основного состояния $|0\rangle$ в возбужденное состояние

¹обычно используются два энергетических подуровня в атоме

|1⟩ и наоборот. В первом случае происходит поглощение фотона, во втором — его испускание атомом. Процесс поглощения фотона с его последующим испусканием обратно в полость называется **осцилляцией Раби** [42—44].

Для обеспечения времени жизни фотонов в полости, достаточного для нескольких десятков рабиевских осцилляций, нужна большая точность изготовления самих полостей и поддержание высокой степени вакуума в них. Кроме того, для удержания фотона в полости необходимо, чтобы создаваемое им электромагнитное поле порождало конструктивную интерференционную картину внутри полости: расстояние L между отражающими зеркалами должно быть кратно половине длины волны фотона $\lambda = 2\pi c/\omega_c$. Экспериментальные полости [45—48], как правило, имеют длину, равную $L = \lambda/2$, то есть порядка 7 мм, что соответствует длине полуволны атома Rb85, два подуровня которого используются чаще всего.

Появление одноатомных мазеров сделало возможным изучение взаимодействия отдельного атома с модой электромагнитного поля резонатора. Так, с его помощью в 1987 году Г. Ремпе, Г. Вальтеру и Н. Кляйну [45] удалось усилить связь атома с выбранной модой поля (с одновременным подавлением остальных мод) и экспериментально воссоздать динамику, описываемую моделью Джейнса-Каммингса.

Модель Джейнса-Каммингса [8—12], предложенная для двухуровневого атома в оптической полости, позже была обобщена на ансамбли таких атомов (модель Тависа-Каммингса [13—17]), а также на системы, включающие в себя несколько полостей, связанных между собой оптическим волокном (модели Джейнса-Каммингса-Хаббарда [49—51] и Тависа-Каммингса-Хаббарда [52—54]).

На сегодняшний день эксперименты с оптическими полостями [5—7] относятся к числу дорогостоящих, так как требуют зеркал с очень высокой степенью отражения (до нескольких десятков тысяч на одну рабиевскую осцилляцию), что достигается использованием сверхпроводящих материалов (к примеру, ниобия) и низких (гелиевых) температур.

Численные же эксперименты не ограничены в своем количестве, дают неоспоримые преимущества в вопросах гибкости настроек своих параметров. Поэтому компьютерное и суперкомпьютерное моделирование динамики квантовых состояний в оптических полостях является необходимым и важнейшим звеном в изучении теории сложных квантовых систем.

Модель Джейнса-Каммингса

Конечномерная модель квантовой электродинамики Джейнса-Каммингса описывает взаимодействие двухуровневого атома, помещенного в оптический резонатор, с одномодовым полем, частота которого близка к частоте атомного перехода.

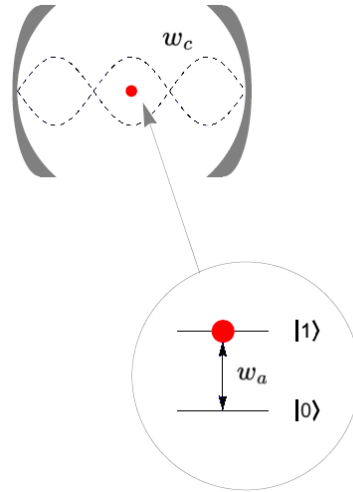


Рисунок 3 — Модель Джейнса-Каммингса:
двухуровневый атом в оптическом резонаторе

Атом взаимодействует с электромагнитным полем полости, испуская или поглощая фотон. При поглощении фотона атом возбуждается, при испускании — переходит в основное состояние.

Обозначим: $|0\rangle$ — основное состояние,
 $|1\rangle$ — возбужденное состояние атома.

Введем также следующие операторы:

a^+, a — операторы рождения и уничтожения фотонов резонаторной моды,
 σ^+, σ — атомные операторы возбуждения и релаксации.

$$\begin{aligned} a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle & \sigma^+|0\rangle &= |1\rangle & \sigma^+|1\rangle &= 0 \\ a|n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle & \sigma|1\rangle &= |0\rangle & \sigma|0\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Такая система описывается гамильтонианом Джейнса-Каммингса [8–12]:

$$H_{\text{JC}} = \underbrace{\hbar\omega_c a^+ a}_{H_{\text{field}}} + \underbrace{\hbar\omega_a \sigma^+ \sigma}_{H_{\text{atom}}} + \underbrace{g(\sigma^+ + \sigma)(a^+ + a)}_{H_{\text{interaction}}}, \quad (1)$$

\hbar — постоянная Планка,

w_c — частота фотонов в полости,

w_a — частота атомного перехода,

g — интенсивность взаимодействия двухуровневого атома с полем:

$$g = \sqrt{\frac{\hbar w_c}{2\varepsilon_0 V}} \cdot d,$$

V — эффективный объем полости,

ε_0 — электрическая постоянная,

d — проекция дипольного момента атома
на направление поляризации фотона,

$|w_c - w_a| \ll w_c + w_a$ — условие применимости модели.

Пренебрегая членами $\sigma^+ a^+$ и σa , не сохраняющими энергию, перепишем гамильтониан в следующем виде:

$$H_{\text{JC}} \approx H_{\text{JC}}^{\text{RWA}} = \underbrace{\hbar w_c a^+ a}_{H_{\text{field}}} + \underbrace{\hbar w_a \sigma^+ \sigma}_{H_{\text{atom}}} + \underbrace{g(\sigma^+ a + \sigma a^+)}_{H_{\text{interaction}}}. \quad (2)$$

Приближение (2) называется **приближением вращающейся волны (rotating wave approximation)**, или **RWA** [55–57], и имеет место в условиях слабого взаимодействия

$$\frac{g}{\hbar w_c} \approx \frac{g}{\hbar w_a} \ll 1, \quad (3)$$

при котором слагаемые $\sigma^+ a^+$ и σa быстро осциллируют, что делает их вклад в квантовую картину незначительным.

Модель Тависа-Каммингса

Рассмотрим N двухуровневых атомов, взаимодействующих с модой электромагнитного поля в полости оптического резонатора.

Такая система описывается гамильтонианом Тависа-Каммингса [13–17]:

$$H_{\text{TC}} = \hbar w_c a^+ a + \hbar \sum_{i=1}^N w_{a_i} \sigma_i^+ \sigma_i + \sum_{i=1}^N g_i (\sigma_i^+ + \sigma_i) (a^+ + a), \quad (4)$$

\hbar — постоянная Планка,

w_c — частота фотонов в полости,

w_{a_i} — частота перехода i -го атома,

g_i — интенсивность взаимодействия i -го атома с полем,

σ_i^+, σ_i — операторы возбуждения и релаксации i -го атома,

$|w_c - w_{a_i}| \ll w_c + w_{a_i} \quad \forall i = \overline{1, N}$ — условие применимости модели.

Аналогичным образом, пренебрегая слагаемыми $\sigma_i^+ a^+$ и $\sigma_i a$, не сохраняющими энергию, запишем гамильтониан ТС в приближении RWA [55–57]:

$$H_{\text{TC}}^{\text{RWA}} = \underbrace{\hbar w_c a^+ a}_{H_{\text{field}}} + \hbar \underbrace{\sum_{i=1}^N w_{a_i} \sigma_i^+ \sigma_i}_{H_{\text{atoms}}} + \underbrace{\sum_{i=1}^N g_i (\sigma_i^+ a + \sigma_i a^+)}_{H_{\text{interaction}}}, \quad (5)$$

$$\frac{g_i}{\hbar w_c} \approx \frac{g_i}{\hbar w_{a_i}} \ll 1 \quad \forall i = \overline{1, N}. \quad (6)$$

Приближение RWA [55–57] справедливо для слабого взаимодействия атомов с полем и позволяет либо решить задачу аналитически (в случае одного атома), либо существенно упростить компьютерное моделирование квантовой динамики (в случае нескольких атомов).

Для RWA-приближения [55–57] пространство квантовых состояний системы распадается на сумму ортогональных подпространств, инвариантных относительно гамильтониана и обладающих, к тому же, относительно малой размерностью, которая, в случае одинаковой интенсивности взаимодействия атомов с полем, растет линейно с их числом. В случае же различных интенсивностей взаимодействия этот рост становится экспоненциальным, что обуславливает необходимость применения суперкомпьютеров для установления характера квантовой динамики больших атомных ансамблей.

Модели Джейнса-Каммингса и Тависа-Каммингса могут иметь довольно широкое применение в силу их простоты. К примеру, с их помощью можно описывать переход атомных возбуждений по системе резонаторов, соединенных оптическим волокном, проводимость таких систем [58; 59] и связанные с ней эффекты, такие как квантовое бутылочное горлышко [60], эффект усиления проводимости дефазирующим шумом (dephasing assisted transport, или DAT) [61; 62] и квантовые блуждания на графах [63–66].

Модель Джейнса-Каммингса-Хаббарда

Модель Джейнса-Каммингса можно обобщить для случая двух и более взаимодействующих полостей: фотоны могут перемещаться между полостями посредством волноводов из оптического волокна.

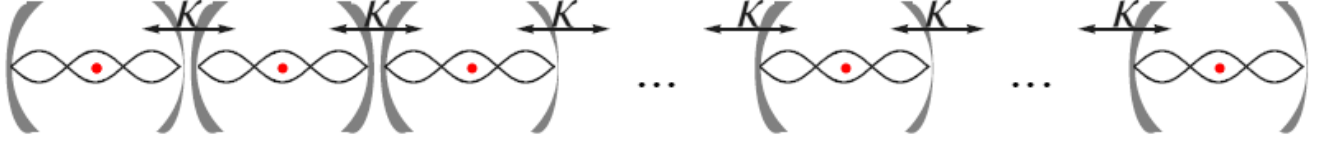


Рисунок 4 — Модель Джейнса-Каммингса-Хаббарда:
цепочка взаимодействующих полостей

Такая система описывается моделью Джейнса-Каммингса-Хаббарда [49—51] и ее гамильтониан имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{JCH}} = \sum_{j=1}^J & \left(\underbrace{\hbar\omega_{c_j} a_j^+ a_j}_{H_{\text{field}}} + \underbrace{\hbar\omega_{a_j} \sigma_j^+ \sigma_j}_{H_{\text{atom}}} + \underbrace{g_j(\sigma_j^+ + \sigma_j)(a_j^+ + a_j)}_{H_{\text{interaction}}} \right) \\
 & + \sum_{j=1}^{J-1} k_{j,j+1} (a_{j+1}^+ a_j + a_j^+ a_{j+1}), \quad (7)
 \end{aligned}$$

J — количество взаимодействующих полостей (члены с индексом j соответствуют j -й полости),

σ_j^+, σ_j — операторы возбуждения/релаксации атома в j -й полости,

$k_{j,j+1}$ — интенсивность перелета фотона между j -й и $(j+1)$ -й полостями.

В приближении вращающейся волны (RWA) [55—57] гамильтониан JCH определяется естественным образом:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{JCH}}^{\text{RWA}} = \sum_{j=1}^J & \left(\underbrace{\hbar\omega_{c_j} a_j^+ a_j}_{H_{\text{field}}} + \underbrace{\hbar\omega_{a_j} \sigma_j^+ \sigma_j}_{H_{\text{atom}}} + \underbrace{g_j(\sigma_j^+ a_j + \sigma_j a_j^+)}_{H_{\text{interaction}}} \right) \\
 & + \sum_{j=1}^{J-1} k_{j,j+1} (a_{j+1}^+ a_j + a_j^+ a_{j+1}). \quad (8)
 \end{aligned}$$

Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда

Модель Тависа-Каммингса также обобщается на случай нескольких полостей, каждая из которых может содержать один или более атомов.

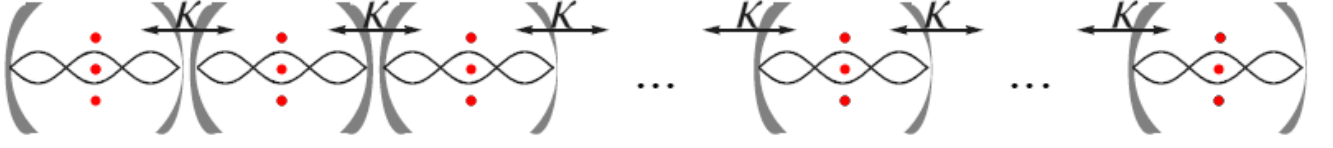


Рисунок 5 — Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда:
цепочка взаимодействующих полостей

Такая система описывается моделью Тависа-Каммингса-Хаббарда [52–54] и ее гамильтониан имеет следующий вид:

$$H_{\text{TCH}} = \sum_{j=1}^J \left(\underbrace{\hbar\omega_{c_j} a_j^\dagger a_j}_{H_{\text{field}}} + \underbrace{\hbar \sum_{j_i=1}^{N_j} \omega_{a_{j_i}} \sigma_{j_i}^+ \sigma_{j_i}}_{H_{\text{atoms}}} + \underbrace{\sum_{j_i=1}^{N_j} g_{j_i} (\sigma_{j_i}^+ + \sigma_{j_i}) (a_j^\dagger + a_j)}_{H_{\text{interaction}}} \right) + \sum_{j=1}^{J-1} k_{j,j+1} (a_{j+1}^\dagger a_j + a_j^\dagger a_{j+1}), \quad (9)$$

J – количество взаимодействующих полостей (члены с индексом j соответствуют j -й полости),

N_j – количество атомов в j -й полости,

$\sigma_{j_i}^+, \sigma_{j_i}$ – операторы возбуждения/релаксации i -го атома в j -й полости,

$k_{j,j+1}$ – интенсивность перелета фотона между j -й и $(j+1)$ -й полостями.

В приближении вращающейся волны (RWA) [55–57] гамильтониан ТСН определяется естественным образом:

$$H_{\text{TCH}}^{\text{RWA}} = \sum_{j=1}^J \left(\underbrace{\hbar\omega_{c_j} a_j^\dagger a_j}_{H_{\text{field}}} + \underbrace{\hbar \sum_{j_i=1}^{N_j} \omega_{a_{j_i}} \sigma_{j_i}^+ \sigma_{j_i}}_{H_{\text{atoms}}} + \underbrace{\sum_{j_i=1}^{N_j} g_{j_i} (\sigma_{j_i}^+ a_j + \sigma_{j_i} a_j^\dagger)}_{H_{\text{interaction}}} \right) + \sum_{j=1}^{J-1} k_{j,j+1} (a_{j+1}^\dagger a_j + a_j^\dagger a_{j+1}). \quad (10)$$

Открытая квантовая система. Основное квантовое уравнение.

Чистое квантовое состояние изолированной системы описывается комплекснозначной **волновой функцией** $|\Psi\rangle$. Оно характеризуется заданием полного набора возможных значений динамических переменных, определяющих состояние системы.

Временная эволюция волновой функции чистого состояния системы описывается уравнением Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = H\Psi(r,t), \quad (11)$$

где

\hbar — постоянная Планка,

$\Psi(r,t)$ — волновая функция,

H — гамильтониан системы, определяющий ее полную энергию.

В действительности же реальная квантовая система тесно окружена частицами и электромагнитным полем различных мод. В частности, отметим, что в рамках описанных выше конечномерных моделей КЭД атом в полости взаимодействует с фотоном весьма ограниченное время, поскольку время жизни фотона в полости невелико. Взаимодействие с внешним окружением приводит к смешанному состоянию квантовой системы, которое не описывается вектором состояния $|\Psi\rangle$. Для его описания используется **матрица плотности**, формализм которой был предложен Л. Ландау, Дж. фон Нейманом и Ф. Блохом [67–69]. Данный формализм позволяет описывать не только чистые, но и смешанные состояния системы, представляющие собой статистическую смесь различных чистых состояний.

Открытые квантовые системы [22] — это квантовые системы, которые могут обмениваться энергией и веществом с внешним окружением. Такие системы не могут быть полностью описаны уравнением Шредингера (11): декогеренция и диссипация, вызванные взаимодействием с окружением, приводят к соответствующей потере системой квантовых свойств и энергии. Для описания динамики открытых квантовых систем требуется более сложный математический аппарат, такой как **основное квантовое уравнение** [22], которое

учитывает диссипативные процессы и декогеренцию:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \mathcal{L}(\rho), \quad \rho(0) = \rho_0, \\ \mathcal{L}(\rho) &= \sum_k l_k \left(L_k \rho L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{L_k^\dagger L_k, \rho\} \right), \end{aligned} \quad (12)$$

где L_k — операторы Линдблада, описывающие взаимодействие системы с окружением (так называемыми **факторами декогеренции**), l_k — интенсивности соответствующих факторов декогеренции. Квадратные скобки означают коммутатор, фигурные скобки — антикоммутатор.

В отсутствие взаимодействия с окружением временная эволюция матрицы плотности $\rho_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, связанной с чистым состоянием $|\Psi\rangle$, задается уравнением фон Неймана:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho], \quad \rho(0) = \rho_0. \quad (13)$$

Это уравнение описывает эволюцию замкнутой квантовой системы, взаимодействие которой с внешним окружением отсутствует, либо пренебрежимо мало. Оно эквивалентно уравнению Шредингера (11) и легко выводится из него.

Уравнение (12) называется **марковским основным кинетическим уравнением в форме Коссаковского-Линдблада-Глаубера-Сударшана** [22; 70; 71]. Оно является обобщением уравнения (13) и описывает изменение во времени матрицы плотности системы, взаимодействующей со стационарной средой, не имеющей долговременной памяти.

Задача компьютерного моделирования — нахождение численного решения $\rho(t)$ уравнения (12), которое можно произвести с использованием различных численных методов, включая как простые (например, метод Эйлера), так и более точные (например, метод Рунге-Кутты).

Анализ открытых квантовых систем играет ключевую роль во многих современных квантовых технологиях, включая квантовые вычисления и квантовую криптографию [72], где контролируемое взаимодействие с окружением используется для защиты квантовой информации от декогеренции. Открытые квантовые системы являются объектом активного исследования в современной физике. Их изучение позволяет понять квантовые явления, возникающие в условиях реального взаимодействия с окружающей средой, и уточнить наше представление об устройстве сложных квантовых систем.

Темные состояния

Особый интерес представляет описание так называемых **темных состояний** [23; 73] атомных ансамблей модели Тависа-Каммингса.

Атомный ансамбль, находящийся в **темном состоянии**, не взаимодействует с полем, и потому способен сохранять свою энергию, не испуская ее в виде фотонов. Простейший вид **темного состояния** — состояние

$$\frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (14)$$

именуемое также **синглетом**.

Темные состояния не подвержены декогерентности, поэтому изучение их структуры и практическое получение важны для развития нанотехнологий и квантовых вычислений в целом. В главе 4 настоящей работы предложен достаточно простой в технической реализации метод оптического отбора темных состояний, основанный на томографии электромагнитного поля вне полости. Алгебраическое описание темных состояний ансамблей многоуровневых атомов можно найти в работе [23], однако их явный вид был найден только для двухуровневых атомов. В работе [73] Ю. Ожиговым было доказано, что размерность темного подпространства состояний n двухуровневых атомов равна

$$\dim(D_n^2) = \begin{cases} C_n^k - C_n^{k-1} & \text{при } n = 2k, \\ 0 & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (15)$$

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

$$\frac{1}{2^{n/4}} \bigotimes_{j=1}^{n/2} (|01\rangle_j - |10\rangle_j), \quad (16)$$

где индекс $j = 1, \dots, n/2$ означает номер пары в произвольном разбиении группы из n атомов. Для трехуровневых атомов имеется лишь гипотеза о структуре темных состояний, которая была численно подтверждена для весьма ограниченного числа атомов в рамках данной работы (глава 5).

Темные состояния широко используются в квантовой криптографии: использование синглетных состояний дает дополнительные преимущества в обеспечении устойчивости квантовых протоколов. Так, например, ключевое место в построении протокола АКМ2017 [72] занимает подготовка синглетного состояния вида (14).

Новизна работы

Собственные состояния гамильтониана Тависа-Каммингса исследовались в диссертации Тависа [13] 1968 года. Данное им описание использует уже устаревшие численные методы, оно весьма громоздко и не дает ответа на вопрос ни о явной структуре, ни о способах практического получения таких состояний.

В 2018-2020 годах была доказана теорема [73], определяющая структуру и размерность темного подпространства состояний ансамблей двухуровневых атомов. Для трехуровневых атомов предложена схожая гипотеза, однако, к настоящему времени она не получила строгого доказательства.

Новизна данного круга задач состоит в том, что прямые методы линейной алгебры требуют объемов оперативной памяти, растущих экспоненциально с ростом частиц в ансамбле, поэтому такие методы не могут быть применены для практически значимых задач даже при их суперкомпьютерной реализации. Здесь нужны новые математические и программные средства, учитывающие физический смысл задач и специфику квантовых вычислений.

В данной диссертации был разработан и программно реализован специальный алгоритм для суперкомпьютера, с помощью которого численно была определена размерность темного подпространства состояний ансамблей, состоящих из двух десятков трехуровневых атомов.

Представленный в работе алгоритм получения темных состояний многоуровневых атомов методом оптического отбора — новый. Он существенно превосходит ранее предложенный Ю. И. Ожиговым метод, основанный на эффекте Штарка-Зеемана [74; 75]. Метод оптического отбора, в силу его технической простоты, можно использовать для получения темных состояний строго определенного вида.

Математические и программные методы позволили детально оценить качество запутывающего квантового гейта coCSign , предложенного в 2020 году Ю. И. Ожиговым [76]. Данный гейт использует одну вспомогательную оптическую полость вместо двух как в гейте, представленном Х. Азумой [25] (2010 год). В близкой по идеологии работе Азумы [25] также нет полного анализа влияния декогерентности как и оценки неточности гейта даже для идеальных полостей, что сделано в данной работе.

Апробация работы

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

R1. *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)

R2. *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, Москва, Россия, 2 апреля 2024 (научный семинар)

R3. *Кулагин А. В.* Компьютерное моделирование квантовых эффектов в конечномерных моделях // Физико-технологический институт К. А. Валиева РАН, Москва, Россия, 23 ноября 2023 (научный семинар)

R4. *Кулагин А. В., Афанасьев В. И., Ли В., Кэли Чж., Мяо Х.-Х., 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

R5. *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

R6. *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

R7. *Kulagin A., Ozhigov Y.* Realization of algorithm GSA on the asynchronous atomic excitations // Quantum Informatics 2021, Москва, Россия, 30 марта - 4 апреля 2021

R8. *Ожигов Ю. И., Кулагин А. В., Ли В., Кэли Чж., Мяо Х.-Х., Дюль Р.* Управление атомными ансамблями в модели Тависа-Каммингса-Хаббарда //

Тихоновские чтения 2020, МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия, 26-31 октября 2020

R9. *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

R10. *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.

Публикации

Основные положения и выводы диссертационного исследования в полной мере изложены в 7 печатных работах, из них 7 статей в рецензируемых журналах.

Личный вклад автора

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 [А4] 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.

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.

Глава 1. Компьютерное моделирование конечномерных квантовых систем

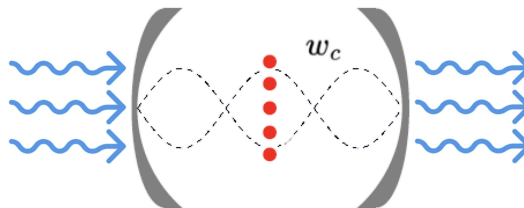
1.1 Моделирование неунитарной динамики

В данной главе будет представлено численное моделирование динамики конечномерных квантовых систем на примере системы Тависа-Каммингса [13–17]. Аналогичным образом можно производить моделирование систем Джейнса-Каммингса-Хаббарда [49–51] и Тависа-Каммингса-Хаббарда [52–54] с множеством взаимодействующих полостей.

Отдельное внимание будет уделено

- ◇ построению гамильтониана,
- ◇ построению операторов Линдблада, необходимых для моделирования неунитарной динамики,
- ◇ численным методам моделирования квантовой динамики и сравнительному анализу их эффективности.

Рассмотрим задачу моделирования квантовой динамики системы Тависа-Каммингса: двухуровневые атомы Rb85 удерживаются в полости оптического резонатора, допускающего приток и отток одиночных фотонов.



Входные параметры:

- n – количество атомов в полости,
- g – интенсивность взаимодействия атомов с полем,
- ω_c – частота фотонов,
- ω_a – частота атомного перехода,

- K – размерность стока,¹
- E_{\min} , E_{\max} – минимальные и максимальные значения энергии системы (число свободных фотонов в полости + число атомных возбуждений).

Пусть, для примера

$$\mathbf{n} = \mathbf{3},$$

$$E_{\min} = 1, E_{\max} = 3,$$

$$K = 2.$$

Тогда

В отсутствие стока

Базисные состояния системы:

$$|3\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}$$

$$|2\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}$$

$$|2\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}$$

$$|1\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}$$

(всевозможные сценарии поглощения/испускания фотонов).

Гамильтониан системы в приближении RWA [55–57] имеет вид:

$$H_{\text{TC}}^{\text{RWA}} = \hbar\omega_c a^+ a + \hbar\omega_a \sum_{i=1}^n \sigma_i^+ \sigma_i + \sum_{i=1}^n g(a^+ \sigma_i + a \sigma_i^+).$$

Заполнение матрицы гамильтониана можно произвести как исходя непосредственно из его формулы (с тензорным домножением на единичные матрицы, которые соответствуют отсутствующим фотонным и атомным компонентам), так и исходя из действия операторов a , a^+ , σ , σ^+ на базисные состояния системы:

$$a\sigma_2^+ |3\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}} = \sqrt{3}|2\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}},$$

$$a^+ \sigma_1 |1\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}} = \sqrt{2}|2\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}},$$

и т.д.

¹Рассматриваемый здесь и далее необратимый «сток», выступающий в качестве внешнего резервуара конечной размерности, – не физический объект, а математический прием, используемый для удобного построения гамильтониана, операторов Линдблада и расчета квантовой динамики

Операторы рождения/уничтожения фотона:

$$a^+ = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}} \\ |1\rangle_{\text{ph}} \\ |2\rangle_{\text{ph}} \\ \dots \\ |m-1\rangle_{\text{ph}} \\ |m\rangle_{\text{ph}} \end{array} \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}} \quad |1\rangle_{\text{ph}} \quad |2\rangle_{\text{ph}} \quad \dots \quad |m-1\rangle_{\text{ph}} \quad |m\rangle_{\text{ph}} \\ \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{m} & 0 \end{array} \right) \end{array} \quad |i\rangle_{\text{ph}} \rightarrow \sqrt{i+1}|i+1\rangle_{\text{ph}},$$

$$a = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}} \\ |1\rangle_{\text{ph}} \\ |2\rangle_{\text{ph}} \\ \dots \\ |m-1\rangle_{\text{ph}} \\ |m\rangle_{\text{ph}} \end{array} \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}} \quad |1\rangle_{\text{ph}} \quad |2\rangle_{\text{ph}} \quad \dots \quad |m-1\rangle_{\text{ph}} \quad |m\rangle_{\text{ph}} \\ \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \sqrt{m} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{array} \right) \end{array} \quad |i\rangle_{\text{ph}} \rightarrow \sqrt{i}|i-1\rangle_{\text{ph}}.$$

Операторы возбуждения/релаксации атома:

$$\sigma^+ = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{at}} \quad |1\rangle_{\text{at}} \\ \left(\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{array} \right) \end{array} \quad |0\rangle_{\text{at}} \rightarrow |1\rangle_{\text{at}} \text{ (возбуждение атома),}$$

$$\sigma = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{at}} \quad |1\rangle_{\text{at}} \\ \left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{array} \right) \end{array} \quad |1\rangle_{\text{at}} \rightarrow |0\rangle_{\text{at}} \text{ (релаксация атома).}$$

Построенный таким образом гамильтониан будет иметь вид:

$$H_{\text{TC}}^{\text{RWA}} = \begin{array}{c} |3\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}} \\ |2\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}} \\ |2\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{array}{c} |3\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}} \quad |2\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}} \quad |2\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}} \quad |1\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}} \\ \left(\begin{array}{cccc} 3\hbar\omega_c & \sqrt{3}g & \sqrt{3}g & 0 \\ \sqrt{3}g & 2\hbar\omega_c + \hbar\omega_a & 0 & \sqrt{2}g \\ \sqrt{3}g & 0 & 2\hbar\omega_c + \hbar\omega_a & \sqrt{2}g \\ 0 & \sqrt{2}g & \sqrt{2}g & \hbar\omega_c + 2\hbar\omega_a \end{array} \right) \end{array}.$$

С добавлением стока

Добавим к базисным состояниям системы состояние стока $|k\rangle_s$.

Тогда базисные состояния $|i\rangle_{\text{ph}}|j_1 \dots j_n\rangle_{\text{at}}|k\rangle_s$, где

$|i\rangle_{\text{ph}}$ – фоковское состояние поля (число фотонов в полости),

$|j_p\rangle_{\text{at}}$ – состояние p -го атома ($j = \overline{0,1}$),

$|k\rangle_s$ – количество фотонов в стоке,

наряду с компонентами гамильтониана, можно ранжировать по уровню населенности стока.

Определим последовательно базисы и соответствующие им гамильтонианы для состояний, содержащих в стоке с некоторой вероятностью $0 \leq p \leq 1$ от 0 до K фотонов включительно.

Построение $H_0^{\text{RWA}}, \dots, H_K^{\text{RWA}}$:

1) H_0^{RWA}

0 фотонов в стоке

число фотонов и атомных возбуждений в полости: $E_{\text{max}} - 0 = 3$

Базисные состояния:

$|3\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s$

$|2\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s$

$|2\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s$

$|1\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s$

$$H_0^{\text{RWA}} = \begin{matrix} & & |3\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s & |2\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s & |2\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s & |1\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s \\ \begin{matrix} |3\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s \\ |2\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s \\ |2\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s \\ |1\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}|0\rangle_s \end{matrix} & \left(\begin{matrix} 3\hbar\omega_c & \sqrt{3}g & \sqrt{3}g & 0 \\ \sqrt{3}g & 2\hbar\omega_c + \hbar\omega_a & 0 & \sqrt{2}g \\ \sqrt{3}g & 0 & 2\hbar\omega_c + \hbar\omega_a & \sqrt{2}g \\ 0 & \sqrt{2}g & \sqrt{2}g & \hbar\omega_c + 2\hbar\omega_a \end{matrix} \right) \end{matrix}$$

2) H_1^{RWA}

1 фотон в стоке

число фотонов и атомных возбуждений в полости: $E_{\text{max}} - 1 = 2$

Базисные состояния:

$|2\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|1\rangle_s$

$$\begin{aligned} &|1\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} \\ &|1\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} \\ &|0\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} \end{aligned}$$

$$H_1^{RWA} = \begin{array}{c} |2\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} \end{array} \begin{array}{cccc} |2\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} & |1\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} & |1\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} & |0\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} \\ \left(\begin{array}{cccc} 2\hbar\omega_c & \sqrt{2}g & \sqrt{2}g & 0 \\ \sqrt{2}g & \hbar\omega_c + \hbar\omega_a & 0 & g \\ \sqrt{2}g & 0 & \hbar\omega_c + \hbar\omega_a & g \\ 0 & g & g & 2\hbar\omega_a \end{array} \right) \end{array}$$

3) H_2^{RWA}

2 фотона в стоке

число фотонов и атомных возбуждений в полости: $E_{\text{max}} - 2 = 1$

Базисные состояния:

$$\begin{aligned} &|1\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \\ &|0\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \\ &|0\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \end{aligned}$$

$$H_2^{RWA} = \begin{array}{c} |1\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \end{array} \begin{array}{ccc} |1\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} & |0\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} & |1\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \\ \left(\begin{array}{ccc} \hbar\omega_c & g & g \\ g & \hbar\omega_a & 0 \\ g & 0 & \hbar\omega_a \end{array} \right) \end{array}$$

В итоге, для $E_{\text{max}} = 3$, $E_{\text{min}} = 1$, $K = 2$ (размерность стока) получаем блочно-диагональный вид гамильтониана H_{TC}^{RWA} всей системы:

$$H_{TC}^{RWA} = \begin{pmatrix} \boxed{H_0^{RWA}} & & \\ & \boxed{H_1^{RWA}} & \\ & & \boxed{H_2^{RWA}} \end{pmatrix},$$

где H_k^{RWA} — гамильтониан с состояниями стока $|k\rangle_{\text{s}}$, $k = \overline{0, K}$.

Объединяя базисы из **1)**, **2)**, **3)**, получаем базис всей системы:

$$\begin{array}{ccc} |3\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|0\rangle_{\text{s}} & |2\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} & |1\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \\ |2\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|0\rangle_{\text{s}} & |1\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} & |0\rangle_{\text{ph}}|01\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \\ |2\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|0\rangle_{\text{s}} & |1\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} & |0\rangle_{\text{ph}}|10\rangle_{\text{at}}|2\rangle_{\text{s}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}|0\rangle_{\text{s}} & |0\rangle_{\text{ph}}|11\rangle_{\text{at}}|1\rangle_{\text{s}} & \end{array}$$

Операторы Линдблада

Модель окружения квантовой системы может быть полностью описана ее гамильтонианом (оператором энергии H) и операторами Линдблада L_i . Интенсивность факторов декогеренции задается коэффициентами l_i .

1) Приток фотонов

Приток фотонов реализуется оператором a^+ :

$$a^+ = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}} \\ |1\rangle_{\text{ph}} \\ |2\rangle_{\text{ph}} \\ \dots \\ |m-1\rangle_{\text{ph}} \\ |m\rangle_{\text{ph}} \end{array} \begin{pmatrix} |0\rangle_{\text{ph}} & |1\rangle_{\text{ph}} & |2\rangle_{\text{ph}} & \dots & |m-1\rangle_{\text{ph}} & |m\rangle_{\text{ph}} \\ \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{m} & 0 \end{array} \right) \end{pmatrix} |i\rangle_{\text{ph}} \rightarrow \sqrt{i+1}|i+1\rangle_{\text{ph}}.$$

Соответствующий оператор Линдблада:

$$L_{\text{in}} = \begin{array}{c} \dots \\ |i+1\rangle_{\text{ph}}|j_1\dots j_n\rangle_{\text{at}}|k\rangle_{\text{s}} \\ \dots \end{array} \begin{pmatrix} \dots & |i\rangle_{\text{ph}}|j_1\dots j_n\rangle_{\text{at}}|k\rangle_{\text{s}} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \sqrt{i+1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

В позициях, отличных от указанных, стоят нули.

Состояние атомов и состояние стока не меняются, в полости происходит увеличение числа фотонов.

2) Отток фотонов (вылет фотонов за пределы полости)

а) Подход №1. Безразмерный сток.

Гамильтониан системы строится в базисе $|i\rangle_{\text{ph}}|j_1\dots j_n\rangle_{\text{at}}$ без выделенного состояния стока $|k\rangle_{\text{s}}$ с суммой возбуждений «поле+атомы» в диапазоне $[E_{\text{min}}, E_{\text{max}}]$.

Улет фотонов реализуется оператором a [22; 84]:

$$a = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}} \\ |1\rangle_{\text{ph}} \\ |2\rangle_{\text{ph}} \\ \dots \\ |m-1\rangle_{\text{ph}} \\ |m\rangle_{\text{ph}} \end{array} \begin{pmatrix} |0\rangle_{\text{ph}} & |1\rangle_{\text{ph}} & |2\rangle_{\text{ph}} & \dots & |m-1\rangle_{\text{ph}} & |m\rangle_{\text{ph}} \\ \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \sqrt{m} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{array} \right) \end{pmatrix} \quad |i\rangle_{\text{ph}} \rightarrow \sqrt{i}|i-1\rangle_{\text{ph}}.$$

Соответствующий оператор Линдблада:

$$L_{\text{out}} = \begin{array}{c} \dots \\ |i\rangle_{\text{ph}}|j_1\dots j_n\rangle_{\text{at}} \\ \dots \end{array} \begin{pmatrix} \dots & |i+1\rangle_{\text{ph}}|j_1\dots j_n\rangle_{\text{at}} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \sqrt{i+1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

б) Подход №2. Сток ограниченной размерности ($K > 0$).

Гамильтониан строится в базисе $|i\rangle_{\text{ph}}|j_1\dots j_n\rangle_{\text{at}}|k\rangle_{\text{s}}$ с суммой возбуждений «поле+атомы» $\in [E_{\text{min}}; E_{\text{max}}]$.

Подобная форма организации базиса может быть удобной для определения вероятности того, что полость покинуло ровно/не более/не менее k фотонов.

Утечка фотонов в данном случае реализуется оператором aa_s^+ : уничтожение фотона в полости и рождение фотона в стоке. Состояние атомов при этом не меняется.

Соответствующий оператор Линдблада:

$$L_{\text{out}} = \begin{array}{c} \dots \\ |i\rangle_{\text{ph}}|j_1\dots j_n\rangle_{\text{at}}|k+1\rangle_{\text{s}} \\ \dots \end{array} \begin{pmatrix} \dots & |i+1\rangle_{\text{ph}}|j_1\dots j_n\rangle_{\text{at}}|k\rangle_{\text{s}} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \sqrt{i+1} \cdot \sqrt{k+1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Так, два оператора Линдблада $L = \{L_{\text{in}}, L_{\text{out}}\}$ с соответствующими интенсивностями $l_{\text{in}}, l_{\text{out}}$ реализуют приток и отток фотонов из полости.

Решение основного квантового уравнения

Выпишем основное квантовое уравнение (12) [22; 70; 71]:

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] + iL(\rho) = H\rho - \rho H + iL(\rho),$$

$$\rho(0) = \rho_0,$$

$$L(\rho) = \sum_i l_i \left(L_i \rho L_i^+ - \frac{1}{2} \left\{ L_i^+ L_i, \rho \right\} \right) = \sum_i l_i \left(L_i \rho L_i^+ - \frac{1}{2} \left(L_i^+ L_i \rho + \rho L_i^+ L_i \right) \right).$$

Оператор эволюции

$$U_{dt} = \exp\left(-\frac{iHdt}{\hbar}\right)$$

вычисляется путем диагонализации гамильтониана H и последующего вычисления матричной экспоненты:

для любой эрмитовой матрицы A существует спектральное разложение $A = VDV^*$, где V — унитарная матрица, а D — вещественная диагональная. Поскольку собственные значения и собственные вектора не зависят от базиса, на диагонали D будут стоять собственные значения матрицы A , а матрица V будет состоять из ее собственных векторов.

Кроме того, если

$$A = V \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} V^*,$$

то

$$\exp(A) = V \begin{pmatrix} \exp(\lambda_1) & & \\ & \ddots & \\ & & \exp(\lambda_n) \end{pmatrix} V^*.$$

1.2 Сравнительный анализ численных методов

Временное уравнение Шредингера $i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi$ является задачей Коши для ОДУ первого порядка

$$\frac{dy}{dt} = f(y)$$

с начальным условием $y(t_0) = y_0$.

1. Метод Эйлера

Явная схема Эйлера аппроксимирует решение следующим образом:

$$y_{i+1} = y_i + hf(y_i),$$

где:

- y_i – приближенное значение решения в момент времени t_i ,
- y_{i+1} – приближенное значение решения в момент времени $t_{i+1} = t_i + h$,
- h – шаг по времени.

Численное решение основного квантового уравнения (12) опирается на прямую итерационную схему. Каждый шаг по времени состоит из двух этапов:

$$\tilde{\rho}(t + dt) = \rho(t) + dt \cdot \frac{i}{\hbar} \cdot L(\rho(t)),$$

$$\left(\begin{array}{c} \text{вклад окружения открытой квантовой системы,} \\ \text{неунитарная динамика} \end{array} \right)$$

$$\rho(t + dt) = U_{dt} \cdot \tilde{\rho}(t + dt) \cdot U_{dt}^*$$

(унитарная динамика)

В практическом плане: на каждом шаге dt по времени необходимо проверять единичность следа матрицы плотности $\rho(t)$: $|1 - \text{Tr}\rho(t)| < \text{eps}$ (отклонение **eps** выбирается опционально). Допустимый шаг по времени также можно выбрать из оценки погрешности самого метода: метод Эйлера имеет погрешность $O(dt)$ на шаге и погрешность $O(dt^2)$ в целом.

Существенным недостатком метода Эйлера является его значительная погрешность с тенденцией к накоплению: с увеличением количества шагов по времени расхождение с истинным значением будет стремительно нарастать. Тем не менее, при достаточно малом временном шаге метод Эйлера работает достаточно быстро, зачастую не требует распараллеливания и позволяет качественно выявлять такие эффекты, как квантовое бутылочное горлышко.

2. Метод Рунге-Кутты

Схема Рунге-Кутты 4-го порядка является явным одношаговым методом численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. Она аппроксимирует решение задачи Коши

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0.$$

Формально, это модифицированный и исправленный метод Эйлера, представляющий собой разностную схему более высокого порядка точности. Схема Рунге-Кутты основана на методе взвешенного среднего наклонов в нескольких точках интервала $[t_i, t_{i+1}]$ и аппроксимирует решение ОДУ следующей формулой:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

где

- $k_1 = f(t_i, y_i)$,
- $k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right)$,
- $k_3 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right)$,
- $k_4 = f(t_i + h, y_i + hk_3)$,
- h – шаг по времени.

Параллельная реализация итерационного алгоритма в данном случае возможна только посредством параллельного умножения матриц. При этом данный метод требует четырех вычислений функции правой части на каждом шаге, что делает его менее эффективным, чем методы более низкого порядка. В особенности это проявляется для матриц большой размерности, а также в тех случаях, когда высокая точность вычислений не является критичной.

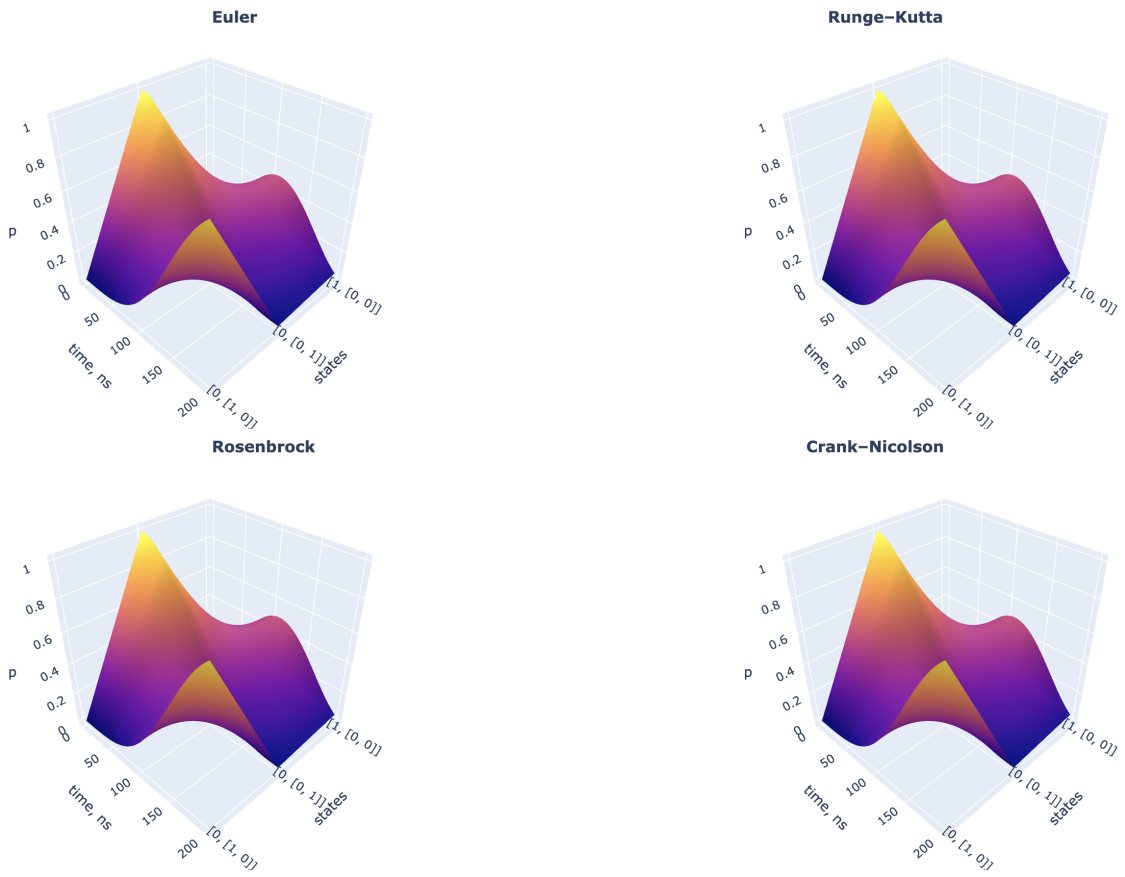
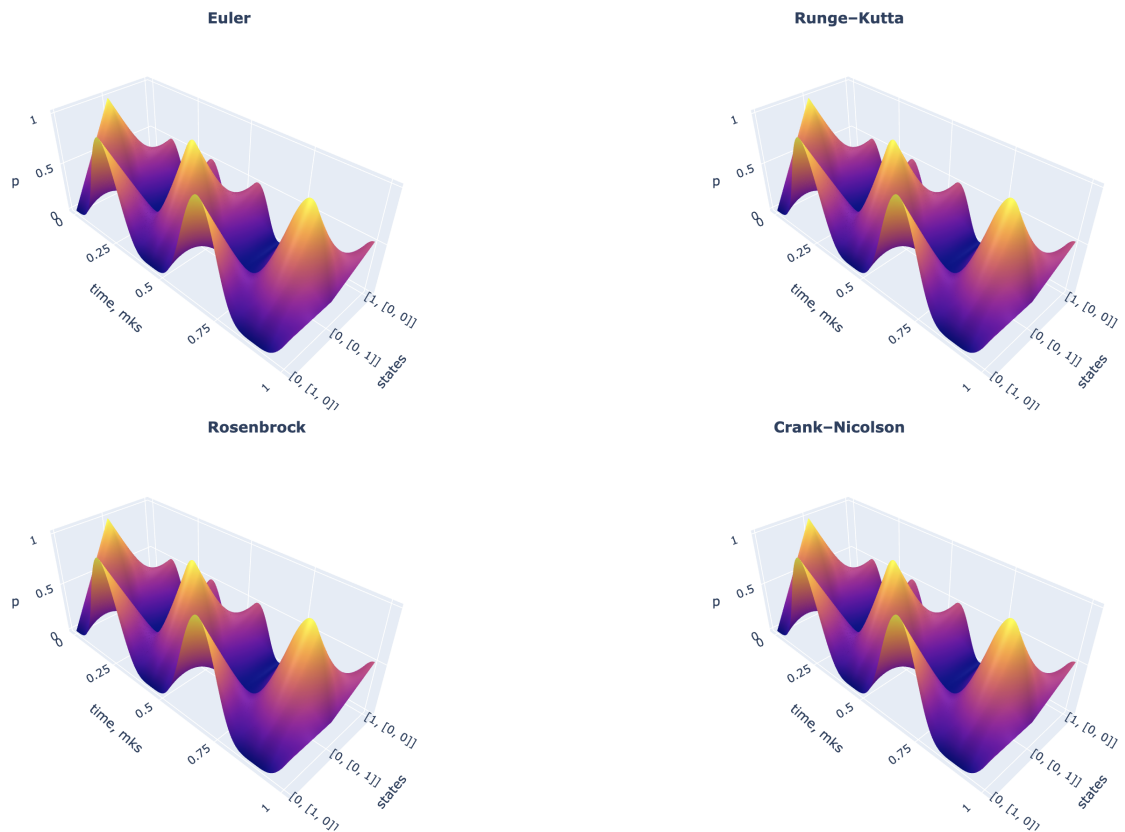
3. Метод Розенброка

Метод Розенброка относительно прост в реализации, обладает вторым порядком точности по времени, что обеспечивает баланс между точностью и вычислительной сложностью. Это означает, что погрешность на шаге пропорциональна $O(dt^3)$, а погрешность в целом — $O(dt^2)$. Одно из ключевых преимуществ метода Розенброка — его устойчивость, что, в частности, позволяет использовать относительно большие шаги по времени при решении уравнения Шредингера. Если гамильтониан не зависит от времени, оператор эволюции в методе Розенброка вычисляется только один раз, что существенно повышает вычислительную производительность. Некоторые из его модификаций [85] позволяют корректировать шаг итерирования.

4. Метод Кранка-Николсона

Метод Кранка-Николсона, будучи неявным методом конечных разностей, обладает рядом преимуществ при решении дифференциальных уравнений. В отличие от многих явных методов, имеющих только первый порядок точности по времени, Кранк-Николсон обеспечивает второй порядок, что означает меньшую погрешность при том же шаге по времени. Это позволяет использовать большие шаги, экономя вычислительные ресурсы без существенной потери точности. Для линейных задач метод Кранка-Николсона безусловно устойчив. Это означает, что решение не будет неограниченно расти независимо от выбранного шага по времени. Однако, стоит отметить, что выбор слишком большого шага может привести к снижению точности и «размыванию» решения.

По итогам многократных численных экспериментов было установлено, что выбор шага dt в схеме Эйлера, соответствующего допустимой погрешности нормы вектора волновой функции (погрешности единичности следа матрицы плотности в случае неунитарной динамики) $\epsilon_{ps} \approx 10^{-3}-10^{-4}$ обеспечивает необходимую точность вычислений. Дальнейшее его уменьшение не приводит к статистически значимому улучшению картины квантовой динамики. Ниже приведены результаты моделирования унитарной динамики системы Тависа-Каммингса: 2 атома в полости, начальное состояние системы: $[0, [0, 1]]$ — вакуумное состояние поля, первый атом — основном состоянии, второй — в возбужденном. Графики демонстрируют, что в данном случае модель нечувствительна к погрешностям, устраняемым более точными методами.

Рисунок 1.1 — $dt = 1 \text{ ns}$, $T = 200 \text{ ns}$ Рисунок 1.2 — $dt = 1 \text{ ns}$, $T = 1 \text{ mks}$

Сравнительный анализ показал, что наибольшей вычислительной эффективностью обладает метод Эйлера при достаточно малом временном шаге. Использование же метода Рунге-Кутты в случае больших систем приводит к кратному увеличению времязатратности вычислений. Даваемый же им прирост точности не влияет на интерпретацию результатов в контексте квантовой механики, что делает его использование в подобных случаях неоправданным.

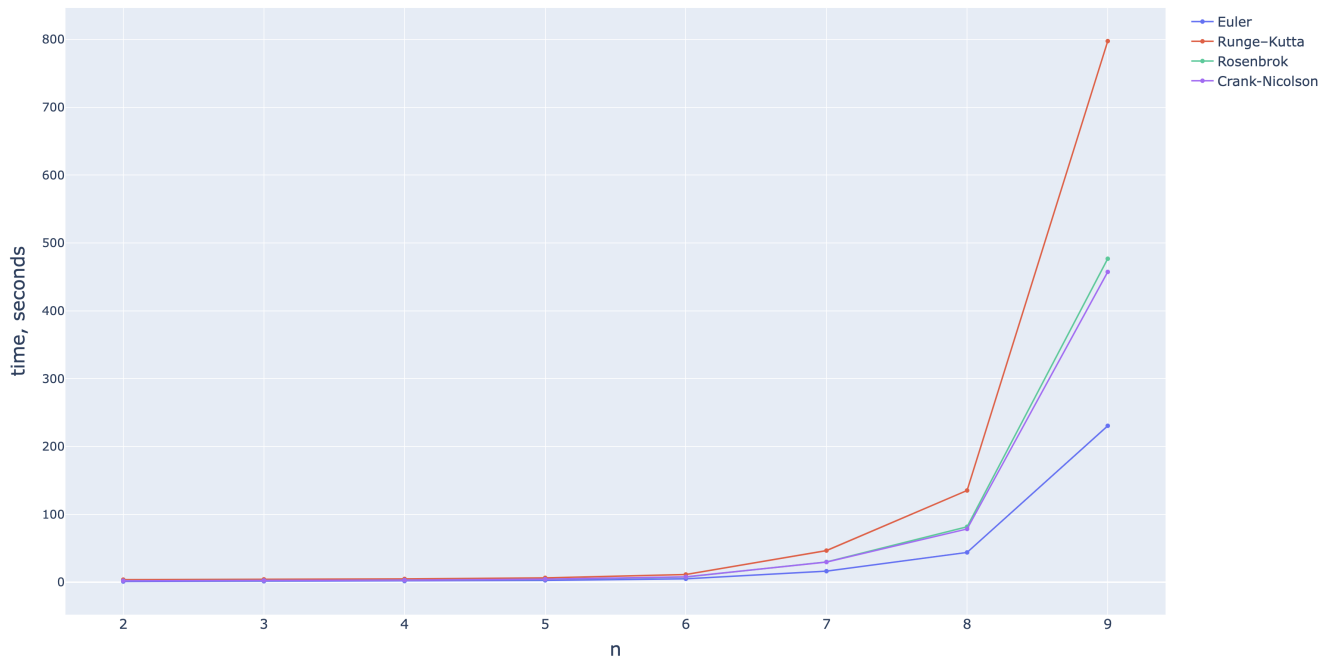


Рисунок 1.3 — Зависимость времени расчета квантовой динамики от числа n атомов в полости
 $dt = 0.5 \text{ ns}$, $T = 1 \text{ mks}$

n (число атомов)	2	3	4	5	6	7	8	9
число базисных состояний	4	8	16	32	64	128	256	512

Ниже приведены фрагменты программного кода реализации сравниваемых численных методов.

Листинг 1.1: config.py

```

1 KHz = 1e3
2 MHz = 1e6
3 GHz = 1e9
4
5 mks = 1e-6
6 ns = 1e-9
7
8 wc = 21.506 * GHz
9 wa = 21.506 * GHz
10

```

```
11 g = 0.01 * wa
```

Листинг 1.2: euler.py

```

1 import numpy as np
2
3
4 def solve_euler(H, w0, dt, T):
5     w = w0
6     t = 0
7
8     w_values = [abs(w)**2]
9     t_values = [t]
10
11     while t < T:
12         w = w - 1j * np.dot(H, w) * dt
13
14         p = [abs(i[0])**2 for i in w.tolist()]
15
16         t += dt
17
18         w_values.append(p)
19         t_values.append(t)
20
21     return w_values, t_values

```

Листинг 1.3: rk4.py

```

1 import numpy as np
2
3
4 def solve_rk4(H, w0, dt, T):
5     w = w0
6     t = 0
7
8     w_values = [abs(w)**2]
9     t_values = [t]
10
11     while t < T:
12         k1 = -1j * H.dot(w)
13         k2 = -1j * H.dot(w + dt / 2 * k1)
14         k3 = -1j * H.dot(w + dt / 2 * k2)
15         k4 = -1j * H.dot(w + dt * k3)
16
17         w = w + dt / 6 * (k1 + 2 * k2 + 2 * k3 + k4)
18
19         p = [abs(i[0])**2 for i in w.tolist()]
20
21         t += dt
22
23         w_values.append(p)

```

```

24     t_values.append(t)
25
26     return w_values, t_values

```

Листинг 1.4: rosenbrok.py

```

1 import numpy as np
2
3
4 def solve_rosenbrok(H, w0, dt, T):
5     w = w0
6     t = 0
7
8     w_values = [abs(w)**2]
9     t_values = [t]
10
11    while t < T:
12        k1 = -1j * np.dot(H, w) * dt
13        k2 = -1j * np.dot(H, (w + k1/2)) * dt
14        w = w + k2
15
16        p = [abs(i[0])**2 for i in w.tolist()]
17
18        t += dt
19
20        w_values.append(p)
21        t_values.append(t)
22
23    return w_values, t_values

```

Листинг 1.5: crank_nicolson.py

```

1 import numpy as np
2
3
4 def solve_crank_nicolson(H, w0, dt, T):
5     w = w0
6     t = 0
7
8     w_values = [abs(w)**2]
9     t_values = [t]
10
11    while t < T:
12        k1 = -1j * np.dot(H, w) * dt
13        k2 = -1j * np.dot(H, (w + k1/2)) * dt
14        w = w + k2
15
16        p = [abs(i[0])**2 for i in w.tolist()]
17
18        t += dt
19

```



```

20     w_values.append(p)
21     t_values.append(t)
22
23     return w_values, t_values

```

Листинг 1.6: tc.py

```

1 from common import get_base, get_H
2 from config import wc, wa, g, ns, mks
3
4 from methods.euler import solve_euler
5 from methods.rk4 import solve_rk4
6 from methods.rosenbrok import solve_rosenbrok
7 from methods.crank_nicolson import solve_crank_nicolson
8
9 from plotly.subplots import make_subplots
10 import plotly.graph_objects as go
11 import numpy as np
12
13 n = 2
14
15 E = 1
16
17 base = get_base(E, n)
18 dim = len(base)
19
20 H = get_H(base, wc, wa, g)
21 dt = 1 * ns
22 T = 1 * mks
23
24 # EULER
25 w0 = np.zeros((dim, 1))
26 w0[1] = 1
27 w_euler, t_euler = solve_euler(H, w0, dt, T)
28
29
30 # RUNGE KUTTA
31 w0 = np.zeros((dim, 1))
32 w0[1] = 1
33 w_rk4, t_rk4 = solve_rk4(H, w0, dt, T)
34
35 # ROSENBROK
36 w0 = np.zeros((dim, 1))
37 w0[1] = 1
38 w_rosenbrok, t_rosenbrok = solve_rosenbrok(H, w0, dt, T)
39
40 # CRANK_NICOLSON
41 w0 = np.zeros((dim, 1))
42 w0[1] = 1
43 w_crank_nicolson, t_crank_nicolson = solve_crank_nicolson(H, w0, dt, T)

```

1.3 Моделирование больших квантовых систем

Моделирование значительно более сложных систем (скажем, с числом атомов, большим 10) может потребовать распределенных вычислений. В рамках данной диссертации для таких задач использовались библиотеки ScaLAPACK [86–90] и MAGMA [91].

ScaLAPACK (**Scalable Linear Algebra PACKage**) — библиотека с открытым исходным кодом, включающая в себя подмножество процедур **LAPACK**, адаптированных для использования на **MPP** (массивно-параллельной архитектуре). В библиотеке **LAPACK** все элементарные векторные и матричные операции выполняются с помощью высокооптимизированных подпрограмм библиотеки **BLAS** (**Basic Linear Algebra Subprograms**). Компьютерная архитектура **MPP** представляет собой систему узлов, каждый из которых содержит процессор и оперативную память, причем доступ к оперативной памяти конкретного узла имеют только процессоры из этого же узла. Узлы соединяются специальными коммуникационными каналами, обеспечивающими возможность пересылки данных между ними. Главным преимуществом таких систем является их высокая масштабируемость, поскольку, в отличие от систем с общей памятью (**SMP**), в системах с разделенной памятью не возникает необходимости в потоковой синхронизации процессоров.

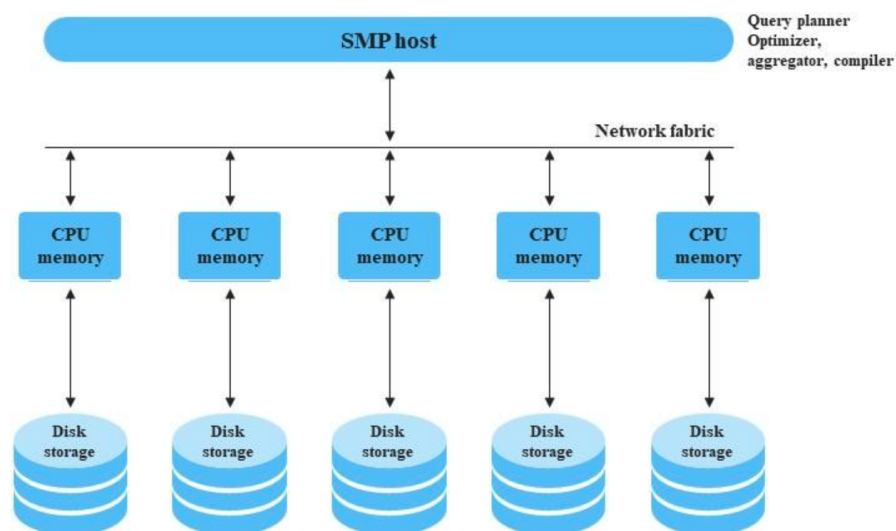


Рисунок 1.4 — Архитектура MPP

Для использования библиотеки ScaLAPACK необходимо предварительно инициализировать сетку процессоров и распределить данные (вектора, матрицы, etc.) между ними.

Библиотека ScaLAPACK поддерживает работу с матрицами трех типов:

- плотными матрицами,
- ленточными матрицами,
- плотными матрицами на внешнем носителе.

Названия функций пакета ScaLAPACK имеют вид **PTXXYYY**, где:

- **T** — тип данных, который может иметь значения:
 - **S** – вещественный одинарной точности (**float**),
 - **D** – вещественный двойной точности (**double**),
 - **C** – комплексный одинарной точности (**complex < float, float >**),
 - **Z** – комплексный двойной точности (**complex < double, double >**),
- **XX** — вид матрицы:
 - **GE** – общего вида,
 - **SU** – симметричные,
 - **HE** – эрмитовы,
 - **UN** – унитарные,
 - **GT** – трехдиагональные общего вида,
 - прочие,
- **YYY** — действия:
 - **MM** – перемножение матриц,
 - **SVD** – вычисление сингулярных значений,
 - **EV** и **EVX** – вычисление собственных значений и собственных векторов,
 - **TRF** – факторизация матриц,
 - прочие.

MAGMA (Matrix Algebra on GPU and Multicore Architectures) [91], специализированный пакет для вычислительной алгебры, предоставляет оптимизированные алгоритмы и структуры данных для работы с матрицами. Графические процессоры (GPU) предлагают массовый параллелизм, идеально подходящий для задач линейной алгебры. Magma, благодаря интеграции с GPU, может значительно ускорить вычисления, особенно для больших матриц. Вычисления

на GPU могут быть на порядок быстрее, чем на CPU, что критически важно при моделировании масштабируемых квантовых систем. Гибридная архитектура CPU+GPU, поддерживаемая MAGMA, позволяет комбинировать сильные стороны обоих типов процессоров, например, выполняя управление и предварительную обработку данных на CPU, а интенсивные вычисления на GPU, и тем самым значительно ускорить ключевые операции, такие как SVD-разложение и перемножение матриц.

Глава 2. Коллективные осцилляции многоатомных ансамблей

В данной главе мы рассмотрим важный тип динамики — осцилляции между возбужденным состоянием атомного ансамбля и полем, 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 [42—44]. В случае сложных систем такие осцилляции могут быть проанализированы только в результате численного компьютерного и суперкомпьютерного моделирования.

2.1 Постановка задачи

Пусть ансамбль $2n$ двухуровневых атомов разделен на две равные половины A_1 и A_2 с номерами $1, 2, \dots, n$ и $(n+1), \dots, 2n$ соответственно и первоначально в полости находится m фотонов («накачка»).

Рассмотрим два состояния

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= |m\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{n, A_1} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{n, A_2}, \\ |\Psi_1\rangle &= |m\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{n, A_1} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{n, A_2}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Переходы между этими состояниями в ходе квантовой динамики называются **ансамблевыми осцилляциями**. Качество таких осцилляций в случае унитарной динамики определяется естественным образом с помощью функций

$$\begin{aligned} f_0(t) &= |\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle|^2, \\ f_1(t) &= |\langle \Psi_1 | \Psi(t) \rangle|^2, \end{aligned} \quad (2.2)$$

соответствующих вероятностям получения данных состояний при измерении состояния $|\Psi(t)\rangle$ системы в момент времени t . В случае неунитарной динамики смешанного состояния $\rho(t)$ вместо функций f_0 , f_1 следует использовать

функции согласованности (fidelity, или точность Ульмана-Йожи — Uhlmann-Jozsa fidelity [96—99])

$$F_0(t) = \left(\text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_0} \rho(t) \sqrt{\rho_0}} \right)^2 \quad (2.3)$$

и

$$F_1(t) = \left(\text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_1} \rho(t) \sqrt{\rho_1}} \right)^2 \quad (2.4)$$

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

Периодический повтор во времени состояний с близкими к единице показателями качества является критерием наличия ансамблевых осцилляций. Такие точки мы называем **пиковыми**. Важна также резкость осцилляций — скорость изменения функции качества в окрестности пиковых точек. Из вида гамильтониана ТС вытекает, что вектор чистого состояния при унитарной динамике меняется в пределах подпространства, порожденного базисными состояниями вида $|m\rangle_{\text{ph}}|n_1\rangle_{A_1}|n_2\rangle_{A_2}$, такими что $m + n_1 + n_2 = p$. Его размерность растет экспоненциально от p , и потому само существование ансамблевых осцилляций, в отличие от осцилляций Раби [42—44], является совершенно не тривиальным фактом.

Мы исследуем специфику таких осцилляций, а также промоделируем эффект их возрождения в системе двух взаимодействующих полостей.

2.2 Выбор базиса, построение гамильтониана

Пусть $A = \{1, 2, \dots, n\}$ — множество идентичных двухуровневых атомов, $J(A)$ — множество их классических базисных состояний. Определим равномерное состояние атомов из A как

$$\{k_A\}^1 = \frac{1}{\sqrt{C_n^k}} \sum_{j \in J(A): w(j)=k} |j\rangle, \quad (2.5)$$

где $w(j)$ — вес Хэмминга двоичного набора j , равный числу единиц в нем, что соответствует количеству возбужденных атомов в состоянии $|j\rangle$. Отметим также,

¹для обозначений $\{ \succ, \prec \}$ будем использовать кет-бра формализм

что введенные таким образом многоатомные состояния взаимно ортогональны в силу того, что не имеют общих базисных компонент.

Пусть \mathcal{L}_A — линейная оболочка состояний вида $|\text{ph}\rangle\{k_A\rangle \quad \forall k = \overline{0, |A|}$, $\text{ph} = 0, 1, \dots$, где $|\text{ph}\rangle$ — фоковское состояние поля [67–69] (число фотонов) в полости оптического резонатора. Рассмотрим ограничение $\tilde{H}_{\text{ТС}}^A$ гамильтониана Тависа-Каммингса $H_{\text{ТС}}$ на подпространство \mathcal{L}_A . Этот гамильтониан может быть представлен в новом базисе, состоящем из равномерных состояний. Его матрица будет иметь вид

$$\tilde{H}_{i_{\text{ph}}i_A j_{\text{ph}}j_A} = \langle i_A | \langle i_{\text{ph}} | H_{\text{ТС}} | j_{\text{ph}} \rangle | j_A \rangle, \quad (2.6)$$

где i_{ph}, i_A и j_{ph}, j_A — начальное и конечное число фотонов и атомных возбуждений соответственно. Отметим также, что ненулевые элементы этой матрицы должны удовлетворять условию

$$i_{\text{ph}} - j_{\text{ph}} = i_A - j_A = \pm 1, \quad (2.7)$$

поскольку взаимодействие атомов с модой электромагнитного поля резонатора осуществляется без потерь.

Выразим эти элементы через числа

$$p = \min(i_{\text{ph}}, j_{\text{ph}}), \quad a = \min(i_A, j_A). \quad (2.8)$$

Тогда имеем

$$\tilde{H}_{i_{\text{ph}}i_A j_{\text{ph}}j_A} = \begin{cases} \hbar\omega(p + a), & \text{если } i_A = j_A, i_{\text{ph}} = j_{\text{ph}}, \\ g(n - a)C_n^a \sqrt{\frac{p + 1}{C_n^a C_n^{a+1}}}, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (2.9)$$

Значение $\hbar\omega(p + a)$ соответствует диагональным элементам и равно энергии данного состояния («поле» + «атомы»).

Для второго равенства:

◇ коэффициент $\sqrt{p + 1}$ следует из вида операторов рождения/уничтожения фотонов [69]:

$$\begin{aligned} - p &= \min(i_{\text{ph}}, j_{\text{ph}}), \\ - a^+ |\text{ph}\rangle &= \sqrt{\text{ph} + 1} |\text{ph} + 1\rangle, \\ - a |\text{ph}\rangle &= \sqrt{\text{ph}} |\text{ph} - 1\rangle, \end{aligned}$$

◇ произведение биномиальных коэффициентов $C_n^a C_n^{a+1}$ берется из нормировочных констант в определении равномерных состояний (2.5),

◇ коэффициент $(n - a)$ есть число слагаемых в сумме, равное числу возможных атомов, релаксирующих в данном процессе.

Так, для системы из n идентичных двухуровневых атомов можно ввести состояние атомного ансамбля — состояние $|k_1 k_2 \dots k_n\rangle$ с уровнями $\{0\rangle, \{1\rangle, \dots, \{n\rangle$. Уровни будут соответствовать суммарному числу возбуждений в ансамбле и будут отстоять друг от друга на величину $E_k - E_{k-1} = \hbar\omega$, $k = \overline{1, n}$.

В последующих разделах мы будем рассматривать квантовую динамику состояний вида (2.1) в базисе $|m\rangle_{\text{ph}}\{i, j\rangle_{\text{at}}$ в рамках приближения RWA [55–57]. Здесь

$|m\rangle_{\text{ph}}$ — начальное фоковское (либо вакуумное) состояние поля [67–69],

$\{i, j\rangle_{\text{at}} = \{i\rangle_{A_1}\{j\rangle_{A_2}$ — состояние атомных групп.

При начальном состоянии системы $|\Psi_0\rangle = |m\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{0 \dots 0}_n\rangle_{A_1}|\underbrace{1 \dots 1}_n\rangle_{A_2}$ через определенный промежуток времени вся амплитуда возбуждений одной группы атомов сконцентрируется на возбуждении другой группы атомов — состоянии $|\Psi_1\rangle = |m\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{1 \dots 1}_n\rangle_{A_1}|\underbrace{0 \dots 0}_n\rangle_{A_2}$, и данный процесс будет повторяться. Таким образом, мы получим картину коллективных осцилляций атомных ансамблей (рис. 2.1, 2.2, 2.3, 2.5), аналогичных осцилляциям Раби для одного атома [42–44]. Причина такого поведения кроется в интерференции амплитуд: для всех состояний, отличных от $|\Psi_0\rangle$ и $|\Psi_1\rangle$, их амплитуда будет распределяться по большому числу таких состояний, снижая тем самым вероятность нахождения системы в каждом из них. Данное свойство позволяет в перспективе создать процедуру переноса многокубитного квантового состояния на некоторое удаленное расстояние весьма простым способом.

Отметим также, что с увеличением фотонной накачки пики амплитуд состояний $|\Psi_0\rangle$ и $|\Psi_1\rangle$ будут становиться все более резкими (рис. 2.1, 2.2): первоначальные, или свободные, фотоны в полости будут способствовать процессу осцилляций атомных групп.

В заключение главы мы также рассмотрим данную динамику в условиях, когда атомные группы разделены между полостями, взаимодействующими между собой посредством оптического волновода. Обнаруженный эффект перехода состояния атомного ансамбля из одной полости в другую и его возврат в первоначальную полость (рис. 2.13, 2.14) носит вполне отчетливый характер.

2.3 Осцилляции с накачкой фотонов

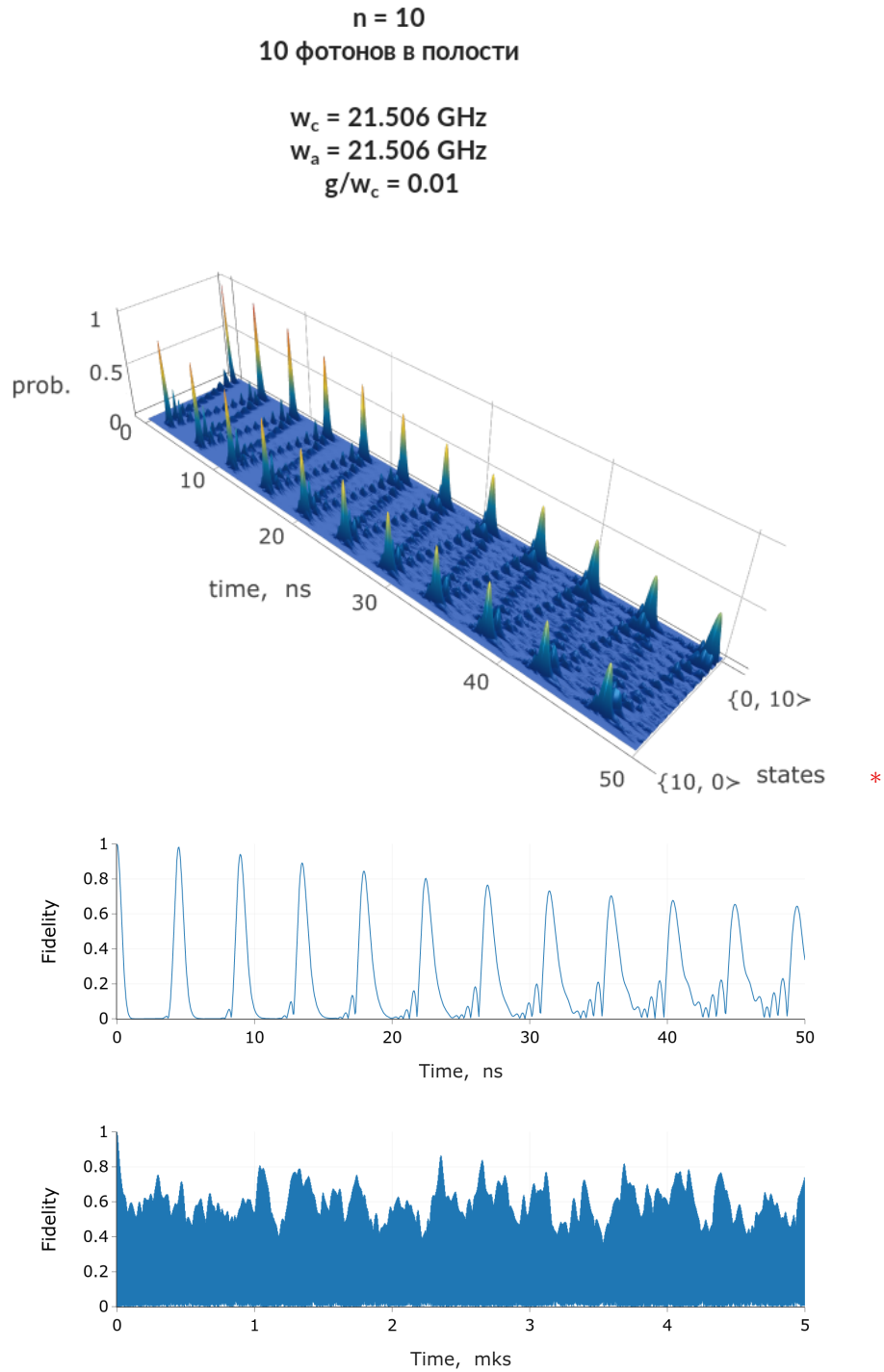


Рисунок 2.1 — Коллективные осцилляции для системы 10×10

$$\begin{aligned}
 |\Psi_0\rangle &= |10\rangle_{\text{ph}} \{0, 10\rangle_{\text{at}} = |10\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{10}_{A_1} | \underbrace{1 \dots 1\rangle}_{10}_{A_2} \\
 |\Psi_1\rangle &= |10\rangle_{\text{ph}} \{10, 0\rangle_{\text{at}} = |10\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{10}_{A_1} | \underbrace{0 \dots 0\rangle}_{10}_{A_2}
 \end{aligned}$$

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

$n = 25$
25 фотонов в полости

$\omega_c = 21.506$ GHz
 $\omega_a = 21.506$ GHz
 $g/\omega_c = 0.01$

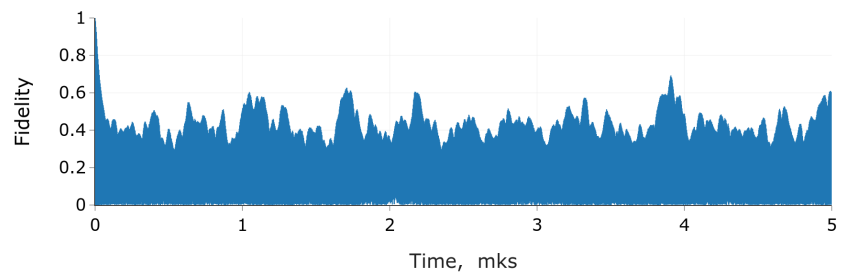
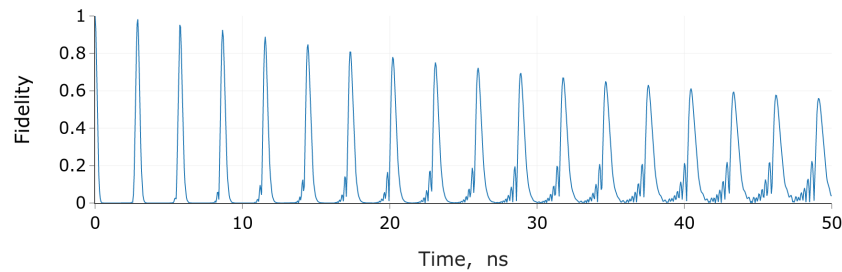
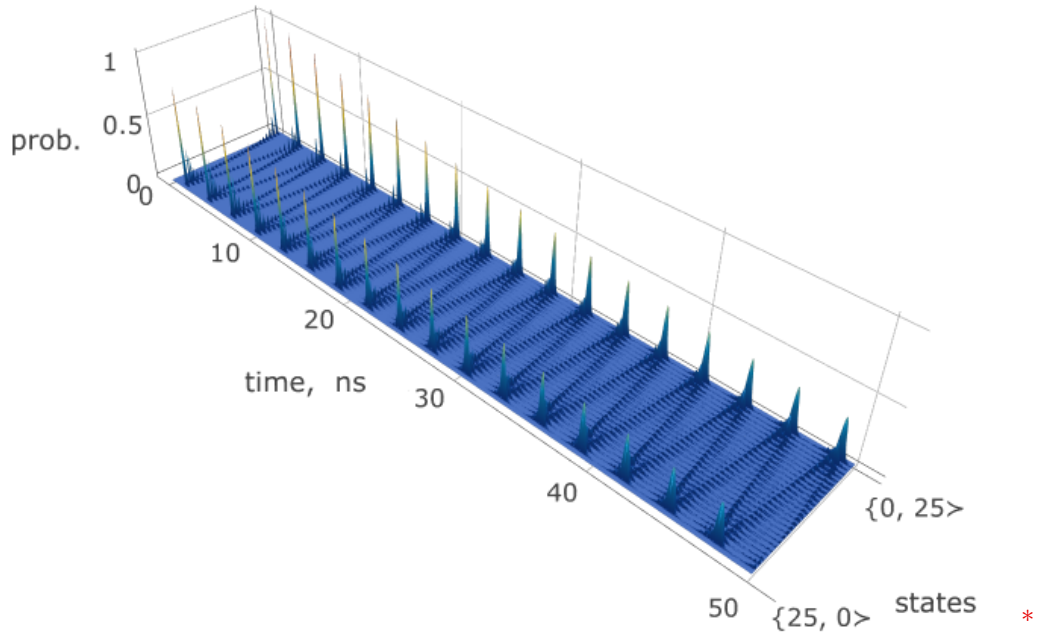


Рисунок 2.2 — Коллективные осцилляции для системы 25x25

$$|\Psi_0\rangle = |25\rangle_{\text{ph}}\{0,25\}_{\text{at}} = |25\rangle_{\text{ph}}\underbrace{|0\dots 0\rangle}_{25}_{A_1}|\underbrace{1\dots 1\rangle}_{25}_{A_2}$$

$$|\Psi_1\rangle = |25\rangle_{\text{ph}}\{25,0\}_{\text{at}} = |25\rangle_{\text{ph}}\underbrace{|1\dots 1\rangle}_{25}_{A_1}|\underbrace{0\dots 0\rangle}_{25}_{A_2}$$

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

2.4 Осцилляции произвольных атомных ансамблей

Произвольные начальные состояния вида

$$\alpha|0\dots 0\rangle_{A_1}|1\dots 1\rangle_{A_2} + \beta|1\dots 1\rangle_{A_1}|0\dots 0\rangle_{A_2} \quad (2.10)$$

дают осцилляции хорошего качества в условиях фотонной накачки.

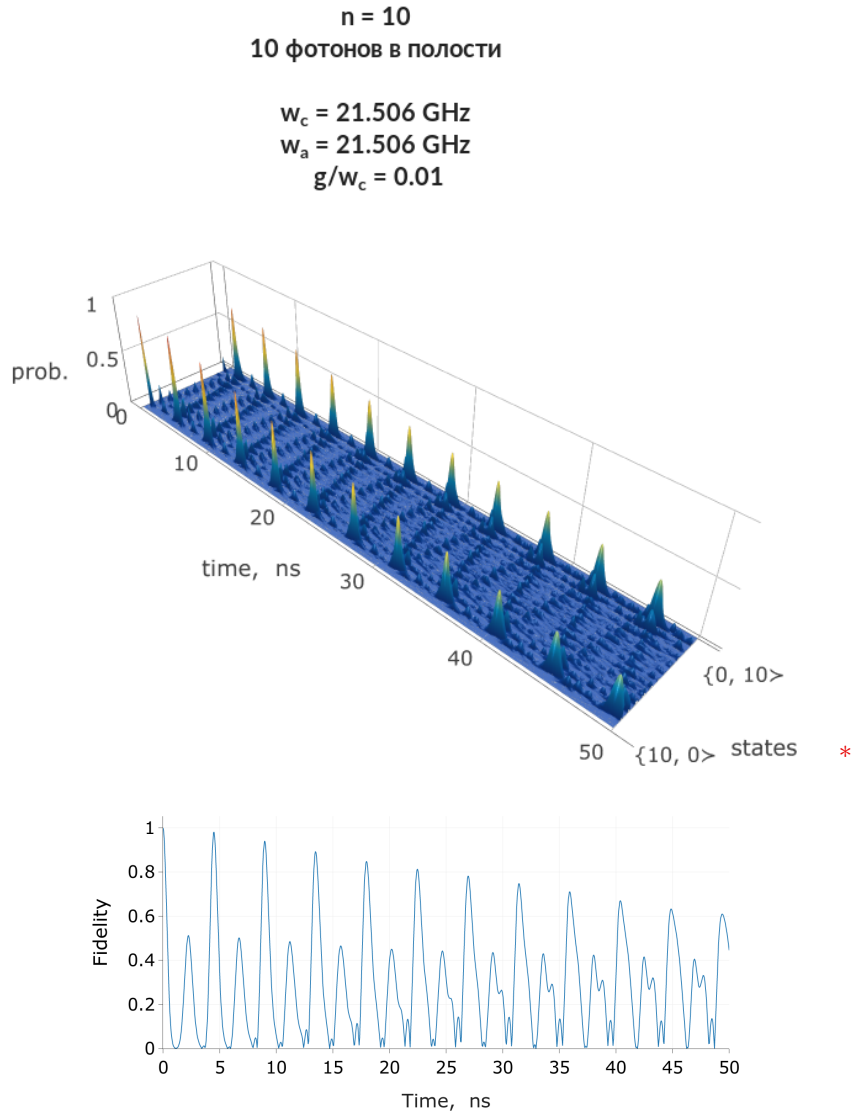


Рисунок 2.3 — Коллективные осцилляции атомных ансамблей с произвольно выбранными амплитудами

$$\begin{aligned}
 |\Psi_0\rangle &= |10\rangle_{ph} \otimes (\alpha\{0\}_{A_1}\{10\}_{A_2} + \beta\{10\}_{A_1}\{0\}_{A_2}) \\
 |\Psi_1\rangle &= |10\rangle_{ph} \otimes (\alpha\{10\}_{A_1}\{0\}_{A_2} + \beta\{0\}_{A_1}\{10\}_{A_2}) \\
 \alpha &= 0.293 + 0.245i, \quad \beta = 0.204 + 0.901i
 \end{aligned}$$

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

Произвольные начальные состояния вида

$$|\Psi_0\rangle = |m\rangle_{\text{ph}} \sum_{\substack{\lambda_k \in C: \sum_k |\lambda_k|^2 = 1, \\ i, j: i+j=2n}} \lambda_k \{i\}_{A_1} \{j\}_{A_2}, \quad (2.11)$$

отличные от состояний (2.10), не осциллируют.

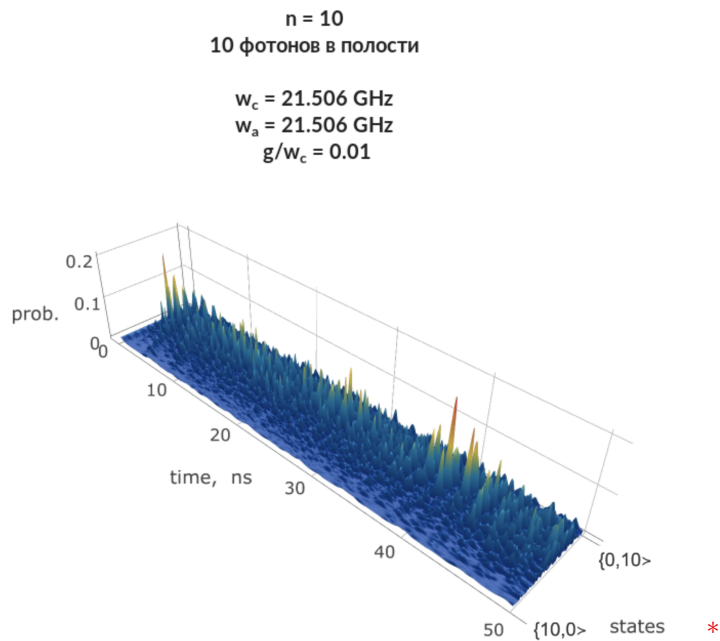
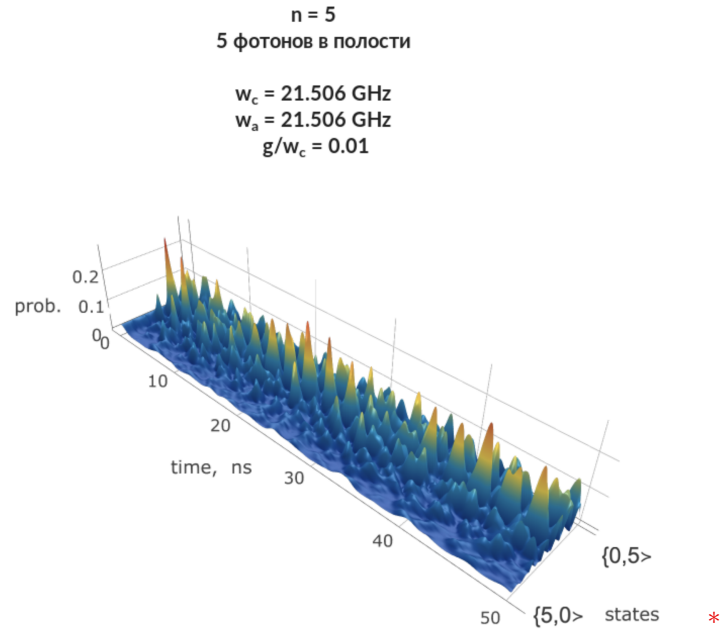


Рисунок 2.4 — Отсутствие осцилляций ансамблей с произвольно выбранными в них изначальными количествами атомных возбуждений

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

2.5 Осцилляции без накачки фотонов: коллапсы и возрождения ансамблевых состояний

Унитарная динамика базисных состояний

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle_{\text{ph}}\{0, n\rangle_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}}\{0\rangle_{A_1}\{n\rangle_{A_2} = |0\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{0\dots 0}_n\rangle_{A_1}|\underbrace{1\dots 1}_n\rangle_{A_2},$$

$$|\Psi_1\rangle = |0\rangle_{\text{ph}}\{n, 0\rangle_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}}\{n\rangle_{A_1}\{0\rangle_{A_2} = |0\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{1\dots 1}_n\rangle_{A_1}|\underbrace{0\dots 0}_n\rangle_{A_2}$$

в отсутствие свободных фотонов в полости будет сопровождаться периодически коллапсами и возрождениями данных состояний: пиковые значения меры близости $f(t_{\text{rev}}) = |\langle\Psi_0|\Psi(t_{\text{rev}})\rangle|^2$ начального $|\Psi_0\rangle$ и «возрожденного» начального состояния $|\Psi(t_{\text{rev}})\rangle$ в момент времени t_{rev} близки к 1.

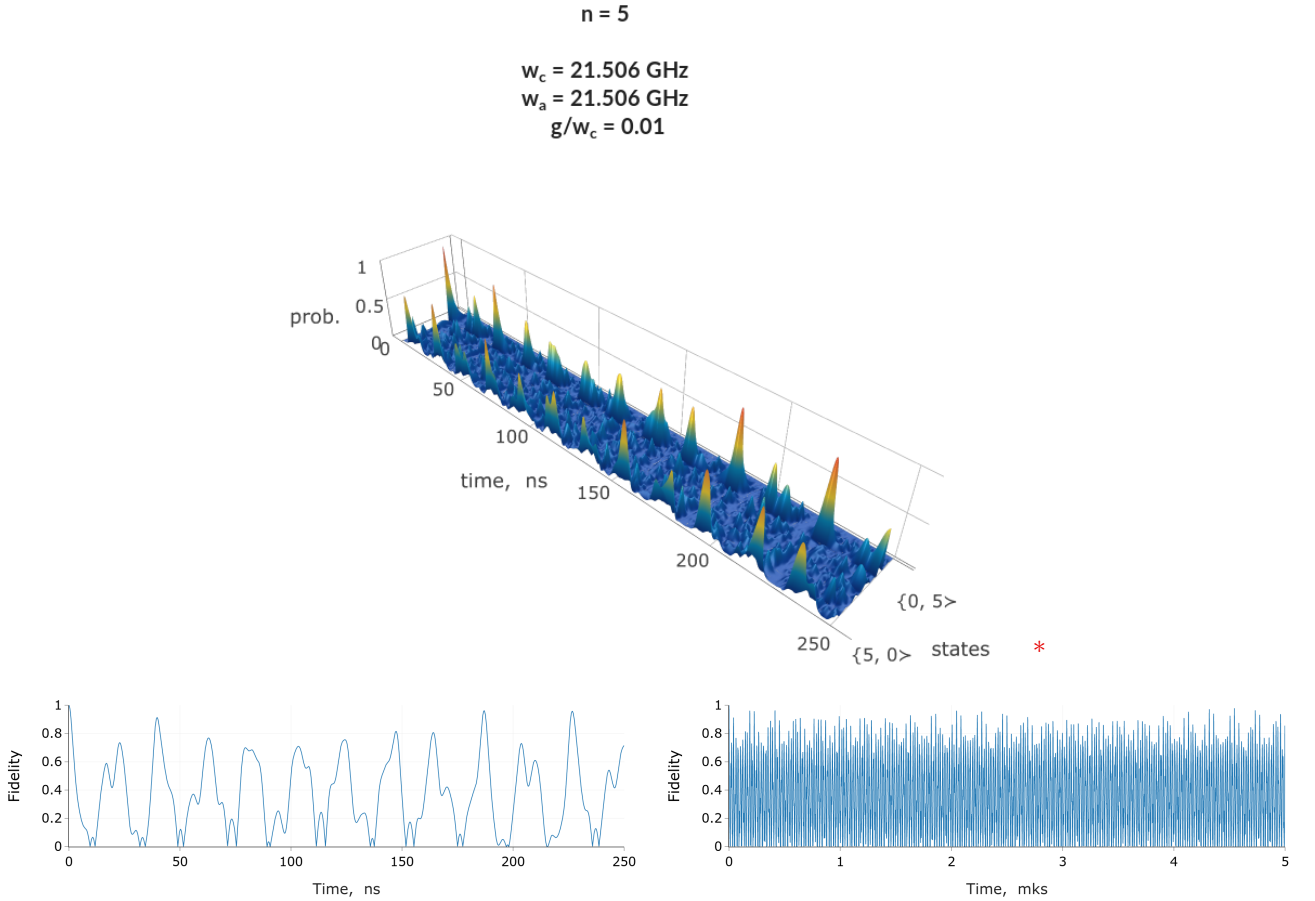


Рисунок 2.5 — Коллапсы и возрождения ансамблевых состояний

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle_{\text{ph}}\{0, 5\rangle_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{0\dots 0}_5\rangle_{A_1}|\underbrace{1\dots 1}_5\rangle_{A_2}$$

$$|\Psi_1\rangle = |0\rangle_{\text{ph}}\{5, 0\rangle_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{1\dots 1}_5\rangle_{A_1}|\underbrace{0\dots 0}_5\rangle_{A_2}$$

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

2.6 Зависимость качества осцилляций от числа атомов в группе и силы взаимодействия атомов с полем

Следующие графики демонстрируют зависимость качества осцилляций от различных параметров квантовой системы.

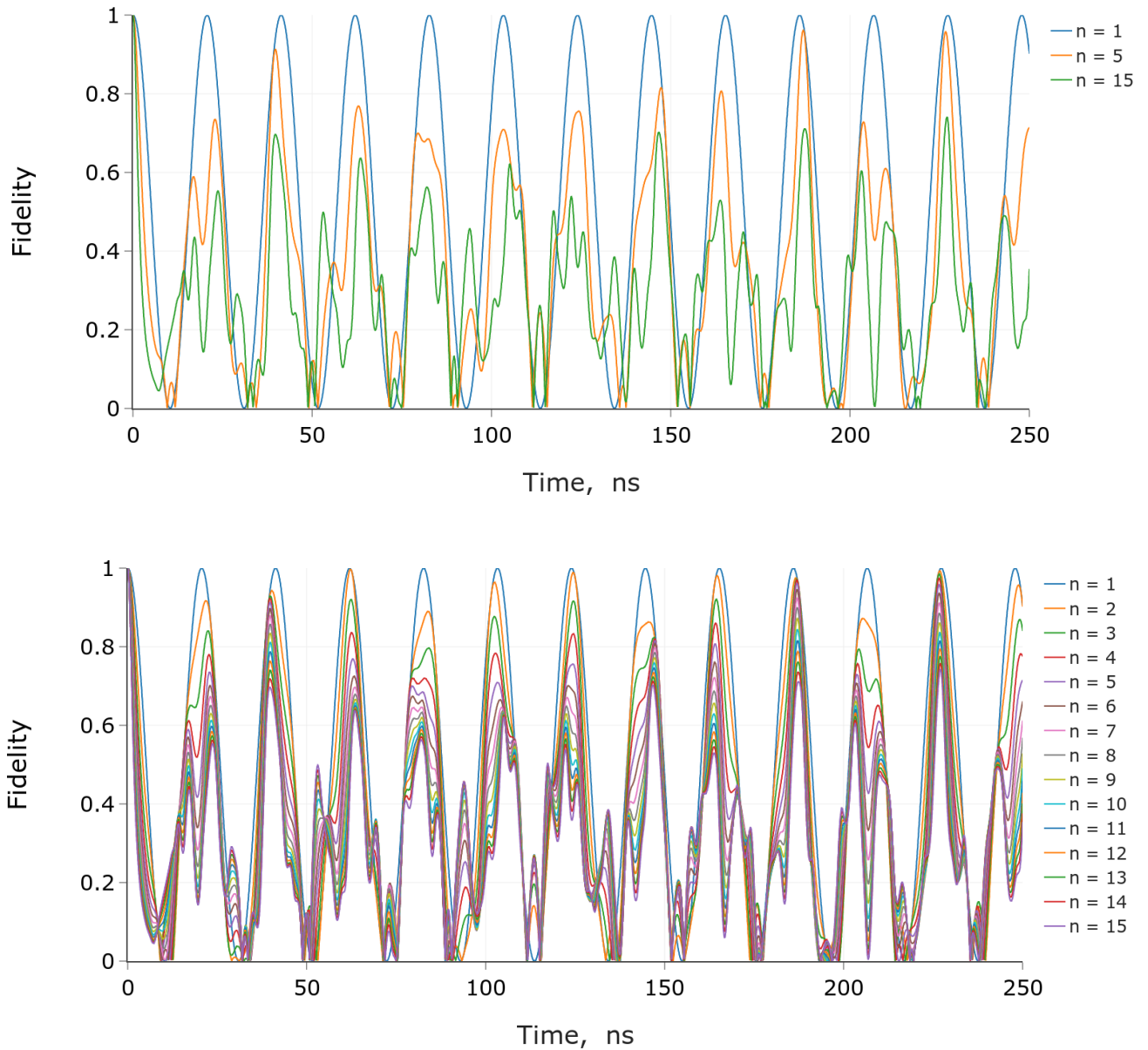


Рисунок 2.6 — Снижение пиковых амплитуд и нарушение периодичности осцилляций при увеличении числа атомов в группе

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle_{\text{ph}} \{0, n\}_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{n}_{A_1} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{n}_{A_2}$$

$$|\Psi_1\rangle = |0\rangle_{\text{ph}} \{n, 0\}_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{n}_{A_1} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{n}_{A_2}$$

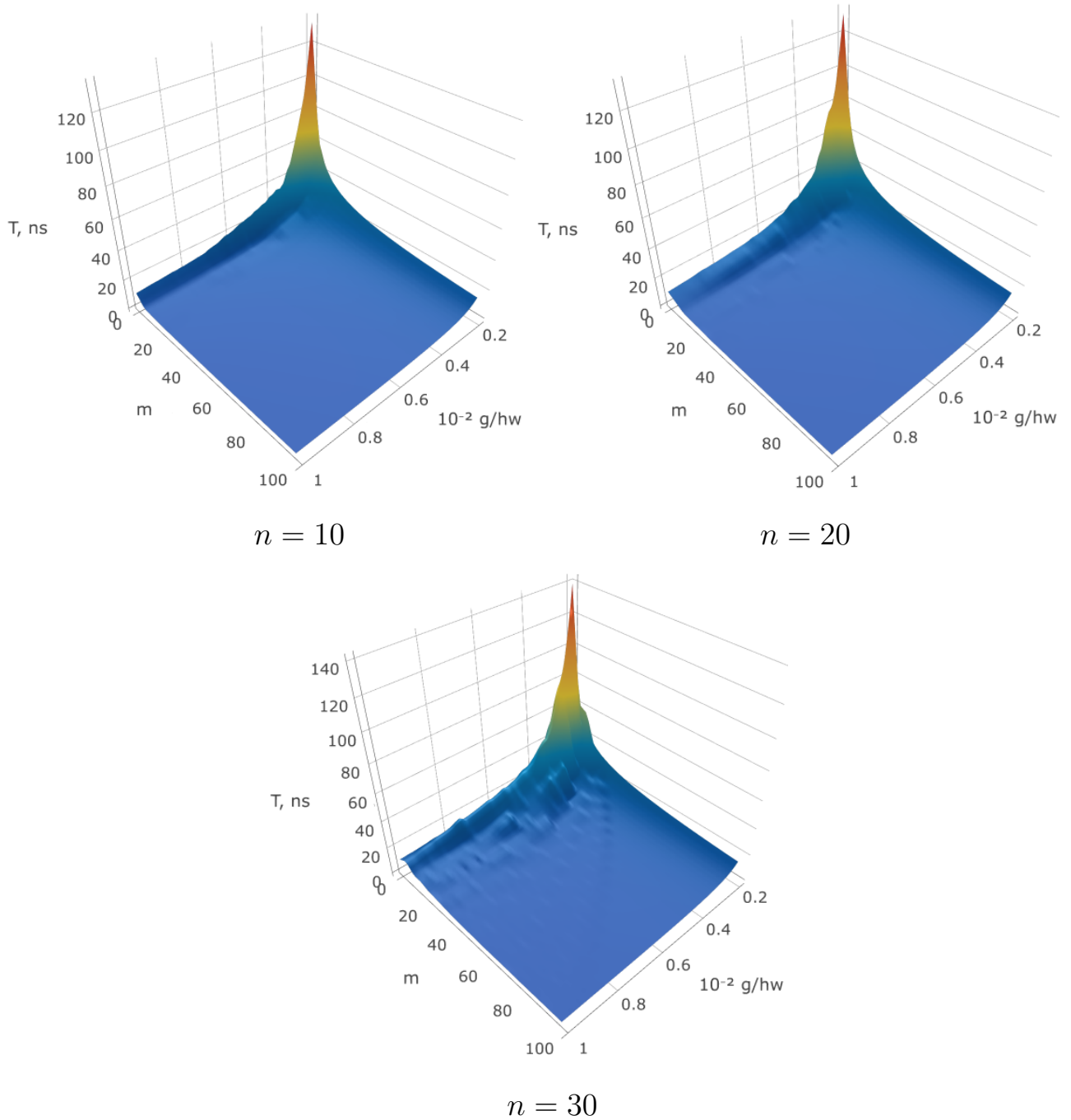
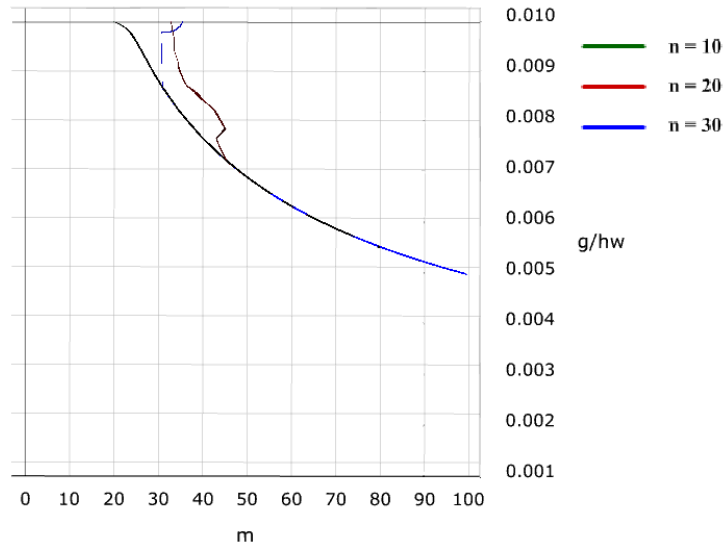


Рисунок 2.7 — Зависимость периода осцилляций T от силы взаимодействия g и первоначального числа m фотонов в полости

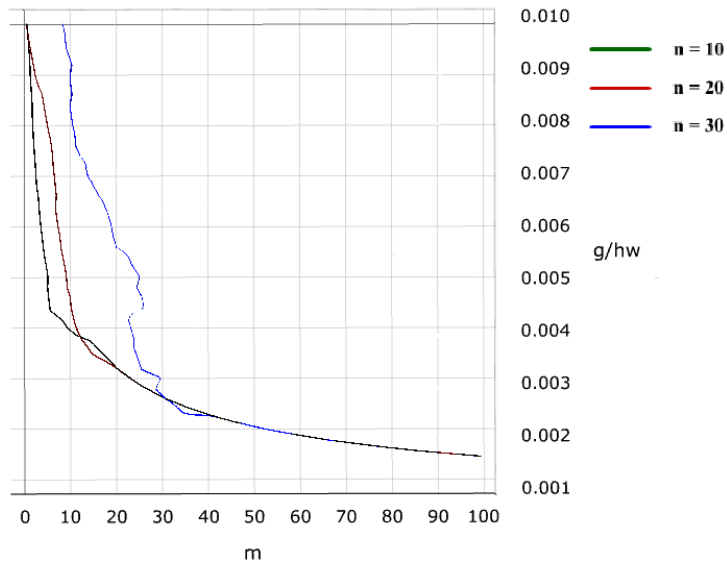
$$|\Psi_0\rangle = |m\rangle_{\text{ph}}\{0, n\}_{\text{at}} = |m\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{0 \dots 0}_n\rangle_{A_1}|\underbrace{1 \dots 1}_n\rangle_{A_2}$$

$$|\Psi_1\rangle = |m\rangle_{\text{ph}}\{n, 0\}_{\text{at}} = |m\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{1 \dots 1}_n\rangle_{A_1}|\underbrace{0 \dots 0}_n\rangle_{A_2}$$

Увеличение силы взаимодействия g атомов с полем, равно как и усиление фотонной накачки m , приводит к существенному уменьшению периода осцилляций. При стремлении g к нулю период осцилляций стремится к бесконечности (значение $g = 0$ означает отсутствие взаимодействия атомов с полем).



период осцилляций $T = 3 \text{ ns} = \text{const}$



период осцилляций $T = 10 \text{ ns} = \text{const}$

Рисунок 2.8 — Удлинение периода осцилляций при уменьшении силы взаимодействия g атомов с полем может быть скомпенсировано увеличением числа n атомов в группе и усилением фотонной накачки

Представленные изочастотные графики, соответствующие периодам осцилляций $T = 3 \text{ ns}$ и $T = 10 \text{ ns}$ для $n = 10, 20, 30$ атомов в группе демонстрируют возможность наращивания числа атомов, а также возможность уменьшения силы взаимодействия атомов с полем с одновременным сохранением периода осцилляций.

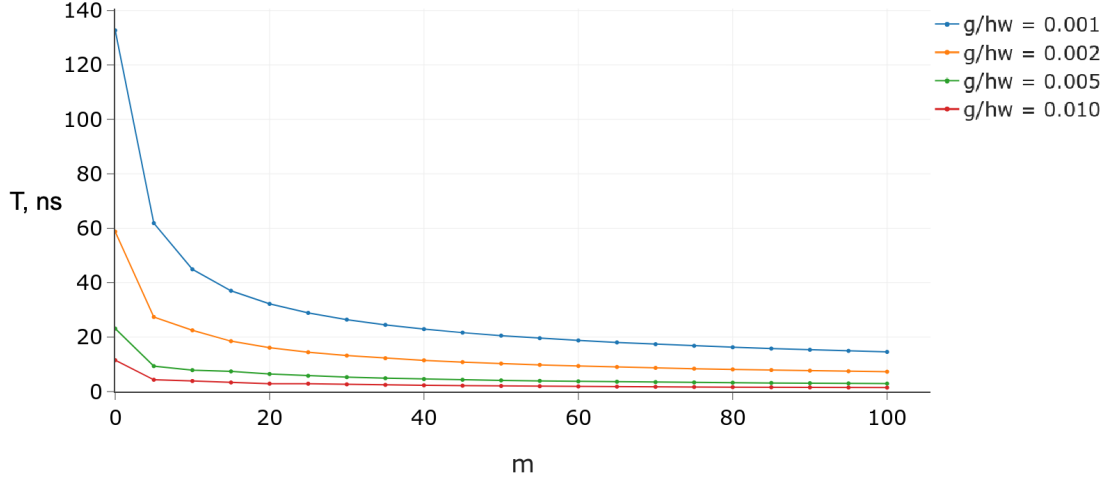


Рисунок 2.9 — Зависимость периода осцилляций от первоначального числа m фотонов в полости для 10 атомов в группе при различных значениях g

$$\text{Начальное состояние: } |\Psi_0\rangle = |m\rangle_{\text{ph}}\{0,10\}_{\text{at}} = |m\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{0\dots 0}_{10}\rangle_{A_1}|\underbrace{1\dots 1}_{10}\rangle_{A_2}$$

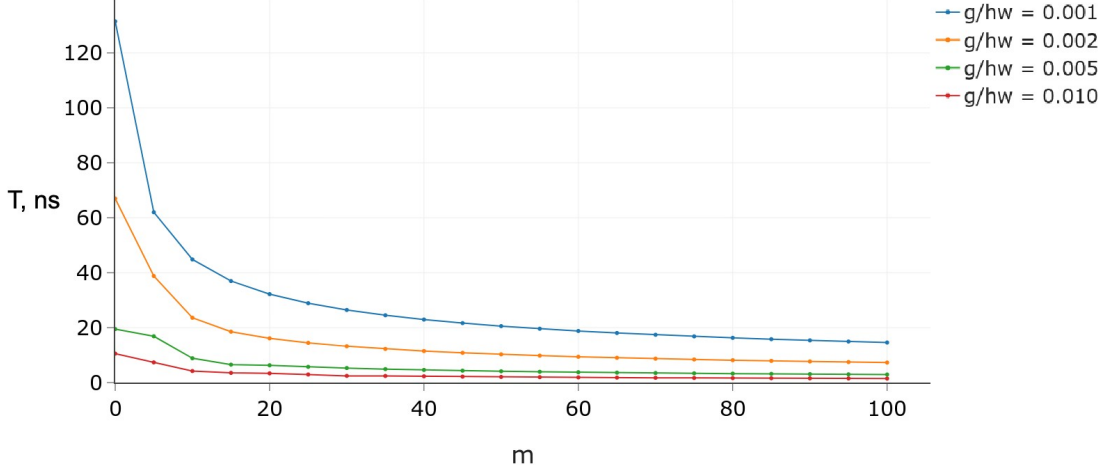


Рисунок 2.10 — Зависимость периода осцилляций от первоначального числа m фотонов в полости для 20 атомов в группе при различных значениях g

$$\text{Начальное состояние: } |\Psi_0\rangle = |m\rangle_{\text{ph}}\{0,20\}_{\text{at}} = |m\rangle_{\text{ph}}|\underbrace{0\dots 0}_{20}\rangle_{A_1}|\underbrace{1\dots 1}_{20}\rangle_{A_2}$$

Увеличение числа фотонов в полости резонатора сопровождается асимптотическим стремлением к нулю периода осцилляций при различных значениях силы взаимодействия атомов с полем в границах приближения RWA [55–57].

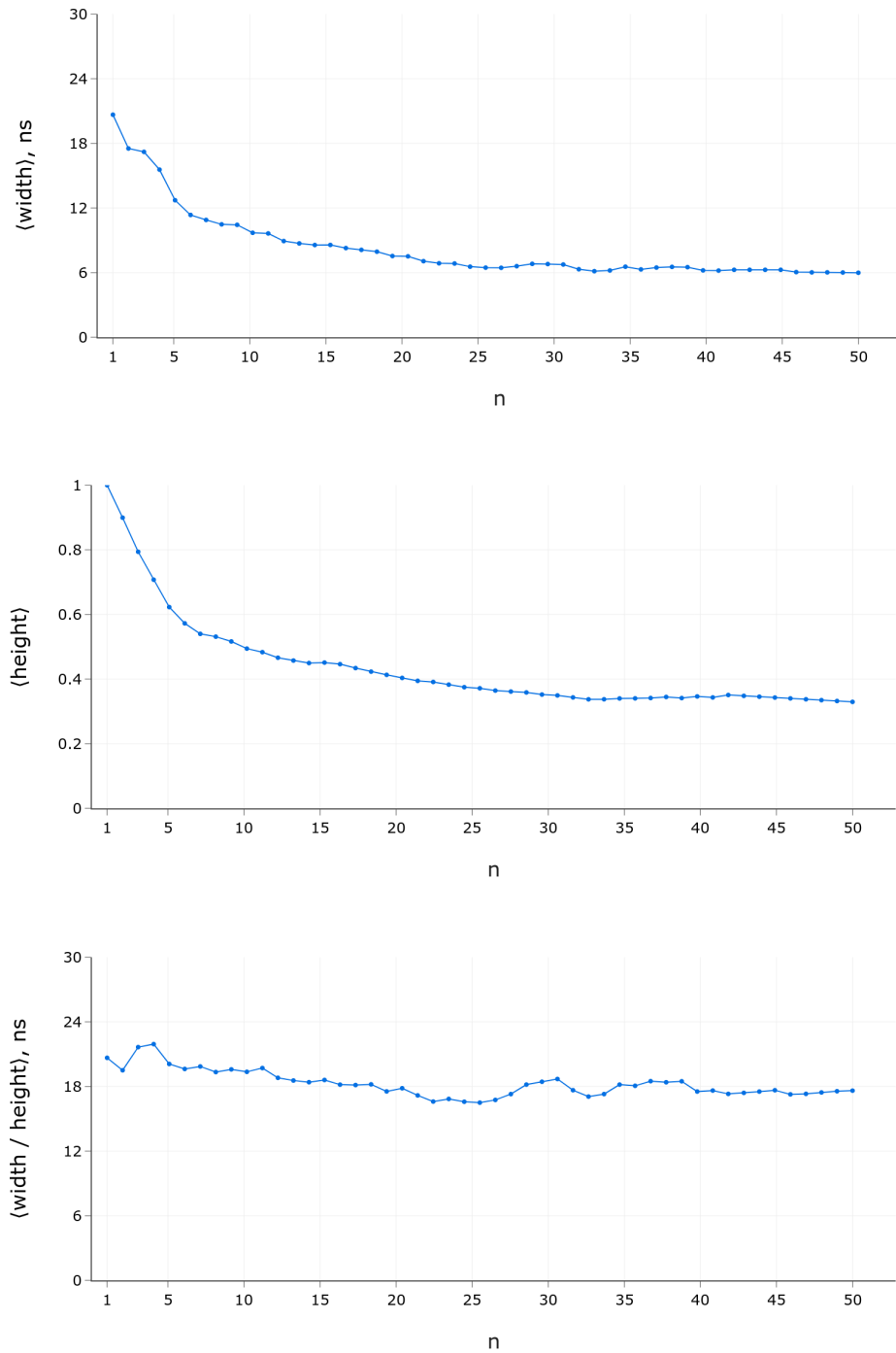


Рисунок 2.11 — Зависимость средних значений ширины основания и высоты пика квадрата амплитуды «возрожденного» начального состояния от числа n атомов в группе

$$\text{Начальное состояние: } |\Psi_0\rangle = |0\rangle_{\text{ph}} \{0, n\}_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{n, A_1} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{n, A_2}$$

Наблюдается уменьшение средних значений ширины основания и высоты пика осцилляций при увеличении числа атомов в группе. Их отношение близко к константе.

2.7 Осцилляции в условиях взаимодействия с внешним окружением

Рассмотрим модель Тависа-Каммингса в приближении RWA [55–57] для n двухуровневых атомов. Пусть энергии возбуждения атомов равны $\hbar\omega_{a_i}$ и отличаются от энергии фотонов $\hbar\omega_c$ малой расстройкой $d_i = |\hbar\omega_c - \hbar\omega_{a_i}|$. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H_{\text{TC}}^{\text{RWA}} = \hbar\omega_c a^+ a + \hbar \sum_{i=1}^n w_{a_i} \sigma_i^+ \sigma_i + a \bar{\sigma}^+ + a^+ \bar{\sigma}, \quad (2.12)$$

где $\bar{\sigma} = \sum_{i=1}^n g_i \sigma_i$, $\bar{\sigma}^+ = \sum_{i=1}^n g_i \sigma_i^+$ — соответствующие операторы коллективной релаксации и возбуждения группы атомов.

Реальный резонатор находится в контакте с внешней средой, которая в простейшем случае имеет вид одномодового фотонного резервуара с фиксированной температурой на моде полости. Контакт предполагает возможность обмена фотонами частоты ω_c между внешней средой и полостью.

Рассмотрим простейший случай нулевой температуры на моде полости, при котором во внешнем резервуаре нет фотонов и такой контакт ведет к постоянной утечке фотонов из полости. Если $\rho(t)$ — матрица плотности системы «поле + атомы», то ее динамика в указанном случае описывается основным квантовым уравнением [22]:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\rho} &= \mathcal{L}(\rho), \\ \mathcal{L}(\rho) &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \frac{1}{\hbar}L(\rho), \\ L(\rho) &= \gamma \left(a\rho a^+ - \frac{1}{2}\{a^+ a, \rho\} \right), \end{aligned} \quad (2.13)$$

где $H = H_{\text{TC}}^{\text{RWA}}$, γ — параметр, отвечающий за интенсивность линдбладовского процесса, $L(\rho) = \gamma(a\rho a^+ - \frac{1}{2}\{a^+ a, \rho\})$ — оператор Линдблада, соответствующий утечке, которая выражается оператором уничтожения фотона a [22; 84].

Мы будем исследовать динамику состояния атомов и поля, идущую задолго до наступления термической стабилизации, рассматривая обмен фотонами с внешним резервуаром как фактор декогерентности.

Характерная картина ансамблевых осцилляций сохраняется при условии, когда резонатор находится в контакте с внешней средой, приводящем к постоянной утечке фотонов из полости.

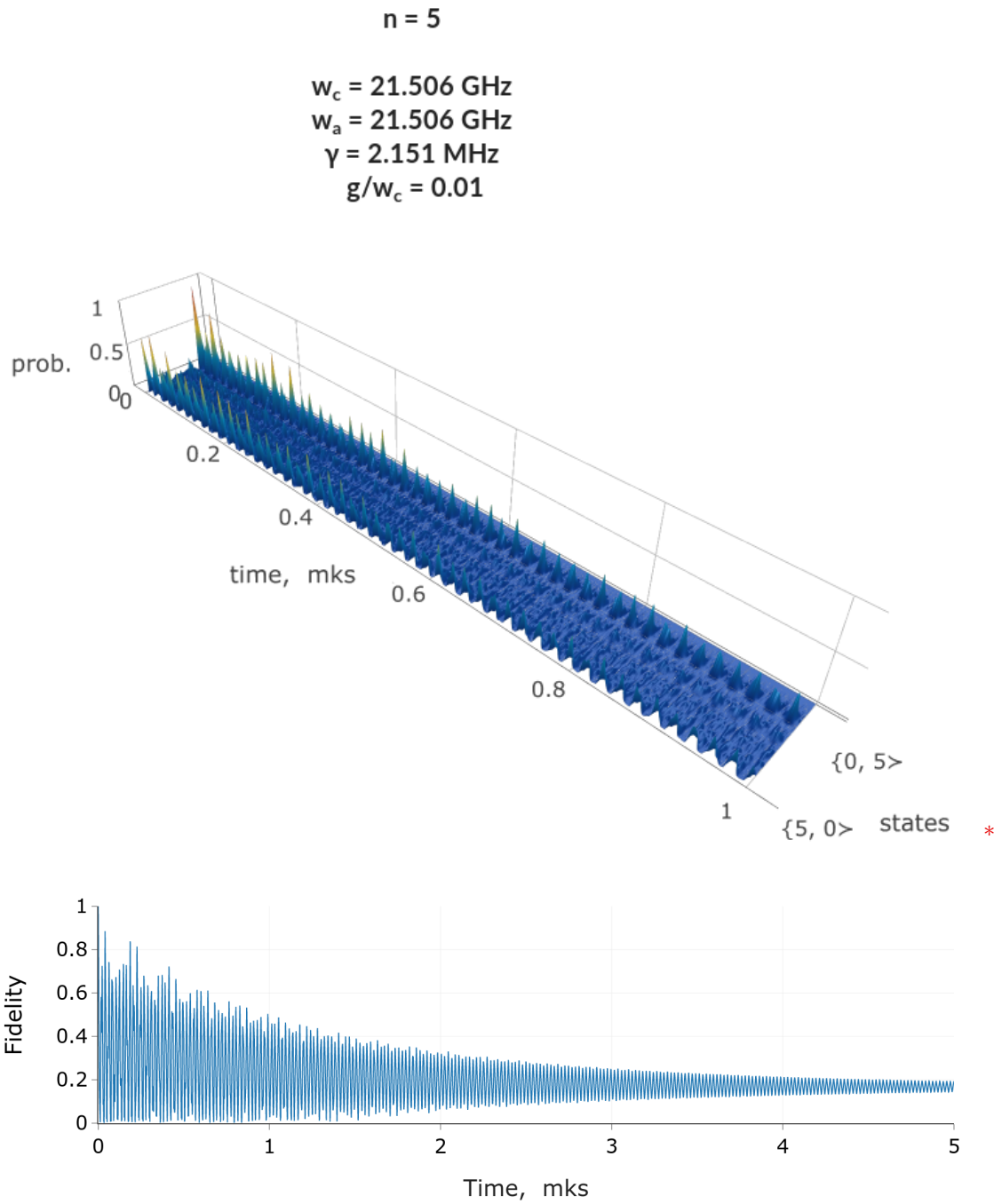


Рисунок 2.12 — Осцилляции в условиях фотонной утечки

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle_{\text{ph}} \{0, 5\}_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{5}_{A_1} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{5}_{A_2}$$

$$|\Psi_1\rangle = |0\rangle_{\text{ph}} \{5, 0\}_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}} \underbrace{|1 \dots 1\rangle}_{5}_{A_1} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{5}_{A_2}$$

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

2.8 Возрождение состояний атомных ансамблей в системе оптических полостей

Группы атомов A_1 и A_2 , распределенные между полостями (модель Та-виса-Каммингса-Хаббарда [52–54]), дают хорошие осцилляции при достаточно большой амплитуде k перехода возбуждений между полостями.

Полное состояние системы описывается вектором

$$|\Psi\rangle = |m_1\rangle_{\text{ph}_1} |m_2\rangle_{\text{ph}_2} \{i, j\}_{\text{at}} = |m_1\rangle_{\text{ph}_1} |m_2\rangle_{\text{ph}_2} \underbrace{|i_1 \dots i_{n_1}\rangle}_{n_1} \underbrace{|j_1 \dots j_{n_2}\rangle}_{n_2}, \text{ где}$$

$|m_1\rangle_{\text{ph}_1}$ — состояние поля полости 1,

$|m_2\rangle_{\text{ph}_2}$ — состояние поля полости 2,

$\{i, j\}_{\text{at}} = \{i\}_{\text{at}_1} \{j\}_{\text{at}_2}$ — состояние атомных групп A_1, A_2 .

Моделирование следующей динамики проводилось для 10 атомов в каждой полости при $k = 3.5g$.

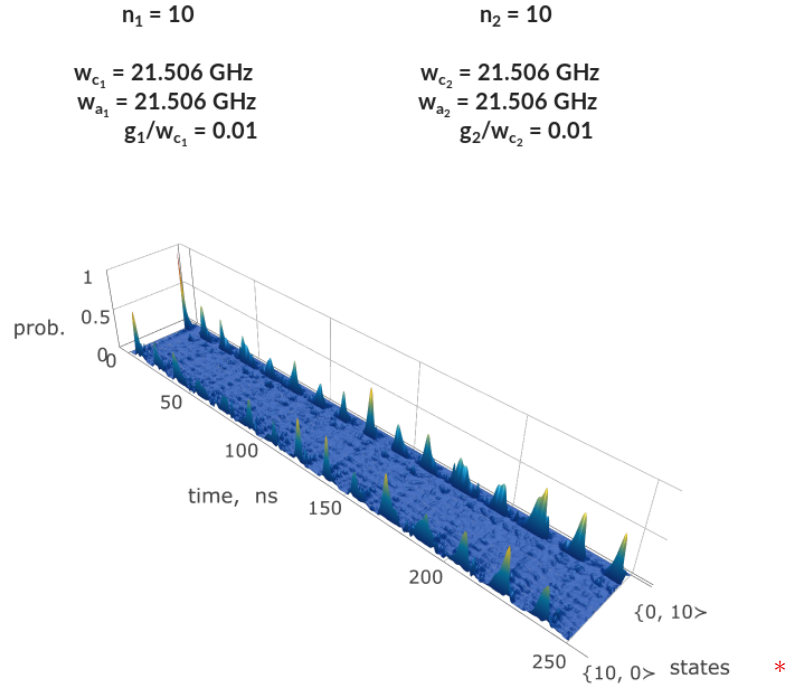


Рисунок 2.13 — Коллапсы и возрождения ансамблевых состояний между полостями

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle_{\text{ph}_1} |0\rangle_{\text{ph}_2} \{0, 10\}_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}_1} |0\rangle_{\text{ph}_2} \{0\}_{\text{at}_1} \{10\}_{\text{at}_2}$$

$$|\Psi_1\rangle = |0\rangle_{\text{ph}_1} |0\rangle_{\text{ph}_2} \{10, 0\}_{\text{at}} = |0\rangle_{\text{ph}_1} |0\rangle_{\text{ph}_2} \{10\}_{\text{at}_1} \{0\}_{\text{at}_2}$$

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

Для 20 атомов в группе была численно найдена граница возникновения осцилляций: амплитуда перехода возбуждений между полостями, равная $k \approx 5g$.

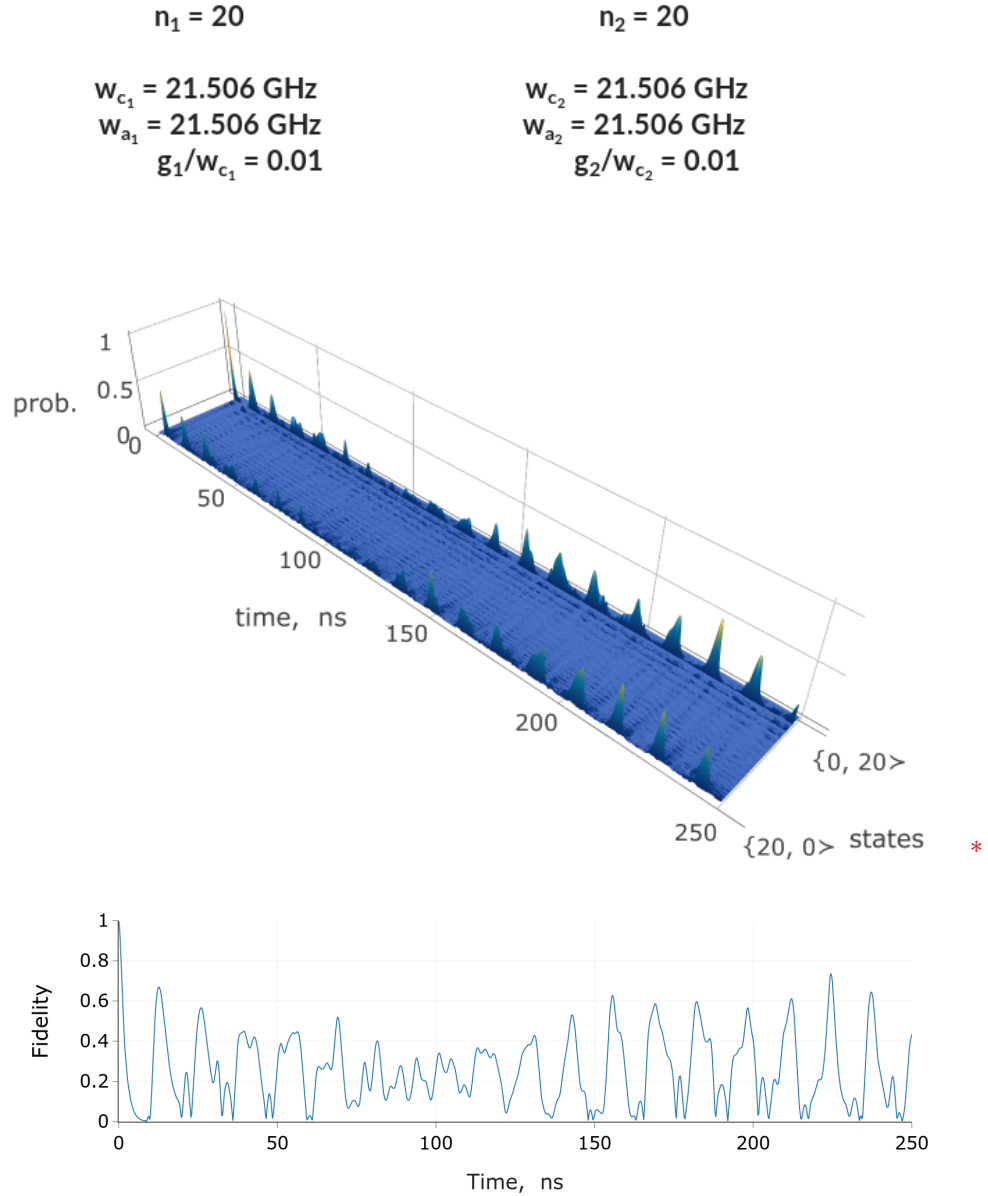


Рисунок 2.14 — Коллапсы и возрождения ансамблевых состояний между полостями

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle_{ph_1} |0\rangle_{ph_2} \{0, 20\}_{at} = |0\rangle_{ph_1} |0\rangle_{ph_2} \{0\}_1 \{20\}_2$$

$$|\Psi_1\rangle = |0\rangle_{ph_1} |0\rangle_{ph_2} \{20, 0\}_{at} = |0\rangle_{ph_1} |0\rangle_{ph_2} \{20\}_1 \{0\}_2$$

высокое качество осцилляций, близкое к 0.8

(вероятность возрождения коллективного состояния
атомного ансамбля в другой полости)

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

2.9 Анализ полученных результатов

Мы выяснили характер осцилляций в ансамбле с четным числом двухуровневых атомов в оптической полости, разделенном на две половины для одной оптической полости и для двух полостей, связанных оптоволоком. Важнейшим результатом данной главы является выяснение зависимости характера осцилляций от числа участвующих атомов. В частности, с ростом числа атомов, сопровождающимся экспоненциальным ростом числа всевозможных состояний света и вещества в полости, происходит уменьшение высоты пиков осцилляций, скорость которого значительно меньше экспоненциальной. Однако относительная высота пиков, по сравнению с амплитудами побочных, не участвующих в осцилляциях, состояний, наоборот, растет. Поэтому при отсечении состояний с малой амплитудой, осцилляции становятся единственным динамическим сценарием в оптической полости.

Осцилляции атомных состояний для ансамбля, распределенного между двумя полостями, связанными оптическим волокном, являются простейшей формой квантового эха. Фактически такое возрождение квантовых состояний является прямым аналогом эффекта, обнаруженного и продемонстрированного экспериментально группой С. Моисеева [100—103], — процесса поглощения пучка фотонов средой с последующим возвратом средой энергии в виде фотонного эха. Такого рода эхо представляет собой важный феномен, поскольку его можно использовать в качестве механизма организации временной квантовой памяти.

2.10 Программная реализация

Алгоритм компьютерного моделирования коллективных осцилляций атомных ансамблей состоит из следующих этапов:

1. Составление матрицы H гамильтониана системы (2.9)

К примеру, для $m = 5$, $n = 3$ базис будет состоять из 10 состояний:

$$\begin{aligned}
 &|5\rangle_{\text{ph}}\{0, 3\rangle_{\text{at}} & |4\rangle_{\text{ph}}\{1, 3\rangle_{\text{at}} & |3\rangle_{\text{ph}}\{2, 3\rangle_{\text{at}} & |2\rangle_{\text{ph}}\{3, 3\rangle_{\text{at}} \\
 &|5\rangle_{\text{ph}}\{1, 2\rangle_{\text{at}} & |4\rangle_{\text{ph}}\{2, 2\rangle_{\text{at}} & |3\rangle_{\text{ph}}\{3, 2\rangle_{\text{at}} \\
 &|5\rangle_{\text{ph}}\{2, 1\rangle_{\text{at}} & |4\rangle_{\text{ph}}\{3, 1\rangle_{\text{at}} \\
 &|5\rangle_{\text{ph}}\{3, 0\rangle_{\text{at}}
 \end{aligned}$$

Размерность базиса из равновесных состояний равна

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^{n+1} i = \frac{1 + (n+1)}{2} \cdot (n+1) = \frac{(n+2)(n+1)}{2}, \quad m \geq n, \\ \sum_{i=n-m+1}^{n+1} i = \frac{(n-m+1) + (n+1)}{2} \cdot (m+1), \quad m < n \end{array} \right. \quad (2.14)$$

и его рост носит **полиномиальный** характер.

Так, для системы $m = 100$, $n = 100$ такой базис будет содержать всего 5151 состояние.

В случае использования стандартного вычислительного базиса $|m\rangle_{\text{ph}}|i_1 \dots i_n\rangle_{A_1}|i_{n+1} \dots i_{2n}\rangle_{A_2}$ число квантовых состояний системы определялось бы по формуле

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=n}^{2n} C_i^{2n} = 2^{2n-1}, \quad m \geq n, \\ \sum_{i=n}^{n+m} C_i^{2n} = \frac{C_n^{2n} + C_{n+m}^{2n}}{2} \cdot m, \quad m < n \end{array} \right. \quad (2.15)$$

и росло **экспоненциально** с увеличением n .

2. Составление вектора начального состояния в базисе равномерных состояний

$$|\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} \vdots \\ |m\rangle_{\text{ph}}\{0, n\}_{\text{at}} \\ \vdots \end{matrix}$$

В случае неунитарной динамики составляются матрица плотности начального состояния

$$\rho(0) = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0| = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots \\ \dots & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{matrix} |m\rangle_{\text{ph}}\{0, n\}_{\text{at}} \\ \dots \\ \dots \end{matrix}$$

и матрица оператора Линдблада, соответствующего фотонной утечке.

3. Вычисление оператора эволюции $U_{dt} = \exp\left(\frac{-iHdt}{\hbar}\right)$ путем диагонализации гамильтониана H и последующего вычисления матричной экспоненты:

для любой эрмитовой матрицы A существует спектральное разложение $A = VDV^*$, где V — унитарная матрица, а D — вещественная диагональная. Поскольку собственные значения и собственные вектора не зависят от базиса, на диагонали D будут стоять собственные значения матрицы A , а матрица V будет состоять из ее собственных векторов.

Кроме того, если

$$A = V \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \dots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} V^*, \quad (2.16)$$

то

$$\exp(A) = V \begin{pmatrix} \exp(\lambda_1) & & \\ & \dots & \\ & & \exp(\lambda_n) \end{pmatrix} V^*. \quad (2.17)$$

Вычисление оператора U_{dt} также может быть произведено с использованием программных пакетов, реализующих быстрое вычисление матричной экспоненты.

4. Расчет унитарной квантовой динамики осуществляется при помощи явной схемы Эйлера: $|\Psi(t + dt)\rangle = U_{dt}|\Psi(t)\rangle$.

Шаг по времени dt выбирается таким образом, чтобы норма $\langle\Psi(t + dt)|\Psi(t + dt)\rangle$ вектор-состояния $|\Psi(t + dt)\rangle$ на протяжении всего времени T моделирования отличалась бы от 1 на допустимую погрешность $\varepsilon = 10^{-3}, 10^{-4}, \dots$, которая выбирается опционально. В случае превышения данной погрешности в процессе квантовой динамики выбирается меньшее значение ε , либо производится моделирование на меньшем временном интервале T .

При неунитарной динамике каждый шаг по времени состоит из двух этапов:

$$\tilde{\rho}(t + dt) = \rho(t) + dt \cdot \frac{i}{\hbar} \cdot L(\rho(t)), \quad (2.18)$$

$$\left(\begin{array}{c} \text{вклад окружения открытой квантовой системы,} \\ \text{неунитарная динамика} \end{array} \right)$$

$$\rho(t + dt) = U_{dt} \cdot \tilde{\rho}(t + dt) \cdot U_{dt}^*. \quad (2.19)$$

$$\left(\text{унитарная динамика} \right)$$

Матрица плотности $\rho(t + dt)$ должна сохранять единичный след с точностью до ε на протяжении всего процесса моделирования:

$$|1 - \text{tr } \rho(t + dt)| < \varepsilon. \quad (2.20)$$

5. Квадраты амплитуд p_1, \dots, p_N вектор-состояний $|\Psi(t + dt)\rangle$ (в случае неунитарной динамики — диагональные элементы матрицы плотности $\rho(t + dt)$), соответствующие вероятностям нахождения системы в базисных состояниях, результируются в выходном файле формата **.csv**. На основе него строится график квантовой динамики моделируемой системы.

Полный листинг программной реализации представлен в [приложении](#).

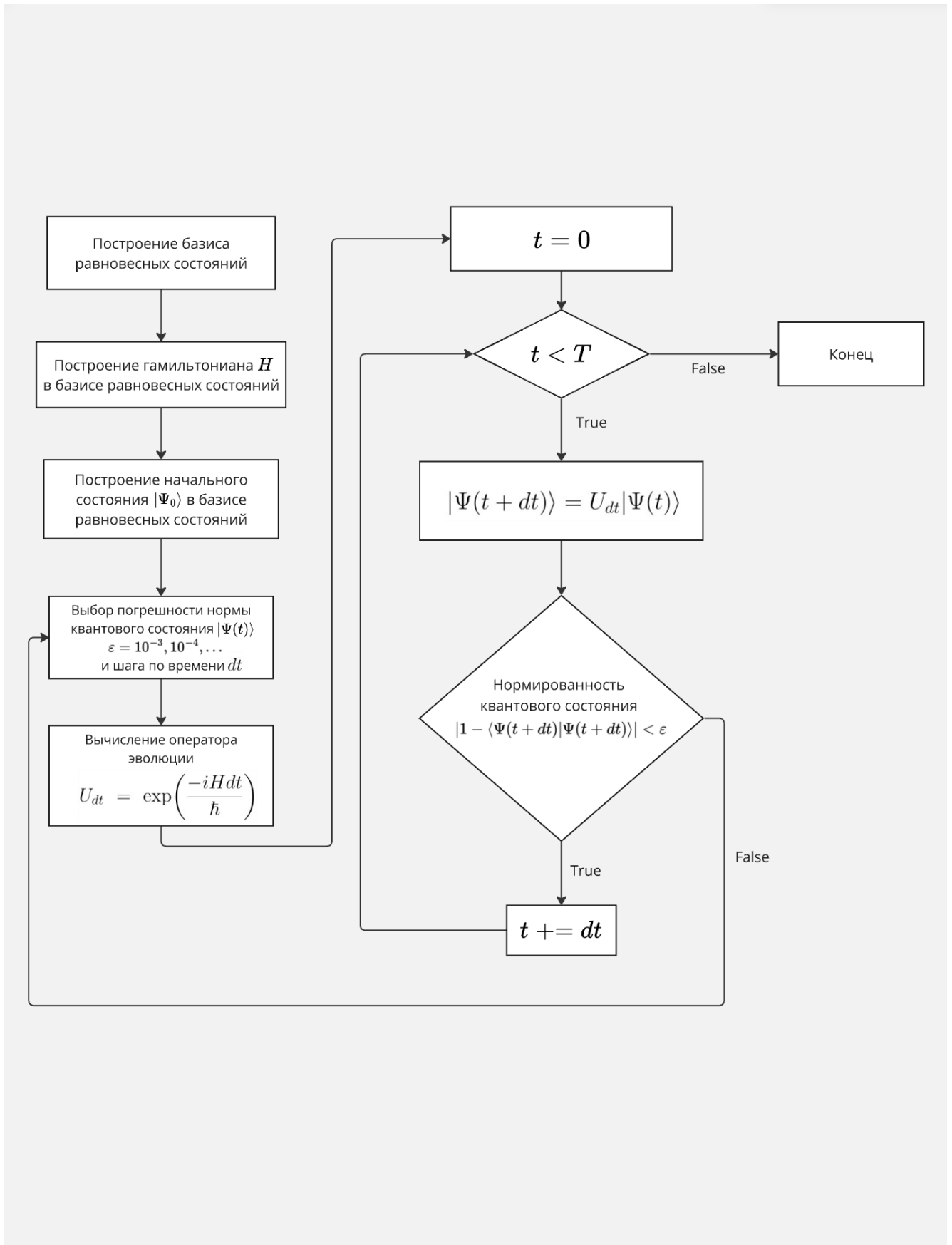


Рисунок 2.15 — Блок-схема: коллективные осцилляции (унитарная динамика)

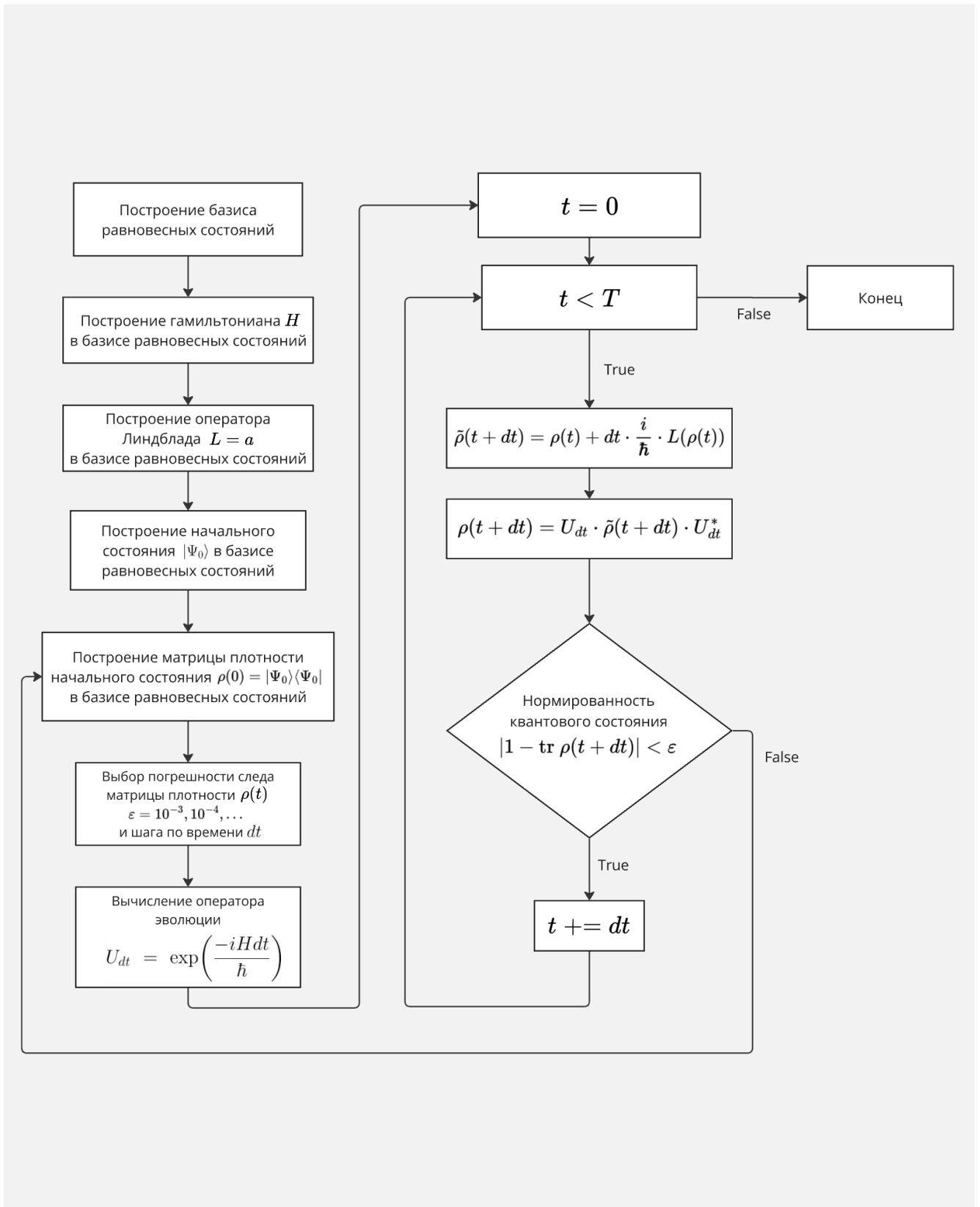


Рисунок 2.16 — Блок-схема: коллективные осцилляции (неунитарная динамика)

2.11 Выводы главы

В настоящей главе была рассмотрена 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 коллективных осцилляций между двумя группами атомов равной численности и равной 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. Была установлена граница его возникновения, выражающаяся через соотношение интенсивности перехода фотонов между полостями и силы взаимодействия атомов с полем, равная $k \approx 3.5g$ для 10 атомов и $k \approx 5g$ для 20 атомов в каждой полости.

Результаты, полученные для ансамблей, состоящих из 20 и более атомов в группе, необходимых для уверенной фиксации выявленного характера осцилляций, потребовали моделирования динамики как чистых, так и смешанных квантовых состояний и не могут быть получены на персональном компьютере. Моделирование квантовой динамики производилось на графических процессорах (GPU) суперкомпьютера Ломоносов с применением технологии параллельных вычислений CUDA, а также пакета матричной алгебры MAGMA (Matrix Algebra on GPU and Multicore Architectures) [91].

Глава 3. Квантовое бутылочное горлышко в атомных превращениях

В данной главе будет рассмотрен парадоксальный эффект 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.

3.1 Постановка задачи

Модель Тависа-Каммингса [13–17] описывает динамику состояний группы двухуровневых атомов, взаимодействующих с одномодовым полем внутри резонатора, удерживающего фотоны с энергией атомного возбуждения. Непосредственная экспериментальная реализация такой модели требует оптической полости, зеркала которой сделаны из сверхпроводящего материала (например, из ниобия), функционирующего при температуре жидкого гелия, и атомов, удерживаемых в определенной области внутри полости с помощью оптических пинцетов [5–7]. Так можно обеспечить длительность жизни фотона в полости, измеряемую несколькими десятками рабиевских осцилляций [42–44], что составляет не более 10^{-4} секунды.

Такие системы могут дать представление о механизме процессов, выходящих за рамки квантовой электродинамики и включающих в себя как перемещение атомов, так и их превращения: в ходе химической реакции или при радиоактивном распаде. В данной главе мы применим модель ТС для анализа вероятности перехода атома в необратимое состояние в результате спонтанной реакции в зависимости от времени при условии интенсивной утечки фотонов из полости. Природа реакции, вызывающей такой переход, или **превращение**, здесь предполагается химической, однако это может быть и радиоактивный распад, индуцированный фотонами (возможность фотоядерных реакций — экспериментальный факт, описанный, к примеру, в работе [104]). Важно лишь то, что в результате реакции атом прекращает взаимодействовать с полем в рамках модели ТС. Мы предполагаем, 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.

Гамильтониан модели ТС для системы n атомов в приближении вращающейся волны [55–57] имеет вид

$$H_{\text{ТС}}^{\text{RWA}} = \hbar\omega a^+ a + \hbar\omega \sum_{i=1}^n \sigma_i^+ \sigma_i + a \bar{\sigma}^+ + a^+ \bar{\sigma}, \quad (3.1)$$

где a, a^+ — полевые, а σ_i, σ_i^+ — атомные операторы, $\bar{\sigma} = \sum_{i=1}^n g_i \sigma_i$, $\bar{\sigma}^+ = \sum_{i=1}^n g_i \sigma_i^+$ — соответствующие операторы коллективной релаксации и возбуждения группы атомов, $\omega = \omega_c = \omega_a$ — частота фотонов моды резонатора, равная частоте атомного перехода, g_i — интенсивность взаимодействия i -го атома с полем, символ «+» означает сопряжение оператора. Этот гамильтониан также может быть дополнен прямым диполь-дипольным взаимодействием между атомами, минуя поле полости.

Контринтуитивный эффект квантового бутылочного горлышка заключается в парадоксальном увеличении времени жизни возбужденного состояния атома в оптической полости при усилении оттока фотонов из нее. Этот эффект имеет чисто квантовую природу.

Мы выясним влияние этого эффекта на описанный выше процесс превращения атома, природа которого для нас, в сущности, не важна. Мы также предполагаем, что вероятность превращения атома, находящегося в основном состоянии, пренебрежимо мала, а для возбужденного состояния вероятность превращения к моменту времени t подчиняется статистике Пуассона $p_t = 1 - e^{-\gamma t}$.

3.2 Фотон-индуцированное превращение атомов

В дополнение к стандартным состояниям атома (основному $|0\rangle$ и возбужденному $|1\rangle$) мы введем особое состояние $|2\rangle$, которое будем называть **превращенным**. Тогда действие атомных операторов σ и σ^+ на атомный кубит определяется как обычно

$$\begin{aligned}\sigma^+|0\rangle &= |1\rangle & \sigma^+|1\rangle &= 0 \\ \sigma|1\rangle &= |0\rangle & \sigma|0\rangle &= 0,\end{aligned}$$

а оператор атомного превращения L_2 определяется следующим образом:

$$L_2|1\rangle = |2\rangle \quad L_2|0\rangle = L_2|2\rangle = 0.$$

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 превратится атом, в данном случае интереса не представляют, так что мы будем учитывать только динамику модели ТС с дополнительными операторами, выражающими само превращение атома, ведущее к его выходу из данной модели.

Таким образом, искомая математическая модель будет описываться основным квантовым уравнением [22]

$$\begin{aligned}i\hbar\dot{\rho} &= [H_{\text{ТС}}^{\text{RWA}}, \rho] + iL(\rho), \\ L(\rho) &= \sum_{i=1}^2 \gamma_i (L_i \rho L_i^+ - \frac{1}{2} \{L_i^+ L_i, \rho\})\end{aligned}\tag{3.2}$$

с операторами Линдблада двух типов:

$$\begin{aligned}L_1 &= a \text{ — вылет фотона из резонатора [22; 84],} \\ L_2 &\text{ — оператор атомного превращения.}\end{aligned}$$

Интенсивности данных процессов 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. Механизм квантового бутылочного горлышка будет заключаться в том, что при большой величине $\gamma_1 = \gamma_{\text{out}}$ время жизни возбужденного состояния атома удлиняется, что приводит к росту вероятности его превращения. Увеличение времени жизни имеет чисто квантовую природу и подробно описано в статьях [60] и [80].

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

Здесь

$$|i\rangle_{\text{ph}} \text{ — фоковское состояние поля (число фотонов в полости, } i = \overline{0,1}),$$

$|j\rangle_{\text{at}}$ — состояния 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).

Ее гамильтониан:

$$H = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\omega_a & g \\ 0 & 0 & g & \hbar\omega_c \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Оператор уничтожения фотона (улет фотона из полости):

$$L_1 = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Оператор атомного превращения:

$$L_2 = \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{array}{c} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{array} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

3.3 Программная реализация

Алгоритм компьютерного моделирования квантового бутылочного горлышка состоит из следующих этапов:

1. Составление матрицы H гамильтониана системы (3.3)
2. Составление вектора начального состояния

$$|\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{matrix}$$

Составление матрицы плотности начального состояния

$$\rho(0) = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0| = \begin{matrix} & \begin{matrix} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} & |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} & |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} & |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{matrix} \\ \begin{matrix} |0\rangle_{\text{ph}}|2\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \\ |0\rangle_{\text{ph}}|1\rangle_{\text{at}} \\ |1\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_{\text{at}} \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

и операторов Линдблада (3.4), (3.5).

Матрицы, соответствующие операторам Линдблада (3.4), (3.5), а также матрица плотности состояния системы $\rho(t)$ были реализованы как разреженные, поскольку при численном моделировании динамики для обнаружения эффекта квантового бутылочного горлышка потребовался достаточно малый шаг dt по времени (в пределах 0.1-1 ns) на интервале $T = 1$ mks.

3. Вычисление оператора эволюции $U_{dt} = \exp\left(\frac{-iHdt}{\hbar}\right)$ (3)

4. Моделирование неунитарной квантовой динамики (4)

Решение основного квантового уравнения (3.2) производилось при помощи метода Эйлера. Выбор данного метода обусловлен необходимостью проведения нескольких тысяч численных экспериментов на достаточно большом временном интервале. Применение более точных вычислительных методов значительно увеличило бы времязатратность вычислений без соразмерного улучшения полученных результатов.

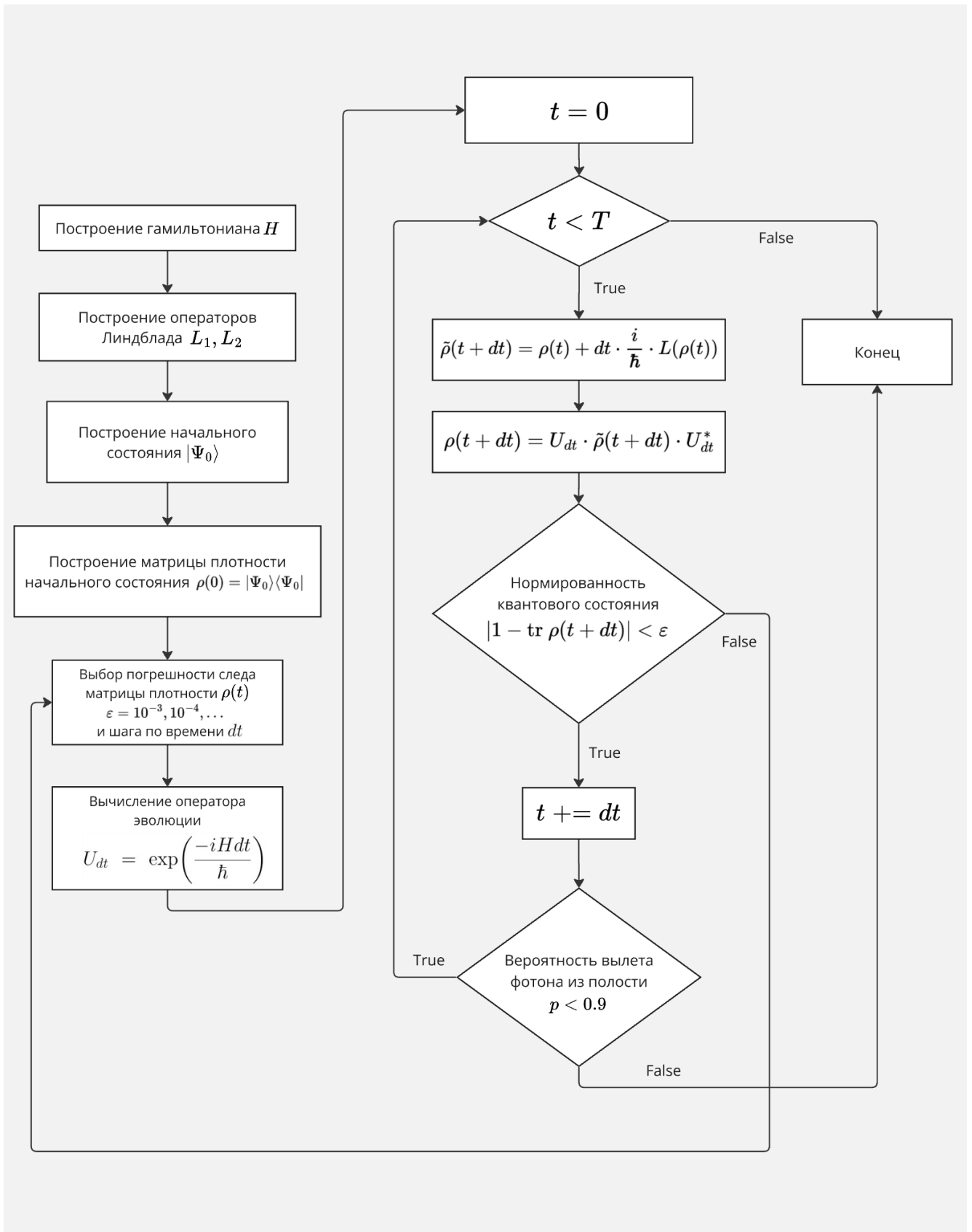


Рисунок 3.1 — Блок-схема: квантовое бутылочное горлышко в атомных превращениях (для одной пары значений интенсивностей $\gamma_{\text{out}}, \gamma_{\text{ex}}$)

Каждый шаг по времени состоит из двух этапов:

$$\tilde{\rho}(t + dt) = \rho(t) + dt \cdot \frac{i}{\hbar} \cdot L(\rho(t)), \quad (3.6)$$

(неунитарная динамика: утечка фотонов, атомное превращение)

$$\rho(t + dt) = U_{dt} \cdot \tilde{\rho}(t + dt) \cdot U_{dt}^*. \quad (3.7)$$

(унитарная динамика)

Основной задачей здесь 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 обнаружен, и при этом качественно.

Представленные ниже результаты компьютерного моделирования были получены на суперкомпьютере Ломоносов-2 [105]. Вычисления производились параллельно на 100 процессорных узлах: каждый узел моделировал квантовую 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 для диапазона $g \in [0.001 \cdot w, 0.1 \cdot w]$ — как для условий ультраслабого взаимодействия, так и для условий границы применимости приближения RWA [55–57] в модели ТС.

3.4 Результаты компьютерного моделирования

Ниже будут приведены результаты компьютерного моделирования влияния эффекта квантового бутылочного горлышка на вероятность атомного превращения при различных параметрах квантовой системы.

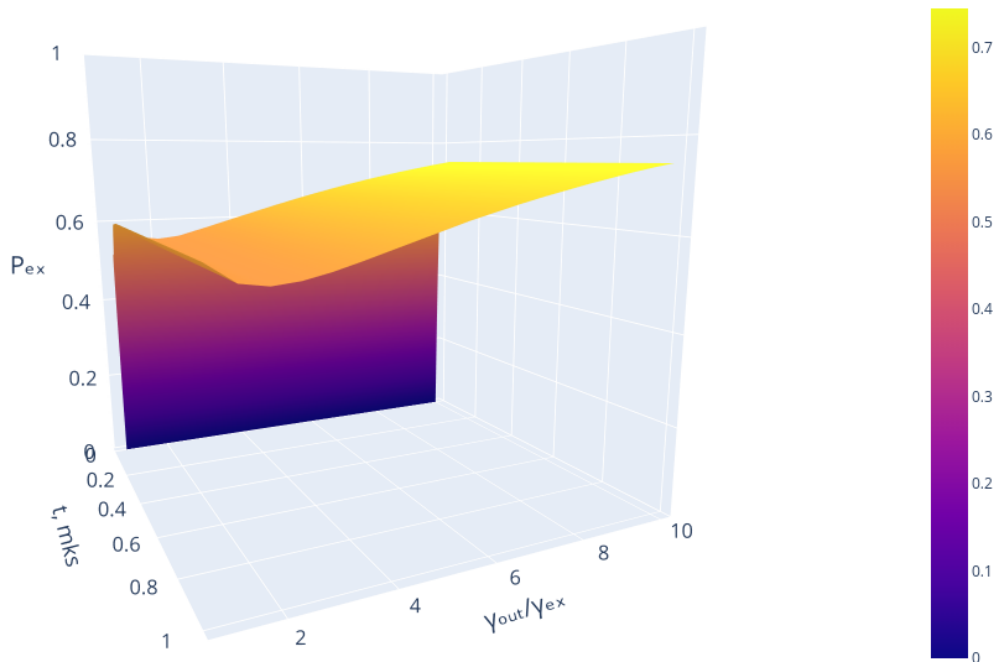


Рисунок 3.2 — Зависимость вероятности превращения атома от интенсивности γ_{out} вылета фотона и времени t
 $g \leq \gamma_{\text{out}} \leq 10g$ $\gamma_{\text{ex}} = g = \text{const}$

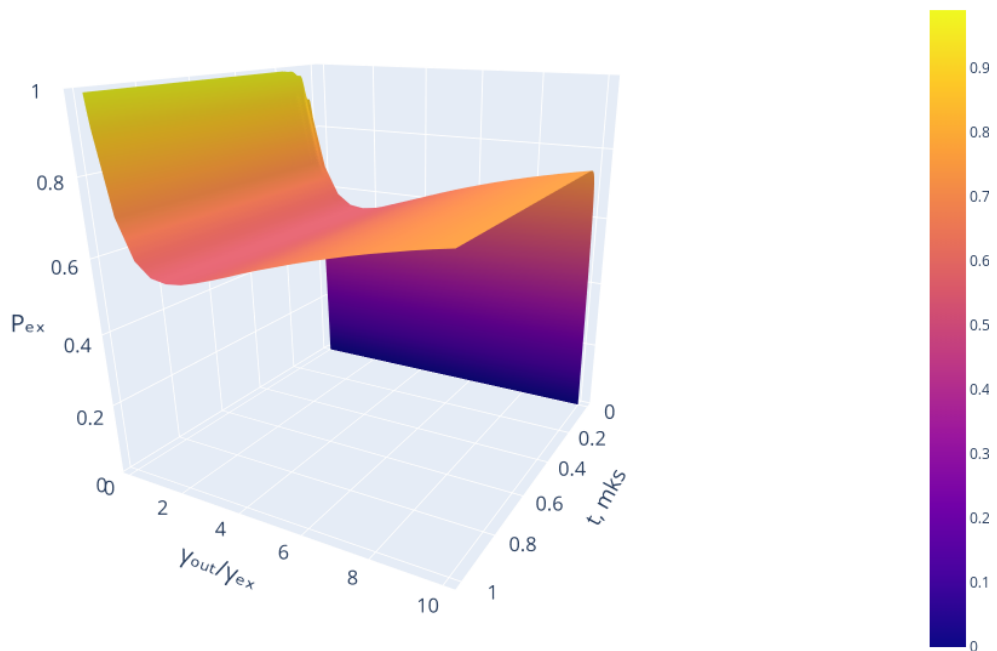


Рисунок 3.3 — Зависимость вероятности превращения атома от интенсивности γ_{out} вылета фотона и времени t
 $0.01g \leq \gamma_{\text{out}} \leq 10g$ $\gamma_{\text{ex}} = g = \text{const}$

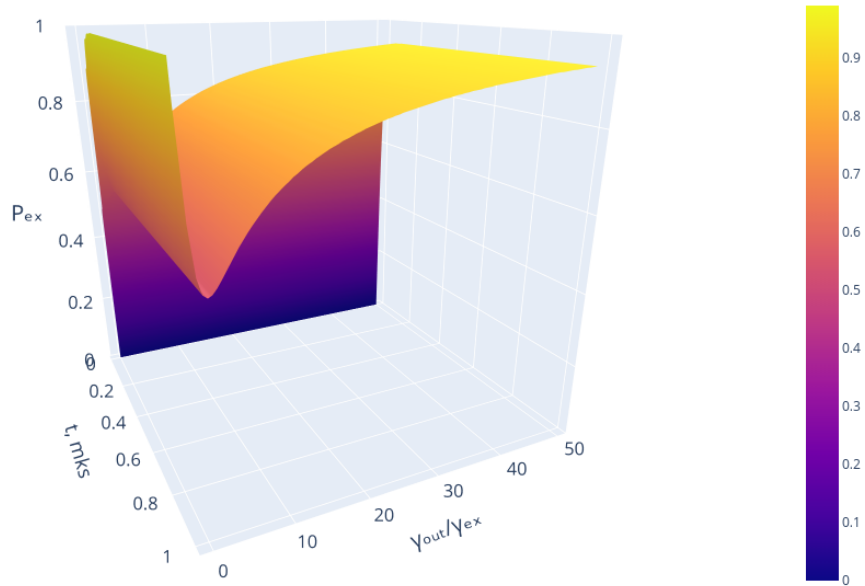


Рисунок 3.4 — Зависимость вероятности превращения атома от интенсивности γ_{out} вылета фотона и времени t

$$0.01g \leq \gamma_{\text{out}} \leq 50g \quad \gamma_{\text{ex}} = g = \text{const}$$

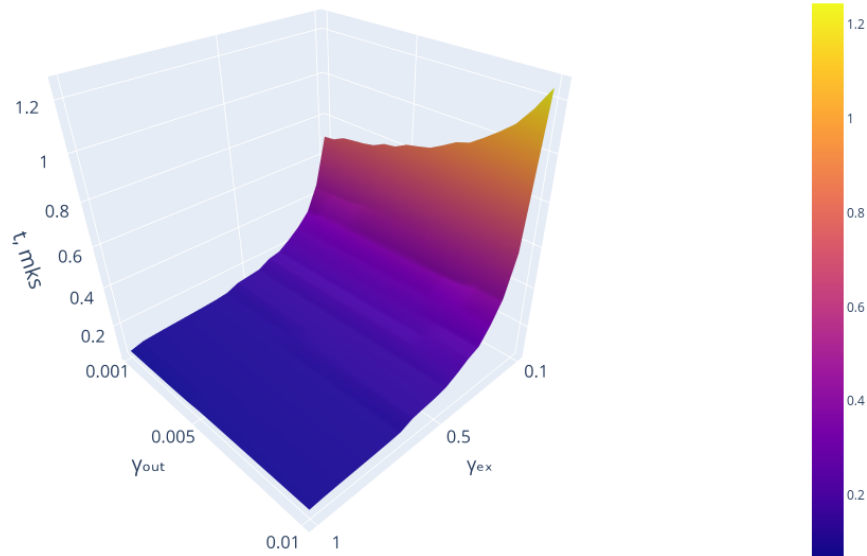


Рисунок 3.5 — Зависимость времени достижения целевой вероятности вылета фотона от интенсивности γ_{out} утечки и интенсивности γ_{ex} атомного превращения

$$10^{-3}g \leq \gamma_{\text{out}} \leq 10^{-2}g$$

$$0.1g \leq \gamma_{\text{ex}} \leq g$$

целевая вероятность вылета фотона из полости: 0.9^*

Шаг моделирования по времени $dt = 0.1 \text{ ns}$, $g/\hbar\omega = 0.01$.

*при достижении данного значения численный эксперимент прекращается

3.5 Выводы главы

В результате численного моделирования было обнаружено, что эффект квантового бутылочного горлышка способен существенно повлиять на вероятность атомных превращений. Эта возможность реализуется при малой энергии атомного возбуждения относительно энергии атомного превращения. Возбуждение атома может затрагивать либо его электронную оболочку (что влияет на химические превращения атома), либо ядро (что способно повлиять на ядерные реакции). При большом усилении интенсивности утечки фотонов возбуждающей моды за пределы оптической полости вероятность превращения атома парадоксальным образом повышается. Этот эффект может быть использован в том числе и для понижения вероятности атомного превращения: для этого необходимо увеличить время жизни фотона в пределах оптической полости. Возбуждающая атом фотонная мода служит своеобразным триггером, переключающим режимы динамики самого атома, притом что энергия этой моды на много порядков меньше энергии самого атомного превращения.

Данный эффект, в силу его контринтуитивной, чисто квантовой природы, не учитывается в имеющихся моделях атомных превращений. Его включение в такие модели увеличит область их применения в практических целях — как в химии, так и в приложениях физики атомного ядра.

Глава 4. Оптический отбор темных состояний ансамблей многоуровневых атомов

4.1 Темные состояния

Описание собственных состояний в модели Тависа-Каммингса является весьма непростой задачей. Ее решение для двухуровневых атомов приведено в диссертации Михаэля Тависа [14], и оно нетривиально. Но особый интерес представляет класс собственных состояний, атомная компонента которых состоит из **темных состояний** [73]. Так называют атомные состояния, которые не могут ни испустить, ни поглотить фотон в силу того, что интерференция атомов блокирует их взаимодействие с полем.

К примеру, для состояния

$$|s\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad (4.1)$$

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 (4.1) не возымеет никакого эффекта.

Состояние (4.1) является **темным** и называется **синглетом**.

Алгебраическое описание темных состояний ансамблей многоуровневых атомов можно найти в работе [23], однако их явный вид был найден только для ансамблей двухуровневых атомов. В работе [73] доказано утверждение о том, что размерность темного подпространства состояний n двухуровневых атомов равна

$$\dim(D_n^2) = \begin{cases} C_n^k - C_n^{k-1} & \text{при } n = 2k, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (4.2)$$

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

$$\frac{1}{2^{n/4}} \bigotimes_{j=1}^{n/2} (|01\rangle_j - |10\rangle_j), \quad (4.3)$$

где индекс $j = 1, \dots, n/2$ означает номер пары в произвольном разбиении группы из n атомов.

Для трехуровневых атомов имеется лишь гипотеза о структуре темных состояний, которая была подтверждена в настоящей работе для весьма ограниченного числа атомов в ансамбле (не более 9). Размерность же темного подпространства была численно определена для двух десятков атомов в ансамбле с использованием суперкомпьютера (глава 5).

4.2 Практическая значимость темных состояний

Темные состояния имеют множество применений. В частности, их роль в организации межатомного взаимодействия рассмотрена в работе [106], для контроля твердотельных спинов — в работе [107], для управления макроскопическими квантовыми системами — в работе [108]. Роль участия темного состояния в процессе фотосинтеза описана в работе [109]. Некоторые методы получения темных состояний в квантовых точках представлены в работах [110] и [111]. Разрушение темных состояний магнитным полем или модулированной лазерной поляризацией рассматривается в работе [112].

Темные состояния обладают ненулевой энергией и по этой причине могут служить энергетическим микроаккумулятором для различных наноустройств [24]. Кроме того, будучи свободными от декогерентности (поскольку не взаимодействуют со светом), они могут быть использованы для достаточно длительного хранения сложных состояний в квантовых вычислениях.

Темные состояния широко используются в квантовой криптографии: использование синглетных состояний дает дополнительные преимущества в обеспечении устойчивости квантовых протоколов. Так, например, ключевое место в построении протокола АКМ2017 [72] занимает подготовка синглетного состояния вида (4.1).

Получение темных состояний двухуровневых атомов, описанное в работе [111], опирается на эффект Штарка-Зеемана [74; 75]. В данной главе мы опишем технически более простой метод оптического отбора, основанный на томографии электромагнитного поля вне полости, который, в частности, позволяет получать многоуровневые темные состояния, и притом строго определенного вида.

4.3 Многомерные синглеты

Рассмотрим обобщение модели Тависа-Каммингса на d -уровневые атомы. Гамильтониан ТС для n атомов с энергиями g_i^j взаимодействия с полем выделенной моды j имеет вид

$$\begin{aligned}
 H_{\text{ТС}}^j &= \hbar\omega a_j^+ a_j + \hbar\omega \sum_{i=1}^n \sigma_{ji}^+ \sigma_{ji} + (a_j^+ + a_j) \sum_{i=1}^n g_i^j (\sigma_{ji}^+ + \sigma_{ji}), \\
 H_{\text{ТС}}^{j, \text{RWA}} &= \hbar\omega a_j^+ a_j + \hbar\omega \sum_{i=1}^n \sigma_{ji}^+ \sigma_{ji} + a_j^+ \bar{\sigma}_j + a_j \bar{\sigma}_j^+, \\
 \bar{\sigma}_j &= \sum_{i=1}^n g_i^j \sigma_{ji},
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

где RWA-приближение [55–57] справедливо при $g_i^j/\hbar\omega \ll 1$, верхним символом «+» обозначено сопряжение операторов. Здесь a_j, a_j^+ — полевые операторы уничтожения и рождения фотона моды j , $\sigma_{ji}, \sigma_{ji}^+$ — атомные операторы релаксации и возбуждения атома i , соответствующие моде j .

Пусть для ансамбля A , состоящего из n одинаковых d -уровневых атомов, различающихся только энергиями взаимодействия с модами поля, определен граф G возможных разрешенных переходов между уровнями для каждого j -го атома, $j = 1, 2, \dots, n$. Вершины G соответствуют уровням энергии, ребра — разрешенным переходам между ними. Тогда G задает набор всевозможных мод J_G , с которыми может взаимодействовать каждый атом. Многомодовый гамильтониан, соответствующий графу G , имеет вид

$$\begin{aligned}
 H_{\text{ТС}}^G &= \sum_{j \in J_G} H_{\text{ТС}}^j, \\
 H_{\text{ТС}}^{G, \text{RWA}} &= \sum_{j \in J_G} H_{\text{ТС}}^{j, \text{RWA}}.
 \end{aligned}$$

Введем обозначение $\bar{\sigma}_G = \sum_{j \in J_G} \bar{\sigma}_j$. Тогда подпространство темных атомных состояний для ансамбля с возможными переходами G есть $\text{Ker}(\bar{\sigma}_G^+ + \bar{\sigma}_G)$ и $\text{Ker}(\bar{\sigma}_G)$ в точной модели и в RWA-приближении [55–57] соответственно. Заметим, что некоторые моды могут допускать RWA-приближение, тогда как другие — нет. К разным атомам применимость RWA также может быть различной. Мы

будем рассматривать только случай применимости этого приближения ко всем модам и атомам одновременно.

Через $g^j(r)$ обозначим амплитуду перехода по ребру r , соединяющему пару состояний в графе G для атома j .

Сделаем граф G ориентированным, задав ориентацию любого ребра по направлению к уменьшению энергии атомного состояния. Зафиксировав номер атома $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, пометим в графе G ребра r числами $g^j(r)$. Получится n графов G^j , изоморфных G , для каждого атома — свой. Предположим, что каждой паре «атом j , состояние i » можно приписать положительный вес $w(j, i)$ так, что для любой пары j, j' атомов отношение $g^j(r)/g^{j'}(r) = w(j', i_{in})/w(j, i_{in}) = w(j', i_{fin})/w(j, i_{fin})$ для любого ребра r с началом i_{in} и концом i_{fin} .

Рассмотрим состояние атомов

$$|D_{G,A}\rangle = \sum_{\pi \in S_d} (-1)^{\sigma(\pi)} w(1, \pi(1)) \dots w(d, \pi(d)) |\pi(1), \dots, \pi(d)\rangle, \quad (4.5)$$

где π пробегает все перестановки на множестве атомов $1, 2, \dots, d$, а $\sigma(\pi)$ обозначает четность перестановки π . Состояние $|D_{G,A}\rangle$ называется G, A -мультисинглетом. Мультисинглет называется равновесным, если все веса $w(j, i)$ равны единице. Мультисинглет всегда является темным в RWA [55–57], а равновесный мультисинглет — темным для точного гамильтониана. Чтобы показать это, рассмотрим следующий пример.

Пример. Для $d = 2$ состояние (4.5) с точностью до нормировки примет вид

$$g^1|01\rangle - g^2|10\rangle, \quad (4.6)$$

и оно является темным в RWA-приближении [55–57]. Из определения весов $w(j, i)$ следует, что сумма двух слагаемых из (4.5), отличающихся только перестановкой состояний одной пары атомов, будет с точностью до коэффициентов иметь вид (4.6). С другой стороны, состояние (4.6) будет темным для точного гамильтониана тогда и только тогда, когда $g^1 = g^2$.

Подграф $G' \subseteq G$ называется полным, если вместе с любой своей вершиной он содержит все вершины, соединенные с ней нисходящим ребром, вместе с этим ребром. Набор графов G_1, G_2, \dots, G_r графа G назовем покрытием, если он состоит из полных подграфов и их объединение дает G . Покрытие точное, если любой $G_i (i = 1, 2, \dots, r)$ является компонентой связности графа G .

Для ансамбля, состоящего из n d -уровневых атомов, в свете работы [80] правдоподобной является следующая гипотеза о явном виде темных состояний.

Гипотеза 1.

1) Любое темное состояние в гамильтониане $H_{TC}^{G, RWA}$ есть линейная комбинация тензорных произведений G_i, A_i -мультисинглетов для некоторых накрытий $\{G_i\}$ графа G и разбиений множества всех атомов A на подмножества A_i .

2) Темные состояния для точного гамильтониана H_{TC}^G являются в точности линейными комбинациями равновесных G_i, A_i -мультисинглетов для точных накрытий $\{G_i\}$ графа G и соответствующих разбиений A на подмножества A_i .

В частности, из этого следует, что при связном графе G темные состояния в точной модели бывают лишь для ансамблей с числом атомов, кратным d . Данная гипотеза строго доказана только для $d = 2$ в работе [73].

В ансамбле разнородных атомов, как правило, нет совпадающих частот переходов. Однако в квантовых точках, где «атомы» можно фактически формировать искусственно, можно добиться и совпадения частот некоторых переходов в спектрах неодинаковых структур. В этом случае можно исследовать получающиеся темные состояния.

Например, для трехатомного ансамбля трехуровневых атомов с энергиями переходов $\hbar\omega$ между уровнями $0 \leftrightarrow 1$, $0 \leftrightarrow 2$, $1 \leftrightarrow 2$ единственным темным состоянием в RWA [55–57] без учета нормировки будет мультисинглет

$$D_3 = |012\rangle + |120\rangle + |201\rangle - |021\rangle - |102\rangle - |210\rangle. \quad (4.7)$$

4.4 Метод оптического отбора темных состояний

Мы объясним метод оптического отбора на примере ансамбля, состоящего из двух двухуровневых атомов. Будем обозначать базисные состояния системы атомов и поля через $|m\rangle_{\text{ph}}|n_1 n_2\rangle_{\text{at}}$, где m — число фотонов в резонаторе, n_1, n_2 — числа возбуждения первого и второго атомов: $|0\rangle$ — основное состояние, $|1\rangle$ — возбужденное. Схема отбора состоит из последовательных шагов отбора, которая начинается с заранее приготовленного состояния поля и

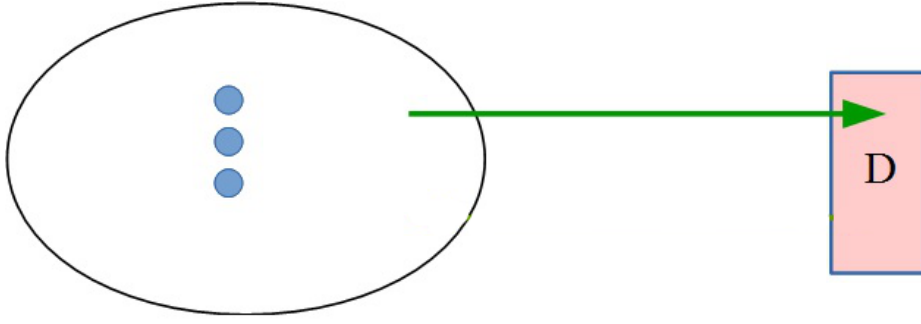


Рисунок 4.1 — Оптический отбор.

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.

атомов $|\Psi(0)\rangle|0\rangle_{\text{ph}}|\Phi_0\rangle_{\text{at}}$, где $|\Phi_0\rangle_{\text{at}} = \alpha|00\rangle + \beta|s\rangle$, $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ — двухатомный синглет, $\alpha|00\rangle + \beta|s\rangle$ — произвольное состояние двухатомной системы. Например, состояние атомного ансамбля $|01\rangle$ можно представить как $|01\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|t\rangle + |s\rangle)$, где $|t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$ — триплетное состояние. Остальные два триплета имеют вид $|00\rangle$ и $|11\rangle$.

Шаг процесса с номером i состоит в следующем. В момент времени τ_i мы имеем состояние ρ_i системы «атомы + поле», при этом вероятность присутствия фотонов в полости исчезающе мала. Мы запускаем в резонатор один фотон, после чего включаем ячейку Поккельса, расположенную внутри резонатора и отражающую фотон в направлении детектора (рис. 4.1), и фиксируем время срабатывания детектора. После этого шага делаем следующие точно так же, набирая статистику времен срабатывания детектора.

Мы предполагаем, что время запуска фотона в полость мало по сравнению как с временем рабиевской осцилляции между состояниями $|1\rangle_{\text{ph}}|00\rangle_{\text{at}}$ и $|0\rangle_{\text{ph}}\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_{\text{at}} + |10\rangle_{\text{at}})$, так и с ожидаемым временем вылета фотона из полости, и им можно пренебречь, считая запуск практически мгновенным.

Пусть ρ'_i — состояние системы в полости в момент i -го включения ячейки Поккельса. Поскольку фотон появляется в полости очень быстро, можно считать, что это состояние получается из ρ_i добавлением фотона в полость: $\rho'_i = a^+\rho_i a$. После этого мы ждем время τ_{click_i} , когда в детектор попадет фотон, вылетевший из полости.

Время срабатывания детектора τ_{click_i} на шаге i является случайной величиной, зависящей также от шага i , так что решая основное квантовое уравнение

(4.8), мы лишь найдем для нее верхнюю границу t_i . Функция распределения τ_{click_i} меняется с каждым шагом и является априорной функцией распределения, которую мы находим по уравнению (4.8), не прибегая ни к каким экспериментам. Это вычисление нужно лишь для того, чтобы найти верхнюю границу t_i ожидания щелчка детектора на шаге i . Матрицу плотности ρ_{i+1} можно найти как решение задачи Коши для основного квантового уравнения (4.8), соответствующего вылету фотона из полости, для начального состояния $\rho'_i(0) = \rho'_i$, с тем условием, что для момента t_i это решение $\rho'_i(t_i)$ не содержит фотонов в полости с исчезающе малой вероятностью ошибки (ошибка может произойти только когда мы прекратили ждать срабатывания детектора, а фотон все-таки остался в полости или может быть испущен позже).

Итак, верхнюю границу t_i для τ_{click_i} на шаге i мы ищем численно, решая основное квантовое уравнение (4.8). Мы полагаем $\rho_{i+1} = \rho'_i(t_i)$. После вылета фотона из полости состояние атомов внутри полости не меняется, поэтому мы можем произвольно увеличить время ожидания полного вылета до значения, большего найденного t_i для уменьшения вероятности ошибки.

Мы будем делать так определенные последовательные шаги, каждый раз фиксируя время срабатывания детектора на вылетающий из полости фотон. Если момент $\tau_i - \tau_{i-1}$ щелчка детектора на шаге i рассматривается как случайная величина, то функция распределения этой величины находится как $P(t) = \langle 0_{\text{ph}} 0_1 0_2 | \rho(t) | 0_{\text{ph}} 0_1 0_2 \rangle + \langle 0_{\text{ph}} s | \rho(t) | 0_{\text{ph}} s \rangle$, то есть как вероятность того, что фотон вылетел из полости за время t , считая нулевой отметкой начало шага i . Плотность распределения времени срабатывания детектора есть $dP(t)/dt$. После достаточно большого числа последовательных шагов мы считаем среднее время $d\tau$ по всем значениям τ_{click_i} срабатывания детектора в наших численных экспериментах. Далее мы установим факт достаточно быстрого подавления внедиагональных элементов матрицы плотности ρ_i с ростом i , так что распределение величины τ_{click_i} для разных i будет практически одинаковым для больших i и сойдется к распределению, характерному либо для триплета $|00\rangle$, либо для синглета $|s\rangle$. Таким образом, величины времен ожидания щелчка детектора t_i , начиная с момента исчезновения недиагональных элементов, будут одинаковы. Обозначим их через dT .

Если среднее время $d\tau$ жизни фотона меньше некоторого порога $d\tau_{cr}$, в полости находится синглет $|s\rangle$. В противном случае мы имеем триплет $|00\rangle$,

состояние бракуется и вся серия экспериментов начинается заново — с выбора случайного начального состояния атомов.

Срабатывание на шаге i детектора, в который попадает фотон, отраженный ячейкой Поккельса, происходит с замедлением, которое меняется между нулем и $\tau_{\text{click}_i} = \tau_i - \tau_{i-1}$. Оно складывается из двух факторов: а) время срабатывания самой ячейки (она может не перекрывать всю полость и потому, даже если в полости есть фотон, он не отразится сразу при прохождении вдоль полости) и б) возможность поглощения фотона компонентой $|00\rangle$ атомного состояния полости.

Если первоначальное состояние атомов $\rho_0 = |s\rangle_{\text{at}}\langle_{\text{at}}s|$, то мы имеем синглет и среднее время жизни a_s фотона в полости будет коротким. Если же $\beta = 0$, то мы имеем триплет $\rho_0 = |00\rangle_{\text{at}}\langle_{\text{at}}00|$ и среднее время жизни фотона a_t будет длиннее, так как за время бездействия ячейки Поккельса фотон может с ненулевой вероятностью поглотиться ансамблем атомов. Таким образом, достаточно взять статистический барьер для принятия решения $d\tau_{cr} = (a_s + a_t)/2$.

Считая применимым RWA-приближение [55–57], рассмотрим в качестве математической модели шага нашего процесса основное квантовое уравнение [22] с оператором Линдблада a — удаление фотона из полости [22; 84]:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\rho} &= [H, \rho] + i\mathcal{L}(\rho), \\ \mathcal{L}(\rho) &= \gamma(a\rho a^\dagger - \frac{1}{2}\{a^\dagger a, \rho\}), \\ H &= H_{\text{ТС}}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Его решение $\rho(t)$ можно приближенно найти, представив в виде последовательности двух шагов, из которых на первом делается шаг в решении унитарной части (4.8): $\tilde{\rho}(t + dt) = e^{-iHdt/\hbar}\rho(t)e^{iHdt/\hbar}$, а на втором — шаг в решении уравнения (4.8) с удаленным коммутатором:

$$\rho(t + dt) = \tilde{\rho}(t + dt) + \frac{\gamma}{\hbar}(a\tilde{\rho}a^\dagger - \frac{1}{2}\{a^\dagger a, \tilde{\rho}\})dt. \quad (4.9)$$

Грубо оценить параметр γ можно так. Поскольку изменение матрицы плотности на втором шаге, отнесенное к времени dt , за которое свет преодолевает длину полости, составляет величину эффективности ячейки Поккельса e_p : $0 < e_p \leq 1$, мы имеем $\frac{\gamma dt}{\hbar} = e_p$, откуда $\gamma = e_p \hbar / dt$. Для атома Rb85 длина полости, равная половине длины волны фотона, составляет 0.7 см , и мы имеем $\gamma \approx 10^{-17} e_p$ эрг.

Предположим, что мы имеем один из двух вариантов: а) $|\Phi_0\rangle_{\text{at}} = |00\rangle$, б) $|\Phi_0\rangle_{\text{at}} = |s\rangle$. 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. Варианты а) или б) имеют место, например, если начальное состояние пары атомов имеет вид $|01\rangle$, так как в этом случае щелчок детектора при приготовлении исходного состояния для первого шага уже означает, что мы имеем состояние $|00\rangle$, а отсутствие щелчка в течение достаточно длительного времени — что мы имеем синглет $|s\rangle$.

Теперь пусть оба числа α и β ненулевые. Тогда в матрице плотности состояния атомов в базисе $\{|00\rangle, |s\rangle\}$, получаемой в результате описанной последовательности, внедиагональные члены будут подавляться с ростом числа шагов, так что в пределе матрица плотности полностью распадется на $|00\rangle\langle 00|$ с вероятностью $|\alpha|^2$ и $|s\rangle\langle s|$ с вероятностью $|\beta|^2$, и мы придем к уже разобранному случаю двух несовместных альтернатив. Подавление внедиагональных элементов матрицы плотности установлено численным моделированием. Время T_{non} полного подавления внедиагональных элементов матрицы плотности получается суммированием всех временных отрезков ожидания полного вылета фотона из полости: $T_{\text{non}} = \sum_{i=0}^L t_i$ где L — минимальное значение шага, на котором внедиагональные элементы матрицы ρ_L становятся пренебрежимо малыми. График времени T_{non} полного подавления внедиагональных элементов матрицы плотности в зависимости от силы g взаимодействия атомов с полем приведен на рисунке 4.2.

Моменты щелчков детектора $d\tau_1, d\tau_2, \dots, d\tau_{L_s, t}$ в последовательных численных экспериментах соответствуют независимой выборке из значений данных величин. Значения L_s, L_t для двух конкурирующих гипотез будут различаться ненамного. По центральной предельной теореме среднее арифметическое $\xi = \sum_{i=1}^L d\tau_i / L$ будет иметь при больших L нормальное распределение с центрами a_s и a_t , которые представляют собой средние времена жизни фотона в полости для двух альтернативных гипотез: $a_s < a_t$.

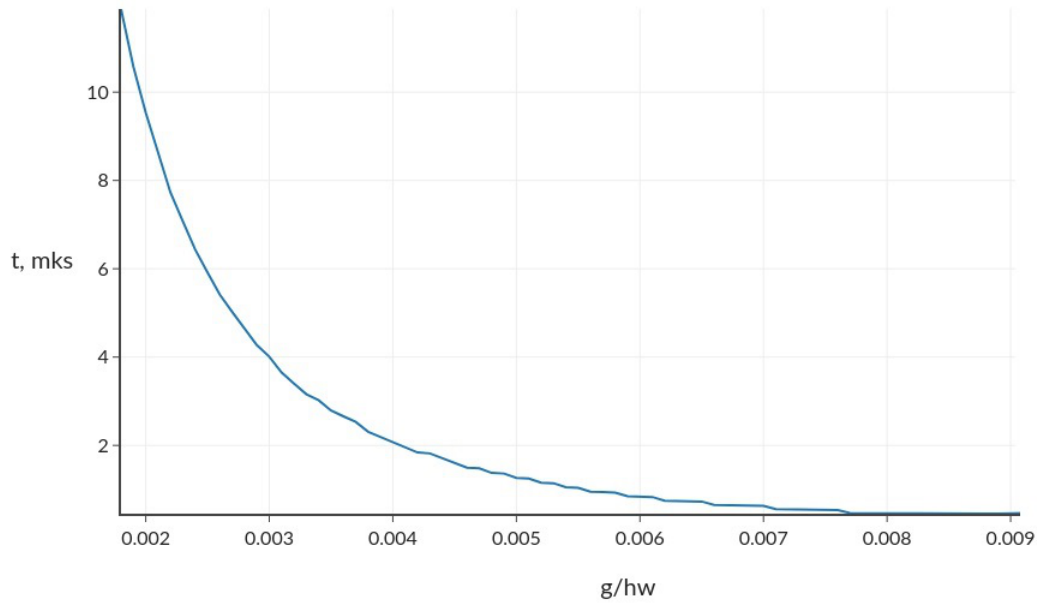


Рисунок 4.2 — Время $t = T_{\text{non}}$ полного затухания недиагональных элементов
($\text{abs} < 10^{-3}$)

$g/\hbar\omega$ в интервале $[0.001; 0.01]$ с шагом 0.001
интенсивность фотонной утечки: $\gamma/\hbar\omega = 0.01$
шаг по времени: $dt = 0.001/\gamma$

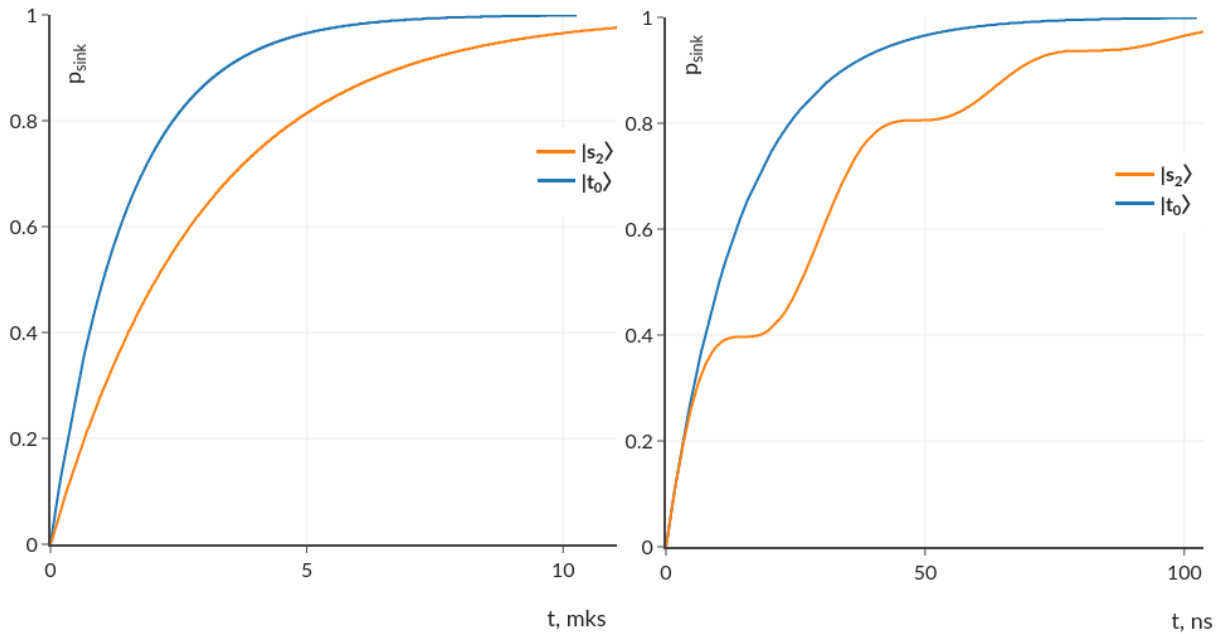


Рисунок 4.3 — Функция распределения времени жизни фотона в полости
(слева при $\gamma = 0.01g$, справа при $\gamma = g$)

Пороговая вероятность вылета, при наступлении которой происходит запуск очередного фотона: 0.95.

На рисунке 4.3 изображены графики функций распределения времени жизни фотона в полости для различных значений γ . Соответственно, плотности распределения будут производными от этих функций: для $\gamma = g$ график плотности распределения показан на рисунке 4.4.

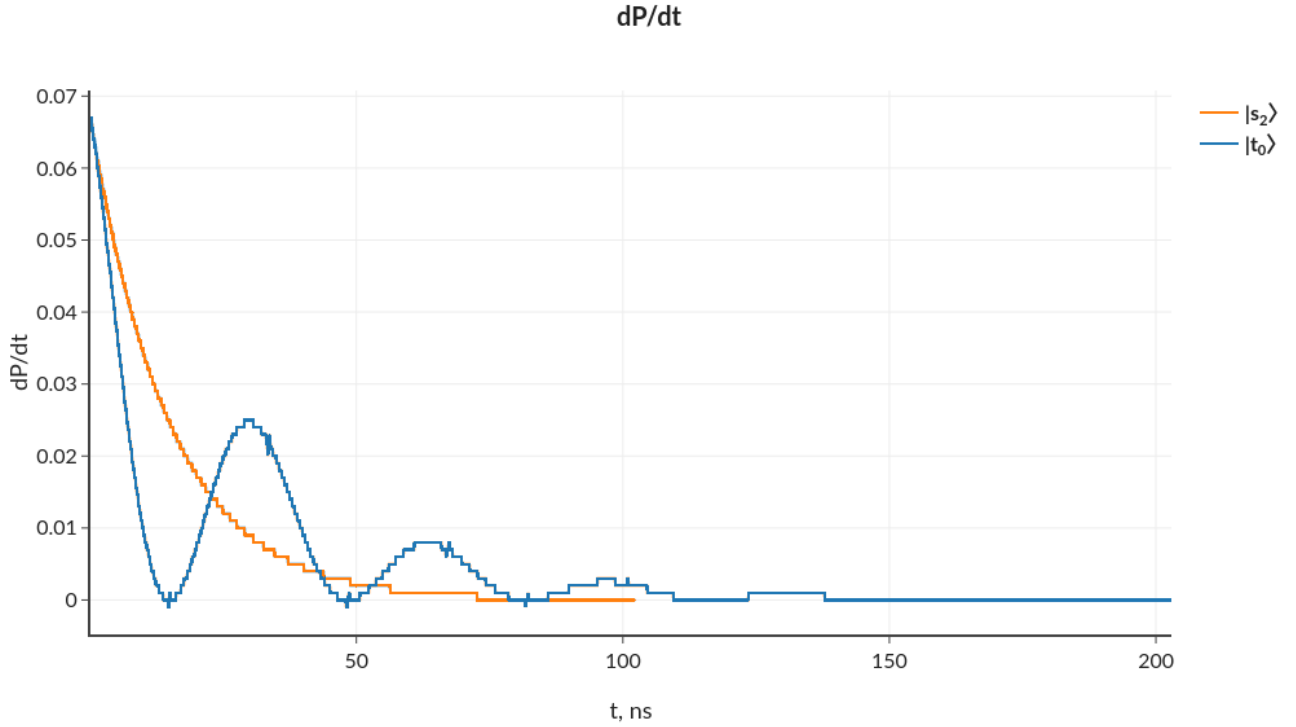


Рисунок 4.4 — Плотность распределения времени срабатывания детектора $\gamma = g$

Мы провели прямое моделирование оптического отбора с помощью датчика случайных чисел последовательностью испытаний. В каждом испытании с интервалом dt_{click} моделируется измерение окружения, то есть статистическое испытание факта вылета фотона из полости, исходя из рассчитанной по уравнению (4.8) вероятности. При этом уравнение (4.8) решается методом Эйлера с шагом по времени dt , причем временные интервалы в вычислительной модели выбирались так, чтобы для любого шага по времени выполнялись бы неравенства $dt < dt_{\text{click}} \ll \tau_{\text{click}_i} \leq dT$.

Если фотон вылетел, испытание считается завершенным и мы запускаем очередной фотон в полость, изменяя начальное условие для (4.8), и переходим к следующему испытанию. Число всех испытаний обозначается через N , максимальное время одного испытания: $dT = \max(t_i)$.

Ниже приведены результаты численного моделирования для следующих значений параметров:

- шаг по времени решения уравнения (4.8): $dt = 1 \text{ ns}$,
- интенсивность вылета фотона из полости: $\gamma = 0.01g$,
- период проверки срабатывания детектора: $dt_{\text{click}} = 50 \text{ ns}$,
- число испытаний: $N = 1000$
(каждое испытание производится до первого срабатывания детектора),
- $a_t = 1.551 \text{ mks}$, $a_s = 1.125 \text{ mks}$.

Практически можно взять $n_{\text{bor}} = 2T_{\text{gen}}/(a_s + a_t)$ как среднее число щелчков детектора за общее время наблюдения $T_{\text{gen}} = NdT$. Применим наш статистический критерий так: при числе щелчков $n_{\text{click}} > n_{\text{bor}}$ мы имеем синглетное состояние $|s\rangle$, в противном случае — триплет $|00\rangle$.

Тогда ошибка первого и второго рода оценится сверху как квантиль $\int_{n_{\text{bor}}}^{\infty} N_{0,\sigma}(x) dx$ нормального распределения с математическим ожиданием 0 и дисперсией $1/\min\{L_s, L_t\}$ и может быть сделана сколь угодно малой с увеличением T_{gen} .

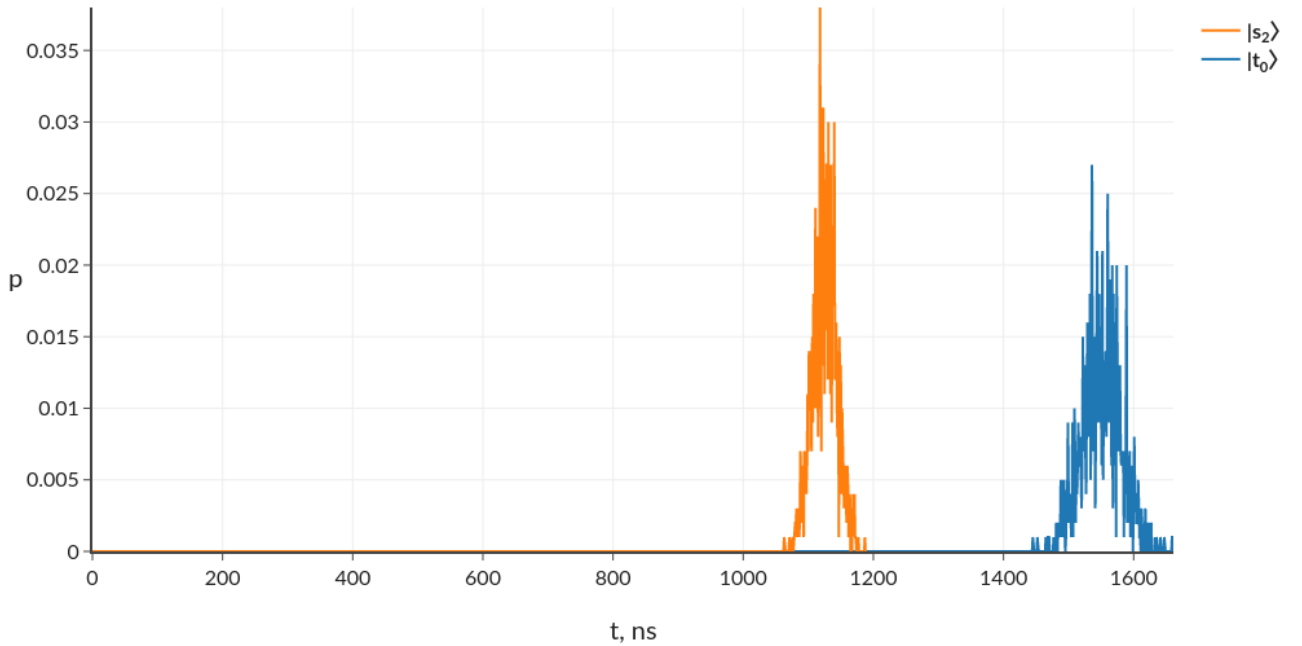


Рисунок 4.5 — Плотность распределения среднего времени жизни фотона в полости

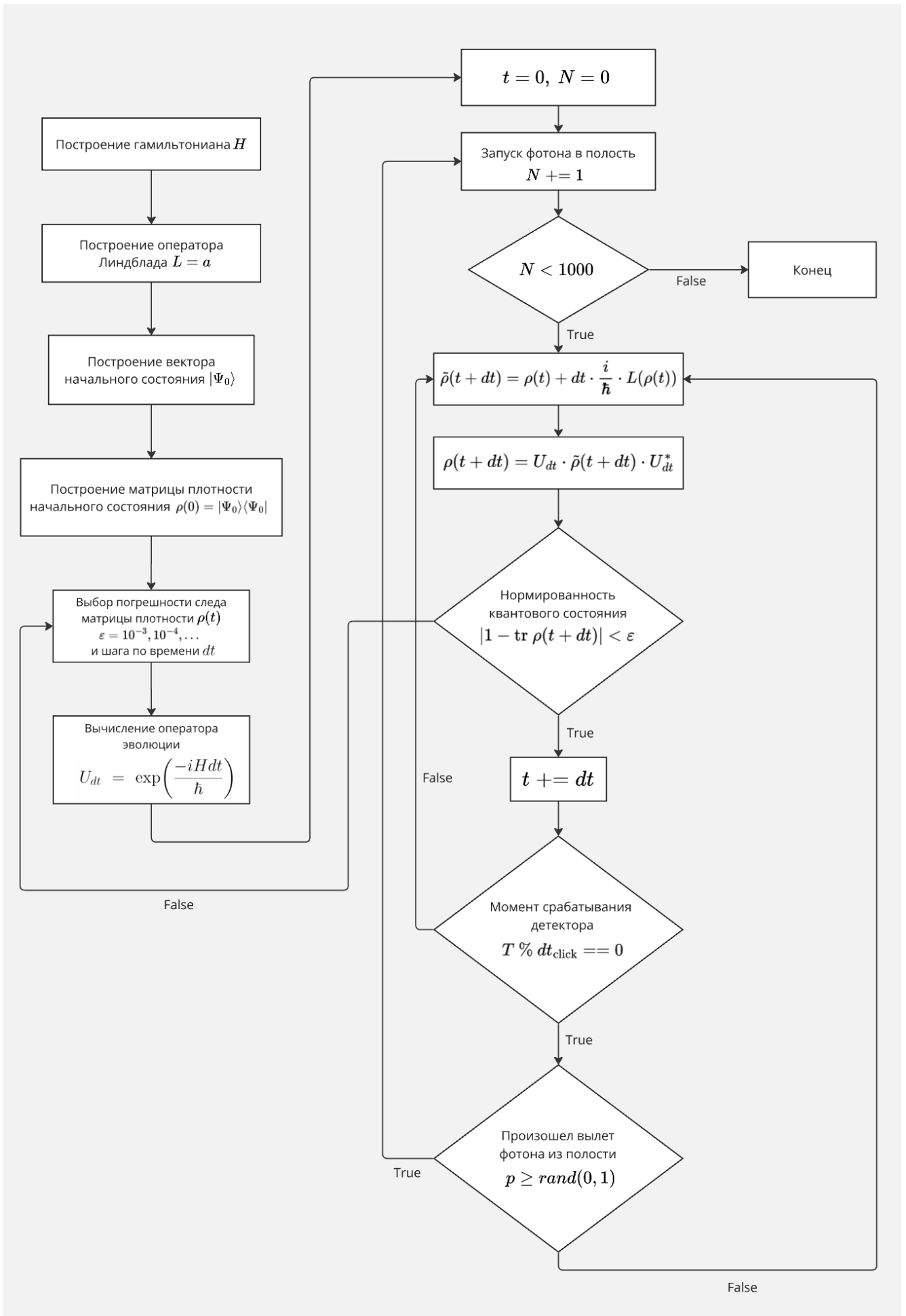


Рисунок 4.6 — Блок-схема: оптический отбор темных квантовых состояний

4.5 Оптический отбор многоуровневых темных состояний

Описанный метод оптического отбора темных состояний применим и к ансамблям многоуровневых атомов. Здесь нужно рассмотреть состояния многоуровневого синглета $|S_D\rangle$ вида (4.5) и дополнить его до ортонормированного базиса «светлыми» состояниями. При этом отбор должен производиться по всем модам (мы учитываем переходы всех типов). Для трехуровневого случая обозначим мультисинглет через $|D_3\rangle$. Мы провели численное моделирование оптического отбора темных состояний для ансамблей, состоящих из трех трехуровневых атомов, при следующих параметрах: $dt = 1$ ns, $\gamma = g$, $dt_{\text{click}} = 100$ ns, $N = 1000$.

Плотность распределения среднего значения времени детектирования фотонов считалась для значений $dt_{\text{click}} = 100$ ns.

$$\begin{aligned}
 a_{|10\rangle_{\text{ph}}|D_3\rangle} &= 16.596 \text{ mks} & a_{|10\rangle_{\text{ph}}|0_1 0_2 0_3\rangle_{\text{at}}} &= 22.243 \text{ mks} \\
 a_{|10\rangle_{\text{ph}}(|0_1 1_2\rangle - |1_1 0_2\rangle)|0_3\rangle} &= 22.423 \text{ mks} & a_{|10\rangle_{\text{ph}}|0\rangle_2(|0_1 1_3\rangle - |1_1 0_3\rangle)} &= 22.423 \text{ mks} \\
 a_{|10\rangle_{\text{ph}}|0_1\rangle(|0_2 1_3\rangle - |1_2 0_3\rangle)} &= 22.423 \text{ mks} & &
 \end{aligned}$$

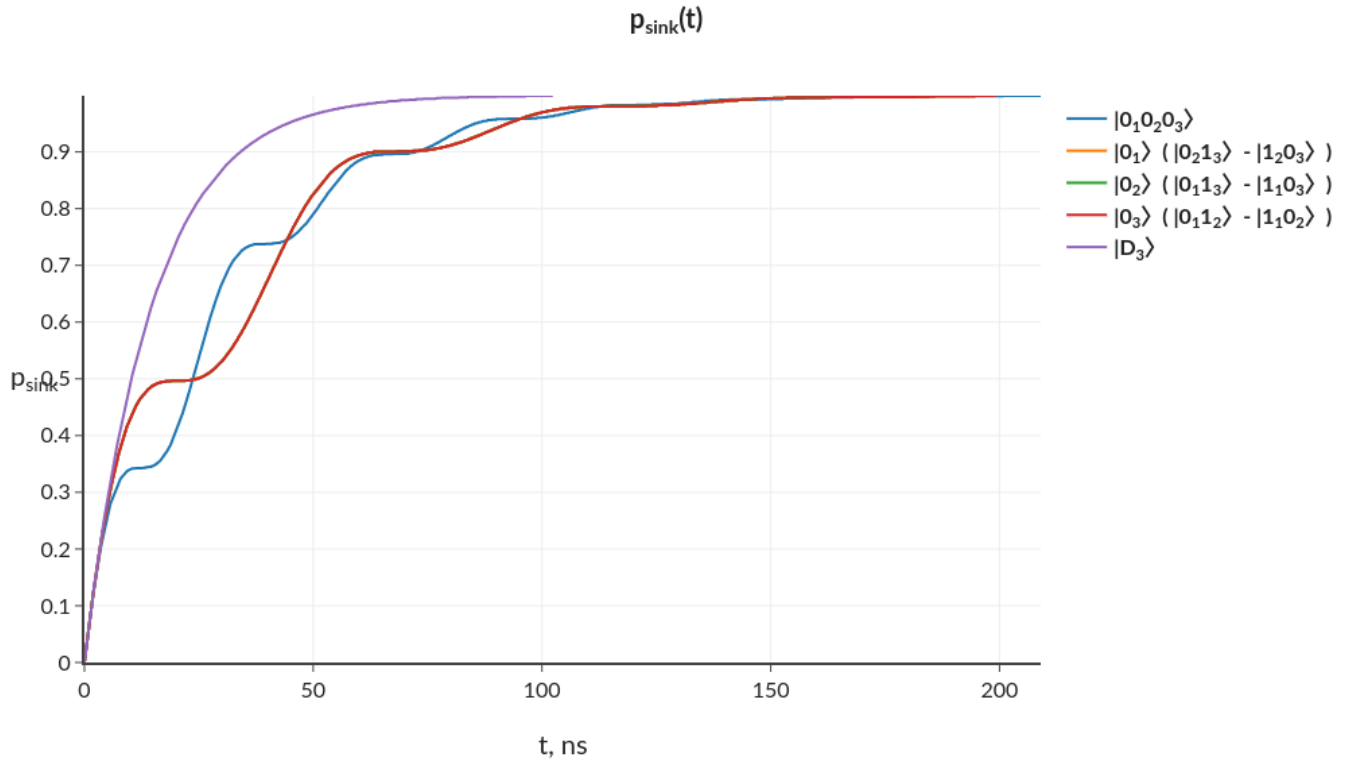


Рисунок 4.7 — Рост вероятности вылета фотона из полости в зависимости от времени для состояний с различными видами темной компоненты

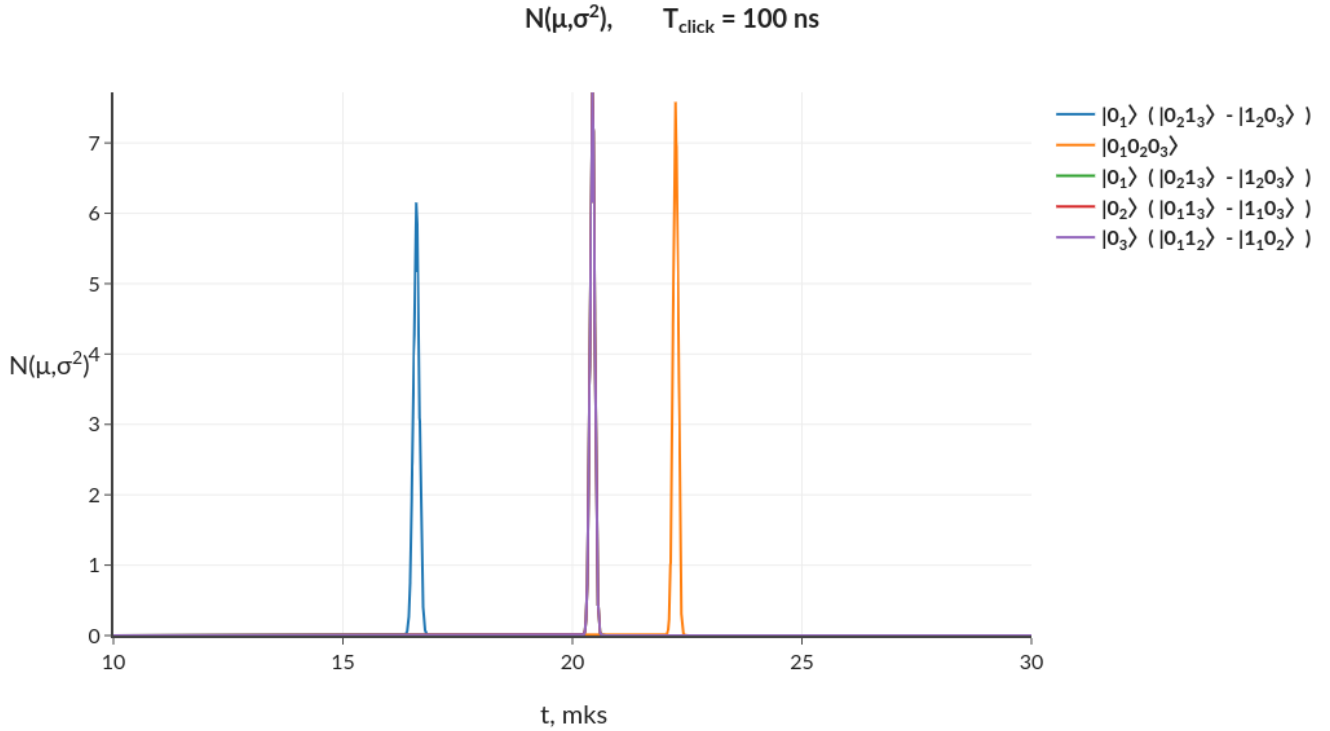


Рисунок 4.8 — Плотность распределения среднего времени жизни фотона в полости

4.6 Выводы главы

Мы предложили метод получения темных состояний, основанный на оптическом отборе. Данный метод достаточно прост в технической реализации, но, в отличие от предложенного ранее в работе [111], не требует применения штарковского сдвига уровней. Здесь используется только многократное измерение времени задержки детектирования фотонов, покидающих оптическую полость. Данный способ позволяет получить темное состояние двухуровневых атомов в виде тензорного произведения синглетов в течение не более нескольких десятков микросекунд для спектра атомов Rb85. Он также практически не зависит от выбора начального состояния атомов, помещенных в полость.

Оптический отбор в равной степени применим и к многоуровневым атомам, причем он может быть настроен на получение темного состояния строго определенного вида. Описанный метод, в силу его простоты, может быть использован для получения темных состояний ансамблей, состоящих из нескольких десятков атомов в одной полости, что весьма важно для разработки схем квантовых вычислений, устойчивых к декогерентности.

Глава 5. Определение размерности темного подпространства состояний трехуровневых атомных ансамблей

5.1 Введение

Темные состояния атомных ансамблей не взаимодействуют со светом: не излучают и не поглощают фотоны по причине возникающей деструктивной интерференции. В силу своей устойчивости к декогеренции, они могут быть широко использованы в квантовых вычислениях, в частности, для создания долговременной квантовой памяти. На сегодняшний день структура темных состояний двухуровневых атомов достаточно хорошо изучена. Для ансамблей многоуровневых атомов вопрос об их структуре по-прежнему остается открытым.

В работе [73] было установлено, что размерность темного подпространства состояний ансамблей двухуровневых атомов соответствует числам Каталана. Утверждение аналогичного характера об общем виде темных состояний трехуровневых атомов сформулировано, однако его строгое доказательство представляется весьма трудоемким и к настоящему времени не проведено.

В данной главе будет представлен алгоритм численного определения размерности темного подпространства состояний ансамблей, состоящих из ограниченного числа трехуровневых атомов.

Рассмотрим модель Тависа-Каммингса [13–17], описывающую взаимодействие идентичных атомов с фотонами в оптическом резонаторе. Ее гамильтониан в случае слабого взаимодействия $g \ll \hbar\omega$ (приближения RWA [55–57]) имеет следующий вид:

$$H_{\text{TC}}^{\text{RWA}} = \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar\omega_a \sum_{i=1}^n \sigma_i^\dagger \sigma_i + \sum_{i=1}^n g_i (a^\dagger \sigma_i + a \sigma_i^\dagger), \quad (5.1)$$

где

- \hbar – постоянная Планка,
- ω_c – частота фотонов моды резонатора,
- ω_a – частота атомного перехода,
- g_i – сила взаимодействия i -го атома с полем,
- n – число атомов в полости,

- a^+, a – операторы рождения и уничтожения фотона в полости [69]:

$$a^+|m\rangle = \sqrt{m+1}|m+1\rangle, \quad a|m\rangle = \sqrt{m}|m-1\rangle, \quad (5.2)$$

(m – количество фотонов в полости)

$$a = \begin{array}{c} |0\rangle \\ |1\rangle \\ |2\rangle \\ \dots \\ |m-1\rangle \\ |m\rangle \end{array} \begin{pmatrix} |0\rangle & |1\rangle & |2\rangle & \dots & |m-1\rangle & |m\rangle \\ 0 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \sqrt{2} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \sqrt{m} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

$$a^+ = \begin{array}{c} |0\rangle \\ |1\rangle \\ |2\rangle \\ \dots \\ |m-1\rangle \\ |m\rangle \end{array} \begin{pmatrix} |0\rangle & |1\rangle & |2\rangle & \dots & |m-1\rangle & |m\rangle \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & & & \vdots & \vdots \\ 0 & \sqrt{2} & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \sqrt{m} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

- σ_i^+, σ_i – атомные операторы возбуждения и релаксации, действующие соответственно на основное и возбужденное состояние i -го атома:

$$\begin{aligned} \sigma_i|0\rangle_i &= 0, & \sigma_i^+|0\rangle_i &= |1\rangle_i, \\ \sigma_i|1\rangle_i &= |0\rangle_i, & \sigma_i^+|1\rangle_i &= 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Для двухуровневых атомов операторы σ_i^+ и σ_i имеют следующий вид:

$$\sigma_i = \begin{array}{c} |0\rangle_i \\ |1\rangle_i \end{array} \begin{pmatrix} |0\rangle_i & |1\rangle_i \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_i^+ = \begin{array}{c} |0\rangle_i \\ |1\rangle_i \end{array} \begin{pmatrix} |0\rangle_i & |1\rangle_i \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Для простоты будем считать, что частота фотонов w_c отличается от частоты атомного перехода w_a на величину небольшой расстройки $|w_c - w_a| \ll w_c + w_a$ и, кроме того, сила взаимодействия с полем одинакова для всех атомов:

$$g_i = g \quad \forall i = \overline{1, n}.$$

Обозначим также через $\bar{\sigma}$ и $\bar{\sigma}^+$ операторы, действующие на атомный ансамбль:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} &= \sum_{i=1}^n \sigma_i = \sigma_1 \otimes I_2 \otimes \cdots \otimes I_n + \cdots + I_1 \otimes \cdots \otimes I_{n-1} \otimes \sigma_n, \\ \bar{\sigma}^+ &= \sum_{i=1}^n \sigma_i^+ = \sigma_1^+ \otimes I_2 \otimes \cdots \otimes I_n + \cdots + I_1 \otimes \cdots \otimes I_{n-1} \otimes \sigma_n^+. \end{aligned} \quad (5.7)$$

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. Действие коллективных операторов $\bar{\sigma}$ и $\bar{\sigma}^+$ позволит нам определить возможность испускания или поглощения одиночного фотона хотя бы одним атомом ансамбля.

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

$$\begin{cases} \bar{\sigma}^+ |\Psi\rangle_{\text{at}} = \mathbf{0} & \text{(атомы не могут поглотить фотон),} \\ \bar{\sigma} |\Psi\rangle_{\text{at}} = \mathbf{0} & \text{(атомы не могут испустить фотон).} \end{cases} \quad (5.8)$$

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

Условие (5.8) является **критерием темноты атомного ансамбля**, что непосредственно следует из определения темного квантового состояния.

В работе [73] Ю. Ожиговым было сформулировано и доказано утверждение о том, что размерность темного подпространства состояний n двухуровневых атомов равна

$$\dim(D_n^2) = \begin{cases} C_n^k - C_n^{k-1} & \text{при } n = 2k, \\ 0 & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (5.9)$$

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

$$\frac{1}{2^{n/4}} \bigotimes_{j=1}^{n/2} (|01\rangle_j - |10\rangle_j), \quad (5.10)$$

где индекс $j = 1, \dots, n/2$ означает номер пары в произвольном разбиении группы из n атомов.

Приведем несколько примеров:

$n = 2$:

$$\nabla \text{ темные состояния: } \frac{|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2}{\sqrt{2}}$$

$$\nabla \text{ размерность темного подпространства: } C_2^1 - C_2^0 = 1$$

$n = 3$:

∇ нет темных состояний

$n = 4$:

∇ темные состояния:

$$\frac{(|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2) \otimes (|0\rangle_3|1\rangle_4 - |1\rangle_3|0\rangle_4)}{2}$$

$$\frac{(|0\rangle_1|1\rangle_3 - |1\rangle_1|0\rangle_3) \otimes (|0\rangle_2|1\rangle_4 - |1\rangle_2|0\rangle_4)}{2}$$

$$\frac{(|0\rangle_1|1\rangle_4 - |1\rangle_1|0\rangle_4) \otimes (|0\rangle_2|1\rangle_3 - |1\rangle_2|0\rangle_3)}{2}$$

$$\nabla \text{ размерность темного подпространства: } C_4^2 - C_4^1 = 2.$$

5.2 Постановка задачи

Результат (5.10) установлен и доказан только для случая двухуровневых атомных ансамблей. Аналогичное утверждение для ансамблей трехуровневых атомов в качестве гипотезы формулируется следующим образом:

Гипотеза 2. Темное подпространство состояний n трехуровневых атомов есть линейная оболочка состояний $\bigotimes_{j=1}^{n/3} D_3^{(j)}$, где $D_3^{(j)}$ — трехатомное со-

стояние, имеющее вид

$$\sum_{\pi \in \mathcal{S}_3} |\pi(1)\rangle |\pi(2)\rangle |\pi(3)\rangle (-1)^{\sigma(\pi)} \quad (5.11)$$

(разбиение n атомов на тройки произвольно).

Примером темного состояния ансамбля трехуровневых атомов является состояние

$$|\Psi\rangle = |012\rangle + |120\rangle + |201\rangle - |021\rangle - |102\rangle - |210\rangle, \quad (5.12)$$

оно же единственное.

Возвращаясь к **критерию темноты** (5.8) многоатомного квантового состояния, отметим, что множество решений системы

$$\begin{cases} \bar{\sigma}^+ |\Psi\rangle_{\text{at}} = 0, \\ \bar{\sigma} |\Psi\rangle_{\text{at}} = 0, \end{cases} \Leftrightarrow Ax = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}^+ \\ \bar{\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \dots \\ \lambda_N \end{pmatrix} = 0 \quad (5.13)$$

однородных уравнений с соответствующей матрицей системы $A = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}^+ \\ \bar{\sigma} \end{pmatrix}$ размерности $M \times N$ есть линейное подпространство размерности $N - \text{rank}(A)$.

Для случая трехуровневых атомов размерность матрицы системы равна

$$(M, N) = (6 \cdot 3^n, 3^n), \quad (5.14)$$

а размерность темного подпространства определяется как

$$\dim(D_n^{(3)}) = 3^n - \text{rank}(A). \quad (5.15)$$

Таким образом, задача определения размерности темного подпространства сводится к задаче определения ранга матрицы A системы (5.13) для различных значений n .

Рассмотрим несколько примеров

Определим размерности темного подпространства для ряда двухуровневых атомных ансамблей. По аналогии с (5.15) размерность будет равна

$$\dim(D_n^{(2)}) = 2^n - \text{rank}(A). \quad (5.16)$$

n = 2 :

$$A = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}^+ \\ \bar{\sigma} \end{pmatrix} = \begin{array}{c} \begin{matrix} |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \begin{matrix} |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix} \end{array} \quad (5.17)$$

Решая систему (5.13), находим $x = \begin{pmatrix} 0 \\ \xi \\ -\xi \\ 0 \end{pmatrix}$, $D_2^{(2)} = \mathbb{L}(\{|01\rangle - |10\rangle\})$.

$$\dim(D_2^{(2)}) = 2^n - \text{rank}(A) = 2^2 - 3 = 1$$

n = 3 :

$$A = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}^+ \\ \bar{\sigma} \end{pmatrix} = \begin{array}{c} \begin{matrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \begin{matrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix} \end{array} \quad (5.18)$$

$$\dim(D_3^{(2)}) = 2^n - \text{rank}(A) = 2^3 - 8 = 0$$

Перейдем к перечислению трудностей, возникающих при решении поставленной задачи, а именно задачи вычисления ранга сверхбольшой матрицы.

Исходя из вышеуказанных примеров, можно отметить следующее:

- матрица системы состоит из нулей и единиц,
- матрица является сильно разреженной с множеством нулевых строк,
- подавляющее большинство строк матрицы содержат значительно больше единиц, чем нулей, и не совпадают со строками единичной матрицы,
- размерность матрицы системы для трехуровневых атомных ансамблей равна $(M, N) = (6 \cdot 3^n, 3^n)$, поскольку имеют место 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	...	$2.3 \cdot 10^9 \times 387 \cdot 10^6$	$62 \cdot 10^9 \times 10.4 \cdot 10^9$

Перечислим также возникающие вычислительные трудности:

- объем, занимаемый плотными вещественными матрицами размера $(M, N) = (6 \cdot 3^n, 3^n)$, начиная уже с малых значений n , превышает возможности оперативной памяти,
- алгоритм должен **точно вычислять ранг**: ошибки округления при работе с вещественными числами могут существенно повлиять на корректность вычислений и привести к неверному вычислению ранга.

В частности, было обнаружено, что многие существующие на сегодняшний день алгоритмы и пакеты программ для вычисления ранга разреженных матриц дают неверный результат (к примеру, метод `linalg.interpolative.estimate_rank` библиотеки **scipy** [113–115] уже при $n = 9$).

Данный факт означает **необходимость вычисления ранга 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.

5.3 Описание алгоритма

Перейдем непосредственно к описанию предложенного алгоритма. Он будет состоять из трех частей:

1. построение разреженной матрицы системы A ;
2. целочисленное приведение разреженной матрицы к ступенчатой форме путем редуцирования соответствующего ей графа;
3. окончательное целочисленное приведение матрицы к ступенчатой форме с помощью алгоритма Гаусса.

5.3.1 Построение разреженной матрицы системы

Генерация разреженных матриц для различных $n = 3 \dots 21$ выполняется стандартным образом с использованием научного пакета Python SciPy [113—115] для разреженных матриц.

Каждая строка содержит номера столбцов ненулевых элементов (нумерация столбцов начинается с нуля). Полностью нулевые строки плотной матрицы пропускаются.

К примеру, для системы (5.17) разреженная матрица записывается в следующем виде:

```

1,2
3,
3,
0,
0,
1,2

```

Для трехуровневой системы построение выполняется аналогично.

Выпишем характерные метрики после первого этапа алгоритма:

n	3	6	9	12	15	18	21
M	162	4374	$118 \cdot 10^3$	$3.2 \cdot 10^6$	$86.1 \cdot 10^6$	$2.3 \cdot 10^9$	$62.7 \cdot 10^9$
N	27	729	$19.6 \cdot 10^3$	$531.4 \cdot 10^3$	$14.3 \cdot 10^6$	$387.4 \cdot 10^6$	$10.4 \cdot 10^9$
nrows	114	3990	$\approx M$	$\approx M$
nonzeros	162	8748	$354.3 \cdot 10^3$	$12.7 \cdot 10^6$	$430.4 \cdot 10^6$	$13.9 \cdot 10^9$	$439.3 \cdot 10^9$

- n — кол-во атомов,
- M — кол-во строк в плотной¹ матрице,
- N — кол-во столбцов в плотной матрице,
- **nrows** — кол-во строк в разреженной матрице,
- **nonzeros** — кол-во ненулевых элементов (единиц) в разреженной матрице.

Как мы видим, для $n = 21$ разреженная матрица системы содержит несколько десятков миллиардов строк.

5.3.2 Элементарные преобразования над матрицей системы путем редукции соответствующего ей графа

Для разреженной матрицы системы построим граф по следующей схеме:

- значение вершины — номер строки в разреженной матрице,
- метка ребра, входящего в вершину, содержит позиции единиц в соответствующей строке разреженной матрицы (что также соответствует номерам столбцов единичных элементов в плотной матрице),

нумерация столбцов в плотной матрице производится с нуля

- вершины, в которые входят ребра с общими метками, соединяются ребром с этими метками.

Для системы (5.17) и соответствующей ее разреженной матрицы граф выглядит следующим образом:

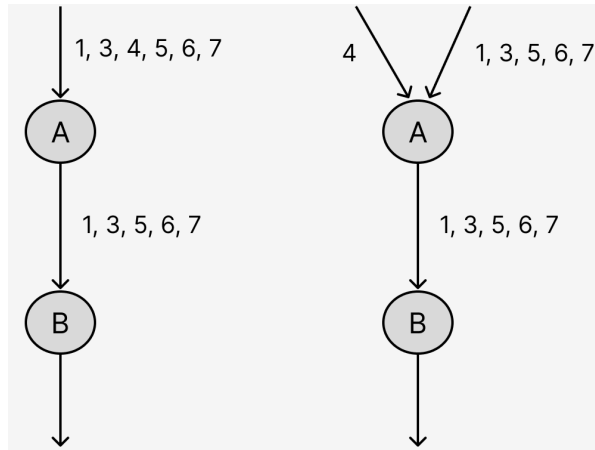
¹плотные матрицы не создаются

Другим словами, это вычитания из «старшей» строки A «младшей» строки B , при которых строка A содержит все единицы строки B на тех же позициях, но, кроме того, может также содержать единицы на позициях, которые отсутствуют в строке B . Соответствующие вершины A' и B' графа будут соединены ребром (с ненулевым множеством меток), а множество меток ребра, входящего в вершину B' , будет подмножеством меток ребра, входящего в вершину A' .

Для матрицы

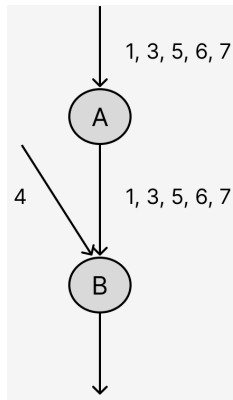
$$\begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

возможны следующие фрагменты соответствующего ей графа (двух типов):



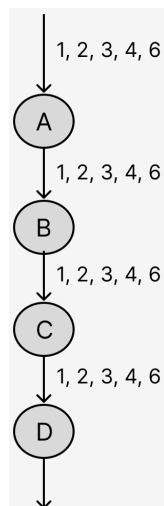
Аналогично для матрицы

$$\begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

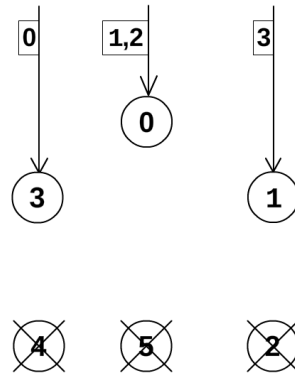


и для случая строк-дубликатов

$$\begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & \boxed{1} & 0 & \boxed{1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$



Удаление ребер в **примере 1** происходит следующим образом:



Плотная матрица, соответствующая редуцированному графу, после элементарных преобразований будет иметь вид:

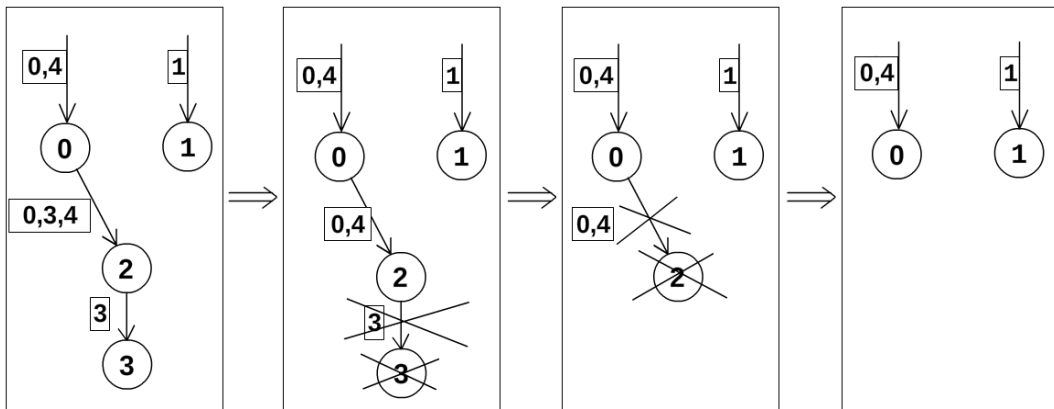
$$\begin{array}{cccc} |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \\ \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \end{array}$$

Рассмотрим более сложный пример:

Пример 2.

$$A = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Соответствующие преобразования графа:



Последний пример демонстрирует возможность удаления дубликатов и вычитания строк, находящихся на расстоянии. «Проход» по цепочке связанных вершин может осуществляться как сверху вниз, так и снизу вверх. Для этого достаточно определять пересечения меток ребер, входящих и выходящих в связанные вершины. В результате мы избегаем сравнения строк между собой, поиска совпадающих пар и использования операции деления с неизбежным возникновением вещественных чисел в ходе элементарных преобразований.

Предложенный подход позволяет на несколько порядков сократить экспоненциально растущую с ростом n размерность плотной матрицы системы. К примеру, для 21 атома десятки миллиардов строк в исходной матрице системы будут «коллапсированы» до не более чем десяти тысяч строк, что позволит в дальнейшем произвести точное вычисление ее ранга.

Представленный алгоритм является параллельным и производит редукцию графа, распределенного по сетке процессоров: разреженные матрицы считываются параллельно «ленточным» образом (каждый процесс считывает свою часть матрицы и формирует свою часть общего графа). Если связанные вершины принадлежат разным процессам, информация об этом (номера вершин и множества меток, соответствующих входящим и выходящим ребрам) пересылается в неблокирующем режиме (MPI_Isend, MPI_Irecv). При необходимости удаления вершин и/или ребер соответствующая информация также пересылается между процессами.

Работа алгоритма начинается с удаления дубликатов строк каждым процессом, а именно с сокращения длин тех цепочек, в которых множество меток соединяющих их ребер будет общим для всех вершин. В результате данной процедуры каждая строка матрицы будет содержаться в одном экземпляре, а вершины, отвечающие дубликатам строк, будут удалены. После чего производится процесс вычитания таких строк из других в порядке обхода кратности вершин, соответствующих этим строкам. Кратность вершины в данном случае есть число входящих в нее ребер с отличными друг от друга множествами меток. Данная процедура приводит к появлению строк-дубликатов: в этом случае вновь запускается процесс их удаления с возможной рассылкой информации об этом другим процессорам.

Вся процедура повторяется до тех пор, пока в матрице не остается ни одной пары строк, которые можно было бы вычесть друг из друга:

- каждый отдельный процессор не может удалить ребро или вершину,

- невозможно удалить ребро, соединяющее вершины, находящиеся на разных процессорах.

Выполнение работы данного алгоритма производилось на суперкомпьютере Ломоносов-2 с использованием 256 процессорных узлов, содержащих 2048 процессорных ядер. Максимально доступное число атомов в рамках имеющихся в распоряжении вычислительных ресурсов для поставленной задачи составило 21.

5.3.3 Окончательное целочисленное приведение матрицы к ступенчатой форме с помощью алгоритма Гаусса

Результат второго этапа — получение матрицы значительно меньшего размера, не содержащей дубликатов строк, прошедшую процесс элементарных преобразований над строками. Ее достаточно просто восстановить по редуцированному графу. Количество строк в такой матрице на несколько порядков отличается от числа строк в исходной плотной матрице системы. Окончательное приведение матрицы к ступенчатому виду производится с применением алгоритма Гаусса в целых числах, допускающего следующие операции:

- сложение и вычитание строк,
- перестановка строк,
- целочисленное умножение и деление строки на число.

В результате умножений строк на число и вычитаний в матрице появляются отрицательные числа, а также числа, по модулю существенно большие единицы. В процессе вычислений было обнаружено, что рост абсолютных значений не является неограниченным и не приводит к переполнению типа (в данном случае использовался 4-байтный тип `int`). Это эмпирический факт, который позволил произвести процесс точного вычисления ранга матрицы до конца. В случае возникшего переполнения типа для элементов матрицы были бы задействованы большеразмерные типы (`long`, `long long`), либо был бы пересмотрен подход к процедуре окончательного приведения матрицы к ступенчатому виду в пользу других альтернатив.

Отсутствие переполнения может объясняться рядом особенностей матрицы, полученной на этапе 2:

- значительная часть строк матрицы соответствует строками единичной матрицы и в ходе процедуры приведения матрицы к ступенчатому виду требует лишь перестановки,
- размерность матрицы на несколько порядков меньше размерности исходной матрицы,
- матрица является значительно более разреженной, чем исходная матрица: строки, изначально состоящие практически целиком из единиц стали в еще большей степени разреженными, поскольку из них вычитались строки с меньшим количеством единиц, в том числе, и строки единичной матрицы.

По окончании данного этапа плотная матрица системы, сокращенная в своей размерности на этапе 2, приводится к единичному виду и ее ранг соответствует количеству ее строк.

По итогам работы алгоритма размерность темного подпространства состояний ансамблей трехуровневых атомов была численно установлена для следующих значений $n = 3k$:

n	3	6	9	12	15	18	21
$\dim(D_n^{(3)})$	1	5	28	165	1001	6188	38 760

Для значений $n = \overline{1,9}$ при n кратном 3 мультисинглеты вида (5.15) были выписаны в явном виде. Размерность линейной оболочки, натянутой на эти состояния, совпала с размерностью темного подпространства, полученной в результате работы представленного выше алгоритма, подтвердив тем самым гипотезу о структуре темного подпространства. А именно подтверждено, что для ансамблей, состоящих из $n = \overline{1,9}$ ($n = 3k$) атомов, всё множество темных состояний исчерпывается мультисинглетами вида (5.15) и других темных состояний в ансамблях с указанной численностью атомов нет.

$n = 3$:

```

n_atoms = 3
Разбиения атомов на тройки:
[[1, 2, 3]]
Все мультисинглеты:
(|011223) - |012213) - |110223) + |112203) + |210213) - |211203)
Общее число мультисинглетов: 1
Ранг матрицы в вычислительном базисе, составленной из мультисинглетов: 1

```

$n = 6$:

```

n_atoms = 6
Разбиения атомов на тройки:
[[1, 2, 3], [4, 5, 6]]
[[1, 2, 4], [3, 5, 6]]
[[1, 2, 5], [3, 4, 6]]
[[1, 2, 6], [3, 4, 5]]
[[1, 3, 4], [2, 5, 6]]
[[1, 3, 5], [2, 4, 6]]
[[1, 3, 6], [2, 4, 5]]
[[1, 4, 5], [2, 3, 6]]
[[1, 4, 6], [2, 3, 5]]
[[1, 5, 6], [2, 3, 4]]
Все мультисинглеты:
(|011223) - |012213) - |110223) + |112203) + |210213) - |211203) ⊗ (|041526) - |042516) - |140526) + |142506) + |240516) - |241506)
(|011224) - |012214) - |110224) + |112204) + |210214) - |211204) ⊗ (|031526) - |032516) - |130526) + |132506) + |230516) - |231506)
(|011225) - |012215) - |110225) + |112205) + |210215) - |211205) ⊗ (|031426) - |032416) - |130426) + |132406) + |230416) - |231406)
(|011226) - |012216) - |110226) + |112206) + |210216) - |211206) ⊗ (|031425) - |032415) - |130425) + |132405) + |230415) - |231405)
(|011324) - |012314) - |110324) + |112304) + |210314) - |211304) ⊗ (|021526) - |022516) - |120526) + |122506) + |220516) - |221506)
(|011325) - |012315) - |110325) + |112305) + |210315) - |211305) ⊗ (|021426) - |022416) - |120426) + |122406) + |220416) - |221406)
(|011326) - |012316) - |110326) + |112306) + |210316) - |211306) ⊗ (|021425) - |022415) - |120425) + |122405) + |220415) - |221405)
(|011425) - |012415) - |110425) + |112405) + |210415) - |211405) ⊗ (|021326) - |022316) - |120326) + |122306) + |220316) - |221306)
(|011426) - |012416) - |110426) + |112406) + |210416) - |211406) ⊗ (|021325) - |022315) - |120325) + |122305) + |220315) - |221305)
(|011526) - |012516) - |110526) + |112506) + |210516) - |211506) ⊗ (|021324) - |022314) - |120324) + |122304) + |220314) - |221304)
Общее число мультисинглетов: 10
Ранг матрицы в вычислительном базисе, составленной из мультисинглетов: 5

```

$n = 9$:

```
n_atoms = 9
Разбиения атомов на тройки:
[[1, 2, 3], [4, 5, 6], [7, 8, 9]]
[[1, 2, 3], [4, 5, 7], [6, 8, 9]]
[[1, 2, 3], [4, 5, 8], [6, 7, 9]]
[[1, 2, 3], [4, 5, 9], [6, 7, 8]]
[[1, 2, 3], [4, 6, 7], [5, 8, 9]]
[[1, 2, 3], [4, 6, 8], [5, 7, 9]]
[[1, 2, 3], [4, 6, 9], [5, 7, 8]]
[[1, 2, 3], [4, 7, 8], [5, 6, 9]]
[[1, 2, 3], [4, 7, 9], [5, 6, 8]]
[[1, 2, 3], [4, 8, 9], [5, 6, 7]]
...
[[1, 8, 9], [2, 3, 4], [5, 6, 7]]
[[1, 8, 9], [2, 3, 5], [4, 6, 7]]
[[1, 8, 9], [2, 3, 6], [4, 5, 7]]
[[1, 8, 9], [2, 3, 7], [4, 5, 6]]
[[1, 8, 9], [2, 4, 5], [3, 6, 7]]
[[1, 8, 9], [2, 4, 6], [3, 5, 7]]
[[1, 8, 9], [2, 4, 7], [3, 5, 6]]
[[1, 8, 9], [2, 5, 6], [3, 4, 7]]
[[1, 8, 9], [2, 5, 7], [3, 4, 6]]
[[1, 8, 9], [2, 6, 7], [3, 4, 5]]
```

```
Все мультисинглеты:
(|011223) - |012213) - |110223) + |112203) + |210213) - |211203) ⊗ (|041526) - |042516) - |140526) + |142506) +
|240516) - |241506) ⊗ (|071829) - |072819) - |170829) + |172809) + |270819) - |271809)

(|011223) - |012213) - |110223) + |112203) + |210213) - |211203) ⊗ (|041527) - |042517) - |140527) + |142507) +
|240517) - |241507) ⊗ (|061829) - |062819) - |160829) + |162809) + |260819) - |261809)

(|011223) - |012213) - |110223) + |112203) + |210213) - |211203) ⊗ (|041528) - |042518) - |140528) + |142508) +
|240518) - |241508) ⊗ (|061729) - |062719) - |160729) + |162709) + |260719) - |261709)

...
(|011829) - |012819) - |110829) + |112809) + |210819) - |211809) ⊗ (|021526) - |022516) - |120526) + |122506) +
|220516) - |221506) ⊗ (|031427) - |032417) - |130427) + |132407) + |230417) - |231407)

(|011829) - |012819) - |110829) + |112809) + |210819) - |211809) ⊗ (|021527) - |022517) - |120527) + |122507) +
|220517) - |221507) ⊗ (|031426) - |032416) - |130426) + |132406) + |230416) - |231406)

(|011829) - |012819) - |110829) + |112809) + |210819) - |211809) ⊗ (|021627) - |022617) - |120627) + |122607) +
|220617) - |221607) ⊗ (|031425) - |032415) - |130425) + |132405) + |230415) - |231405)

Общее число мультисинглетов: 280
Ранг матрицы в вычислительном базисе, составленной из мультисинглетов: 28
```


5.4 Выводы главы

Был предложен алгоритм определения размерности темного подпространства состояний многоуровневых атомных ансамблей, основанный на целочисленном вычислении ранга сверхбольшой двоичной матрицы путем параллельной редукции соответствующего ей графа.

Данный алгоритм позволил установить размерность темного подпространства для 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.

Глава 6. Оценка качества запутывающего гейта coCSign на асинхронных атомных возбуждениях

Конечномерные модели Джейнса-Каммингса-Хаббарда (JCH) [49–51] и Тависа-Каммингса-Хаббарда (TCH) [52–54] квантовой электродинамики представляют собой наиболее удобное средство компьютерного моделирования квантовой динамики атомных ансамблей, взаимодействующих со светом. Важность такой задачи обусловлена необходимостью отыскания оптимальной технологии реализации гейтов для квантовых вычислений.

Квантовые гейты представляют собой базовые элементы квантового компьютера, обеспечивающие возможность выполнения различных операций над кубитами. Их математическое описание и физическая реализация имеют решающее значение в вопросах эффективной работы квантовых систем. Современные исследования в области квантовых технологий посвящены разработке новых методов реализации квантовых гейтов, их оптимизации и усовершенствованию качества управления кубитами.

Основой квантовых вычислений [1], [30], [32] является **запутывающий гейт**. Как показано в работе [29], такого гейта вместе с однокубитными гейтами достаточно для реализации любых квантовых вычислений: **универсальным** считается набор квантовых гейтов, достаточный для осуществления любого квантового преобразования на произвольном наборе кубитов. Его можно получить, взяв, к примеру, все однокубитные гейты и любой запутывающий гейт (скажем, гейт CNOT — управляемый NOT). Основная трудность в физической реализации квантовых гейтов заключается в обеспечении точного управления состояниями кубитов и минимизации ошибок, связанных с этим. Немаловажную роль в возникновении последних вносит **декогерентность** [21; 22].

В данной главе мы представим результаты компьютерного моделирования запутывающего гейта coCSign , а также произведем оценку его эффективности. Будут указаны технические ограничения его физической реализации на основе системы оптических полостей. Мы также определим главный фактор, влияющий на снижение качества его работы: он проистекает непосредственно из теоретических границ применимости самой модели Джейнса-Каммингса-Хаббарда.

6.1 Запутывающие гейты на оптических полостях

Основным запутывающим гейтом в квантовых вычислениях является гейт CNOT, действующий на базисное состояние кубитов $|x, y\rangle$ по следующему правилу:

$$\text{CNOT}: |x, y\rangle \rightarrow |x, x \oplus y\rangle.$$

В работе [116] представлена его реализация на основе колебательных степеней свободы атома. Гейт CNOT эквивалентен другому запутывающему гейту CSign, действующему по правилу

$$\text{CSign}: |x, y\rangle \rightarrow (-1)^{xy}|x, y\rangle,$$

поскольку один из них получается из другого при помощи гейта Адамара:

$$\text{CNOT} = w_y \cdot \text{CSign} \cdot w_y.$$

Здесь гейт Адамара

$$w_y = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{\sqrt{2}}$$

применяется к кубиту $|y\rangle$ базисного состояния $|x, y\rangle$.

Гейт CSign инвертирует фазу состояния $|11\rangle$. Если ввести оператор coCSign, действующий по следующему правилу

$$\text{coCSign} : |x, y\rangle \rightarrow (-1)^{(x \oplus 1)y}|x, y\rangle,$$

он также будет сводиться к гейту CSign при помощи однокубитных гейтов (в данном случае, гейтов σ_x , или NOT):

$$\text{CSign} = \sigma_x(x) \cdot \text{coCSign} \cdot \sigma_x(x).$$

Данная схема частично использует идею работы Х. Азумы [25], однако ее реализация требует лишь одну дополнительную полость вместо двух.

Мы займемся компьютерным моделированием гейта coCSign и оценкой его эффективности. Поскольку $\text{CSign} = \sigma_x(x) \cdot \text{coCSign} \cdot \sigma_x(x)$, а однокубитные гейты реализуются линейными оптическими устройствами (чей вклад в погрешность пренебрежимо мал), эта оценка будет справедливой и для гейта CNOT.

6.2 Общая схема гейта соCSign

Кратко опишем общую схему гейта соCSign на асинхронных атомных возбуждениях. Данная схема была предложена Ю. Ожиговым и детально описана в работе [76].

Рассмотрим оптический резонатор и один двухуровневый атом внутри него. Интенсивность взаимодействия g между атомом и полем будем считать малой ($g/\hbar\omega \ll 1$) — квантовая динамика в приближении вращающейся волны [55–57], при котором гамильтониан Джейнса-Каммингса системы «атом+поле» имеет вид:

$$\begin{aligned} H &= H_{JC} = H_0 + H_{int}, \\ H_0 &= \hbar\omega(a^+a + \sigma^+\sigma), \\ H_{int} &= g(a^+\sigma + a\sigma^+), \end{aligned} \quad (6.1)$$

где a^+ , a — операторы рождения и уничтожения фотона, σ^+ , σ — операторы возбуждения и релаксации атома соответственно. Запишем базисные состояния поля и атома в виде $|m\rangle_{ph}|n\rangle_{at}$, где $m = 0, 1, 2$ — число фотонов в полости, $n = 0, 1$ — количество атомных возбуждений. В ходе реализации гейта мы будем менять гамильтониан, добавляя к нему слагаемое вида $H_{jump} = \nu(a_i a_j^+ + a_j a_i^+)$, отвечающее за переход возбуждения из полости i в полость j и наоборот. Значения ν_x и ν_y соответствуют интенсивностям перехода возбуждения из полостей x и y во вспомогательную полость.

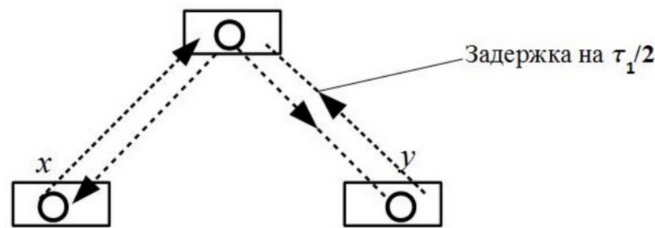


Рисунок 6.1 — Три полости: x , y и вспомогательная при реализации гейта соCSign

Перенос фотона из полости j в полость i и наоборот осуществляется одновременным включением ячеек Поккельса, что означает добавление H_{jump} к взаимодействию H_{int} . При отсутствии атомов это даст ту же динамику, что и рабиевские осцилляции, но с периодом $\tau_{jump} = \pi\hbar/\nu$. Мы будем считать, что

$v \gg g$, означающее, что перемещение фотона между полостями происходит настолько быстро, что атом не влияет на данный процесс.

В силу несоизмеримости периодов рабиевских осцилляций τ_1 и τ_2 можно выбрать такие натуральные числа n_1 и n_2 , что с высокой точностью будет выполняться приближенное равенство

$$2n_2\tau_2 \approx 2n_1\tau_1 + \frac{\tau_1}{2}, \quad (6.2)$$

которое позволит произвести нелинейный фазовый сдвиг, необходимый для реализации гейта coCSign .

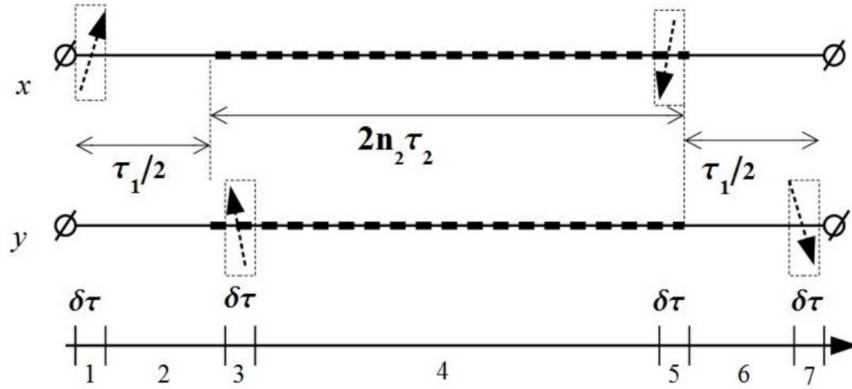


Рисунок 6.2 — Последовательность операций при реализации гейта coCSign на асинхронных атомных возбуждениях в оптических полостях, разбитая на 7 участков по времени, время перехода фотона $\delta\tau = \tau_{\text{jump}}/2 \approx \tau_{1(2)}$. После изображенной схемы необходимо подождать время $\tau_1/2$.

Состояние кубита $|0\rangle$ реализуется в данной модели как состояние оптической полости вида $|0\rangle_{ph}|1\rangle_{at}$, а состояние кубита $|1\rangle$ — как $|1\rangle_{ph}|0\rangle_{at}$. Таким образом, состояние $|01\rangle$, которому требуется инвертировать фазу, имеет вид $|01\rangle_{ph}|10\rangle_{at}$, где первый фотонный кубит относится к полости x , а второй — к полости y . Заметим, что через время $\tau_1/2$ ноль и единица меняются местами с набегом фазы $\pi/2$.

Сначала организуется короткий по длительности обмен фотонами вспомогательной полости и полости x , затем, с задержкой $\tau_1/2$ — аналогичный обмен с полостью y , затем, через время $2n_2\tau_2$, снова организуется короткий обмен фотонами вспомогательной полости с полостью x , затем, через время $\tau_1/2$ — аналогичный обмен с полостью y . Из выбора времен перемещений фотонов вытекает, что в данные моменты в участвующих полостях будет либо один фотон,

либо ни одного, поэтому включение ячеек Поккельса на малом временном отрезке $\delta\tau = \pi\hbar/2\nu \ll \tau_1$ даст именно перемещение фотонов.

6.3 Численное моделирование гейта coCSign

В построении гейта coCSign участвуют три полости: две полости (x и y), реализующие логические кубиты квантовой системы, и одна вспомогательная полость (aux). Базисные состояния каждой полости (в рамках модели JC) можно записать в виде $|m\rangle_{ph}|n\rangle_{at}$, где m — количество фотонов в полости ($m = 0, 1, 2$), n — уровень возбуждения атома ($n = 0, 1$). Выпишем все базисные состояния, относящиеся к полостям x, y :

$$v = \begin{pmatrix} |00\rangle \\ |10\rangle \\ |01\rangle \\ |20\rangle \\ |11\rangle \end{pmatrix}.$$

Унитарная динамика в каждой полости определяется гамильтонианом Джейнса-Каммингса в приближении RWA [55–57]:

$$H_{\text{JC}}^{\text{RWA}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega & g & 0 & 0 \\ 0 & g & \hbar\omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\hbar\omega & \sqrt{2}g \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}g & 2\hbar\omega \end{pmatrix}.$$

Базисные состояния всей системы (состоящей из трех полостей), можно записать в виде $|m_x m_y m_{aux}\rangle_{ph} |n_x n_y n_{aux}\rangle_{at}$. Всего будет 18 таких состояний:

$$\left(\begin{array}{l} |000\rangle_{ph} |110\rangle_{at} \\ |010\rangle_{ph} |100\rangle_{at} \\ |100\rangle_{ph} |010\rangle_{at} \\ |110\rangle_{ph} |000\rangle_{at} \\ |000\rangle_{ph} |101\rangle_{at} \\ |100\rangle_{ph} |001\rangle_{at} \\ |001\rangle_{ph} |001\rangle_{at} \\ |101\rangle_{ph} |000\rangle_{at} \\ |000\rangle_{ph} |011\rangle_{at} \\ |001\rangle_{ph} |010\rangle_{at} \\ |010\rangle_{ph} |001\rangle_{at} \\ |011\rangle_{ph} |000\rangle_{at} \\ |002\rangle_{ph} |000\rangle_{at} \\ |001\rangle_{ph} |001\rangle_{at} \\ |020\rangle_{ph} |000\rangle_{at} \\ |010\rangle_{ph} |010\rangle_{at} \\ |200\rangle_{ph} |000\rangle_{at} \\ |100\rangle_{ph} |100\rangle_{at} \end{array} \right).$$

Построенный гамильтониан системы, реализующей гейт coCSign , в его грубом представлении изображен на 6.3. Перелет фотона возможен только между вспомогательной полостью и одной из полостей кубита. Наличие ν_x в гамильтониане означает переход $[x \Leftrightarrow aux]$, значение ν_y означает переход $[y \Leftrightarrow aux]$.

Ниже приведено соответствие между логическими кубитами (слева), над которыми оперирует гейт, и базисными векторами всей системы

$$\begin{aligned} |00\rangle_q &\iff |000\rangle_{ph} |110\rangle_{at}, \\ |01\rangle_q &\iff |010\rangle_{ph} |100\rangle_{at}, \\ |10\rangle_q &\iff |100\rangle_{ph} |010\rangle_{at}, \\ |11\rangle_q &\iff |110\rangle_{ph} |000\rangle_{at}. \end{aligned}$$

Эволюция вектора состояния в рамках унитарной динамики описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r,t) = H \Psi(r,t). \quad (6.3)$$

фотонов ν не может быть слишком большой, так как по мере ее увеличения сокращается время перехода фотона из полости в полость. А это, в свою очередь, приводит ко всё большей неопределенности его энергии и, как следствие, к деструктивной интерференции внутри полости (расстояние L между отражающими зеркалами должно быть кратно половине длины волны фотона $\lambda = 2\pi c/w_c$).

Частота фотона в экспериментах с атомом Rb85 составляет приблизительно $10^{10}c^{-1}$. Если мы примем за границу неопределенности частоты значение 10^9c^{-1} , то в силу соотношения неопределенностей $\delta w \cdot \delta t \approx 1$, получим нижнюю оценку $\delta\tau \approx 10^{-9}c^{-1}$ для допустимого интервала времени, в течение которого фотон может перейти из полости в полость. Учитывая время рабиевской осцилляции, равное примерно $\tau \approx 10^{-6}c^{-1}$, получим ограничение $10^{-9} \leq \tau \leq 10^{-6}$, означающее, что срабатывание гейта соCSign происходит с ошибкой, существенно большей 10^{-3} .

На точность гейта влияют следующие факторы: неточность определения времени перехода фотона в случае идеальной модели JCH (ошибка равенства (6.2)), технические ограничения ячейки Поккельса, реализующей перелет фотона, конечное время жизни фотона в неидеальном резонаторе и уширение спектральных линий рабочей моды резонатора. Второй и третий факторы носят чисто технический характер и выходят за пределы данной работы. Время жизни фотона в полости можно рассчитать, введя в уравнение (12) факторы декогерентности — операторы Линдблада $L = a$, реализующие утечку фотонов из полости. Их допустимые интенсивности l_i можно рассчитать на основе времени жизни фотона в эксперименте, что составляет несколько миллисекунд ([45]). Однако основным фактором декогеренции является последний, он имеет фундаментальную природу и проистекает из соотношения неопределенностей «время-энергия». Чем быстрее из полости в полость перелетает фотон, тем более неопределенной становится его частота, а значит, тем меньшим становится его время жизни в резонаторе.

6.5 Выводы главы

По результатам компьютерного моделирования запутывающего гейта coCSign в оптических полостях точность его срабатывания составила порядка 95%. Схема данного гейта, предложенная Ю. Ожиговым в работе [76], описывается моделью Джейнса-Каммингса-Хаббарда и заметно проще известных гейтов такого типа. Для ее реализации требуется дополнительная оптическая полость, организация же перелета фотонов из полости в полость осуществляется во временном окне, на которое налагаются ограничения двух типов. Первый связан с технической скоростью срабатывания ячейки Поккельса, второй — с фундаментальным соотношением неопределенностей «энергия-время». Подобные ограничения присутствуют и в других схемах фотонных компьютеров.

Простота предложенной схемы по сравнению с известными аналогами ([25]) делают ее вероятным кандидатом на экспериментальное решение. Главное достоинство предложенной схемы реализации гейтов — в ее простоте и возможности точного следования теоретической модели JCH, что, несмотря на упомянутые трудности, внушает оптимизм в плане масштабируемости и сравнения теории квантового компьютера с экспериментами на большом числе кубитов.

Заключение

Приведем в заключении основные результаты работы.

I. Коллективные осцилляции многоатомных ансамблей.

Была проанализирована динамика квантовых состояний ансамблей двухуровневых атомов и одномодового поля резонатора 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 равной численности и равной 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. По итогам многократных численных экспериментов для ряда квантовых систем была установлена граница его возникновения, выражающаяся через соотношение интенсивности перехода фотонов между полостями и силы взаимодействия атомов с полем.

Такого рода эхо представляет собой важный феномен, поскольку оно может быть использовано для переноса многочастичного состояния в процессе квантовой динамики, а также может послужить механизмом организации временной квантовой памяти.

II. Квантовое бутылочное горлышко в атомных превращениях.

Установлен парадоксальный 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.

III. Оптический отбор темных состояний ансамблей многоуровневых атомов.

Предложен метод оптического отбора темных состояний атомов, основанный на томографии состояния поля вне оптической полости. Данный метод не требует применения штарковского сдвига уровней и практически не зависит от выбора начального состояния атомов, помещенных в оптический резонатор.

Процесс оптического отбора был численно промоделирован для ансамблей двухуровневых и трехуровневых атомов спектра Rb85. На основе собранной статистики времён срабатывания детектора, регистрирующего вылет фотона, было установлено его среднее время жизни в полости, характерное для темных атомных состояний различного вида. Для трехуровневых атомов это, в частности, позволило сепарировать полностью темное трехатомное состояние (мультисинглет) от состояний, содержащих темную двухатомную компоненту.

Описанный метод, в силу технической простоты его реализации, может быть использован для генерации темных состояний ансамблей, состоящих из нескольких десятков атомов, что может быть полезным для организации квантовых вычислений, защищенных от декогерентности.

IV. Определение размерности темного подпространства пространства многоуровневых атомных ансамблей.

Предложен алгоритм определения размерности темного подпространства со-

стояний многоуровневых атомных ансамблей, основанный на целочисленном вычислении ранга сверхбольшой двоичной матрицы путем параллельной редукции соответствующего ей графа.

Данный алгоритм позволил установить размерность темного подпространства для 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 этом случае есть линейные комбинации мультисинглетов.

V. Моделирование запутывающего гейта coCSign на асинхронных атомных возбуждениях.

Проведены оценки качества управления гейтом coCSign. Установлено, что основным фактором его снижения в рамках модели JCH является увеличение ширины спектральных линий рабочей моды резонатора: данный фактор имеет фундаментальную природу и проистекает из соотношения неопределенностей «время-энергия». По результатам компьютерного моделирования гейта coCSign в отсутствие данного фактора, а также иных ограничений, чисто технического характера, точность его срабатывания составила порядка 95%.

**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, Impact Factor: 0.7].
- 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, Impact Factor: 0.468].
- 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, Impact Factor: 0.602].
- 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, Impact Factor: 0.7].
- 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, Impact Factor: 0.602].
- A6. *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, Impact Factor: 0.602].
Перевод: *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].
- 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, Impact Factor: 0.37].

Список сокращений и условных обозначений

JC (Jaynes-Cummings model) — модель Джейнса-Каммингса.

TC (Tavis-Cummings model) — модель Тависа-Каммингса.

JCH (Jaynes-Cummings-Hubbard model) — модель Джейнса-Каммингса-Хаббарда.

TCH (Tavis-Cummings-Hubbard model) — модель Тависа-Каммингса-Хаббарда.

RWA (rotating-wave approximation) — приближение вращающейся волны, при котором слагаемые $a^+\sigma^+$, $a\sigma$ гамильтониана моделей JC/JCH/TC/TCH, не сохраняющие энергию, можно игнорировать. В картине взаимодействия они быстро осциллируют, что делает их вклад незначительным.

GPU (graphics processing unit) — графический процессор, который предназначен для ускорения рендеринга графики и параллельных вычислений. GPU содержат от нескольких сотен до нескольких тысяч вычислительных ядер. Благодаря особенностям своей архитектуры и возможностям параллельной обработки данных GPU широко применяются в системах искусственного интеллекта, машинного обучения и высокопроизводительных вычислений.

SMP (symmetric multiprocessing, или shared-memory multiprocessing) — архитектура многопроцессорных компьютеров, в которой два или более одинаковых процессора сравнимой производительности подключаются единообразно к общей памяти и имеют равный доступ ко всем ресурсам вычислительной системы (в силу чего, система и называется симметричной).

MPP (massive parallel processing, массивно-параллельная архитектура) — класс архитектур параллельных вычислительных систем. Особенность архитектуры состоит в том, что оперативная память физически разделена между процессорами. Главным преимуществом систем с разделенной памятью является их высокая масштабируемость.

MPI (message passing interface, интерфейс передачи сообщений) — программный интерфейс передачи информации для обмена сообщениями между процессами, синхронизации выполнения задач, а также управления потоками данных в параллельных вычислениях. Является наиболее распространенным стандартом для построения высокопроизводительных программ для кластеров и суперкомпьютеров.

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. *Zalka, C.* Simulating quantum systems on a quantum computer / C. Zalka // Proceedings of the Royal Society of London Series A. — 1998. — Vol. 454, no. 1969. — P. 313. — DOI: [10.1098/rspa.1998.0162](https://doi.org/10.1098/rspa.1998.0162).
3. *Валиев, К. А.* Квантовые компьютеры: надежды и реальность / К. А. Валиев, А. А. Кокин. — Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2001. — 352 с. — ISBN 5-93972-024-2.
4. *Валиев, К. А.* Квантовые компьютеры и квантовые вычисления / К. А. Валиев // Усп. физ. наук. — 2005. — Т. 175, № 1. — С. 3—39. — DOI: [10.3367/UFNr.0175.200501a.0003](https://doi.org/10.3367/UFNr.0175.200501a.0003).
5. *Zippilli, S.* Cooling Trapped Atoms in Optical Resonators / S. Zippilli, G. Morigi // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 95, no. 14. — P. 143001. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.95.143001](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.143001).
6. Cavity-Based Single Atom Preparation and High-Fidelity Hyperfine State Readout / R. Gehr [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Vol. 104, no. 20. — P. 203602. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.104.203602](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.203602).
7. Dynamic Fabry-Pérot cavity stabilization technique for atom-cavity experiments / S. P. Dinesh [et al.] // EPJ Techniques and Instrumentation. — 2024. — Vol. 11, no. 1. — DOI: [10.1140/epjti/s40485-023-00107-3](https://doi.org/10.1140/epjti/s40485-023-00107-3).
8. *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).
9. *Mischuck, B.* Qudit quantum computation in the Jaynes-Cummings model / B. Mischuck, K. Mølmer // Phys. Rev. A. — 2013. — Vol. 87, no. 2. — P. 022341. — DOI: [10.1103/PhysRevA.87.022341](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.022341).

10. Demonstration of the Jaynes-Cummings ladder with Rydberg-dressed atoms / J. Lee [et al.] // *Phys. Rev. A.* — 2017. — Vol. 95, no. 4. — P. 041801. — DOI: [10.1103/PhysRevA.95.041801](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.041801).
11. *Larson, J.* The Jaynes-Cummings Model and Its Descendants / J. Larson, T. Mavrogordatos. — IOP Publishing, 2021. — (2053-2563). — ISBN 978-0-7503-3447-1. — DOI: [10.1088/978-0-7503-3447-1](https://doi.org/10.1088/978-0-7503-3447-1).
12. *Liu, C.* Quantum phase transition of the Jaynes-Cummings model / C. Liu, J.-F. Huang // *Science China Physics, Mechanics & Astronomy.* — 2023. — Vol. 67, no. 1. — P. 210311. — DOI: [10.1007/s11433-023-2243-7](https://doi.org/10.1007/s11433-023-2243-7).
13. *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).
14. *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](#)].
15. *Bojer, M.* Dicke-like superradiance of distant noninteracting atoms / M. Bojer, J. von Zanthier // *Phys. Rev. A.* — 2022. — Vol. 106, no. 5. — P. 053712. — DOI: [10.1103/PhysRevA.106.053712](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.053712).
16. *Movahedi, R.* Improvement of the entanglement generation in atomic states using a single-mode field in the Tavis-Cummings model / R. Movahedi, D. Afshar, M. Jafarpour // *The European Physical Journal D.* — 2023. — Vol. 77, no. 4. — P. 59. — DOI: [10.1140/epjd/s10053-023-00647-z](https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-023-00647-z).
17. Experimental study of modified Tavis-Cummings model with directly-coupled superconducting artificial atoms / J.-Y. Zhou [et al.] // *Opt. Express.* — 2024. — Vol. 32, no. 1. — P. 179—187. — DOI: [10.1364/OE.509250](https://doi.org/10.1364/OE.509250).
18. *Campos-Gonzalez-Angulo, J. A.* Generalization of the Tavis-Cummings model for multi-level anharmonic systems: Insights on the second excitation manifold / J. A. Campos-Gonzalez-Angulo, J. Yuen-Zhou // *The Journal of Chemical Physics.* — 2022. — Vol. 156, no. 19. — P. 194308. — DOI: [10.1063/5.0087234](https://doi.org/10.1063/5.0087234).
19. Beyond the Tavis-Cummings model: Revisiting cavity QED with ensembles of quantum emitters / M. Blaha [et al.] // *Phys. Rev. A.* — 2022. — Vol. 105, no. 1. — P. 013719. — DOI: [10.1103/PhysRevA.105.013719](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.105.013719).

20. *Borges, L.* Extending the Tavis-Cummings model for molecular ensembles / L. Borges, T. Schnappinger, M. Kowalewski // The Journal of Chemical Physics. — 2024. — Vol. 161, no. 4. — P. 044119. — DOI: [10.1063/5.0214362](https://doi.org/10.1063/5.0214362).
21. *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, no. 2. — P. 132—143.
22. *Бройер, Х. П.* Теория открытых квантовых систем / Х. П. Бройер, Ф. Петруччионе. — Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2010. — 824 с. — ISBN 978-5-93972-774-7.
23. *Kok, P.* Properties of multi-partite dark states / P. Kok, K. Nemoto, W. J. Munro. — 2002. — arXiv: [quant-ph/0201138](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0201138) [[quant-ph](https://arxiv.org/abs/quant-ph)].
24. *Quach, J. Q.* Using Dark States to Charge and Stabilize Open Quantum Batteries / J. Q. Quach, W. J. Munro // Phys. Rev. Appl. — 2020. — Vol. 14, no. 2. — P. 024092. — DOI: [10.1103/PhysRevApplied.14.024092](https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.14.024092).
25. *Azuma, H.* Quantum Computation with the Jaynes-Cummings Model / H. Azuma // Progress of Theoretical Physics. — 2011. — Vol. 126, no. 3. — P. 369—385. — DOI: [10.1143/PTP.126.369](https://doi.org/10.1143/PTP.126.369).
26. Demonstration of fault-tolerant universal quantum gate operations / L. Postler [et al.] // Nature. — 2022. — Vol. 605, no. 7911. — P. 675—680. — DOI: [10.1038/s41586-022-04721-1](https://doi.org/10.1038/s41586-022-04721-1).
27. *Нильсен, М.* Квантовые вычисления и квантовая информация / М. Нильсен, И. Чанг. — М.: Мир, 2006. — 824 с. — ISBN 5-03-003524-9.
28. *Стин, Э.* Квантовые вычисления / Э. Стин. — Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2000. — 112 с. — ISBN 5-93972-023-4.
29. Elementary gates for quantum computation / A. Barenco [et al.] // Phys. Rev. A. — 1995. — Vol. 52, no. 5. — P. 3457—3467. — DOI: [10.1103/PhysRevA.52.3457](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.52.3457).
30. *Shor, P. W.* Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer / P. W. Shor // SIAM Journal on Computing. — 1997. — Vol. 26, no. 5. — P. 1484—1509. — DOI: [10.1137/S0097539795293172](https://doi.org/10.1137/S0097539795293172).

31. Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance / L. M. Vandersypen [et al.] // *Nature*. — 2001. — Vol. 414, no. 6866. — P. 883—887. — DOI: [10.1038/414883a](https://doi.org/10.1038/414883a).
32. *Grover, L. K.* A fast quantum mechanical algorithm for database search / L. K. Grover // *Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. — Association for Computing Machinery, 1996. — P. 212—219. — (STOC '96). — ISBN 0897917855. — DOI: [10.1145/237814.237866](https://doi.org/10.1145/237814.237866).
33. *Strengths and Weaknesses of Quantum Computing* / C. H. Bennett [et al.] // *SIAM Journal on Computing*. — 1997. — Vol. 26, no. 5. — P. 1510—1523. — DOI: [10.1137/S0097539796300933](https://doi.org/10.1137/S0097539796300933).
34. *Китаев, А.* Классические и квантовые вычисления / А. Китаев, А. Шень, М. Вялый. — М.: МЦНМО, 1999. — 192 с. — ISBN 5-900916-35-9.
35. *Ozhigov, Y.* A quantum computer with fixed interaction is universal / Y. Ozhigov, L. Fedichkin // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. — 2003. — Vol. 77, no. 6. — P. 328—330. — DOI: [10.1134/1.1577767](https://doi.org/10.1134/1.1577767).
36. *Abrams, D. S.* Simulation of Many-Body Fermi Systems on a Universal Quantum Computer / D. S. Abrams, S. Lloyd // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 79, no. 13. — P. 2586—2589. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.79.2586](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.2586).
37. Quantum computer with atomic logical qubits encoded on macroscopic three-level systems in common quantum electrodynamic cavity / F. M. Abelayev [et al.] // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. — 2013. — Vol. 34, no. 4. — P. 291—303. — DOI: [10.1134/S1995080213040094](https://doi.org/10.1134/S1995080213040094).
38. *Shor, P. W.* Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory / P. W. Shor // *Phys. Rev. A*. — 1995. — Vol. 52, no. 4. — R2493—R2496. — DOI: [10.1103/PhysRevA.52.R2493](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.52.R2493).
39. *Calderbank, A. R.* Good quantum error-correcting codes exist / A. R. Calderbank, P. W. Shor // *Phys. Rev. A*. — 1996. — Vol. 54, no. 2. — P. 1098—1105. — DOI: [10.1103/PhysRevA.54.1098](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.54.1098).
40. Realization of Real-Time Fault-Tolerant Quantum Error Correction / C. Ryan-Anderson [et al.] // *Phys. Rev. X*. — 2021. — Vol. 11, no. 4. — P. 041058. — DOI: [10.1103/PhysRevX.11.041058](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.11.041058).

41. *Harper, R.* Fault-Tolerant Logical Gates in the IBM Quantum Experience / R. Harper, S. T. Flammia // Phys. Rev. Lett. — 2019. — Vol. 122, no. 8. — P. 080504. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.122.080504](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.080504).
42. *Rabi, I. I.* On the Process of Space Quantization / I. I. Rabi // Phys. Rev. — 1936. — Vol. 49, no. 4. — P. 324—328. — DOI: [10.1103/PhysRev.49.324](https://doi.org/10.1103/PhysRev.49.324).
43. *Ashhab, S.* Rabi oscillations in a qubit coupled to a quantum two-level system / S. Ashhab, J. R. Johansson, F. Nori // New Journal of Physics. — 2006. — Vol. 8, no. 6. — P. 103. — DOI: [10.1088/1367-2630/8/6/103](https://doi.org/10.1088/1367-2630/8/6/103).
44. *Gong, X.* Rabi oscillation and quantum decoherence of an optomechanical system with a three-level V-type atom trapped in a two-mode cavity / X. Gong // The European Physical Journal D. — 2022. — Vol. 76, no. 4. — P. 71. — DOI: [10.1140/epjd/s10053-022-00380-z](https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-022-00380-z).
45. *Rempe, G.* Observation of quantum collapse and revival in a one-atom maser / G. Rempe, H. Walther, N. Klein // Phys. Rev. Lett. — 1987. — Vol. 58, no. 4. — P. 353—356. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.58.353](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.353).
46. *Browaeys, A.* Single atoms in optical tweezers for quantum computing / A. Browaeys // APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics Meeting Abstracts. Vol. 39. — 2008. — OPP.10. — (APS Meeting Abstracts).
47. *Schaetz, T.* Trapping ions and atoms optically / T. Schaetz // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2017. — Vol. 50, no. 10. — P. 102001. — DOI: [10.1088/1361-6455/aa69b2](https://doi.org/10.1088/1361-6455/aa69b2).
48. Optical tweezers throw and catch single atoms / H. Hwang [et al.] // Optica. — 2023. — Vol. 10, no. 3. — P. 401—406. — DOI: [10.1364/OPTICA.480535](https://doi.org/10.1364/OPTICA.480535).
49. Time evolution of the one-dimensional Jaynes-Cummings-Hubbard Hamiltonian / M. I. Makin [et al.] // Phys. Rev. A. — 2009. — Vol. 80, no. 4. — P. 043842. — DOI: [10.1103/PhysRevA.80.043842](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.043842).
50. *Muralidharan, S.* Site-dependent control of polaritons in the Jaynes-Cummings-Hubbard model with trapped ions / S. Muralidharan, K. Toyoda // Applied Physics B. — 2023. — Vol. 129, no. 115. — DOI: [10.1007/s00340-023-08053-4](https://doi.org/10.1007/s00340-023-08053-4).

51. *Hogan, A. R.* Quench dynamics in the Jaynes-Cummings-Hubbard and Dicke models / A. R. Hogan, A. M. Martin // *Physica Scripta*. — 2024. — Vol. 99, no. 5. — P. 055118. — DOI: [10.1088/1402-4896/ad2efd](https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad2efd).
52. *Angelakis, D. G.* Photon-blockade-induced Mott transitions and XY spin models in coupled cavity arrays / D. G. Angelakis, M. F. Santos, S. Bose // *Phys. Rev. A*. — 2007. — Vol. 76, no. 3. — P. 031805. — DOI: [10.1103/PhysRevA.76.031805](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.76.031805).
53. Quantum-state transfer in staggered coupled-cavity arrays / G. M. Almeida [et al.] // *Phys. Rev. A*. — 2016. — Vol. 93, no. 3. — P. 032310. — DOI: [10.1103/PhysRevA.93.032310](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.032310).
54. 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).
55. *Ожигов, Ю. И.* Квантовый компьютер / Ю. И. Ожигов. — Москва: МАКС Пресс, 2020. — 172 с. — ISBN 978-5-317-06403-7.
56. *He, S.* Absence of collapse in quantum Rabi oscillations / S. He, Y. Zhao, Q.-H. Chen // *Phys. Rev. A*. — 2014. — Vol. 90, no. 5. — P. 053848. — DOI: [10.1103/PhysRevA.90.053848](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.90.053848).
57. *Zhang, Y.-Y.* Generalized rotating-wave approximation for the two-qubit quantum Rabi model / Y.-Y. Zhang, Q.-H. Chen // *Phys. Rev. A*. — 2015. — Vol. 91, no. 1. — P. 013814. — DOI: [10.1103/PhysRevA.91.013814](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.013814).
58. *Ozhigov, Y. I.* Conductivity measurements in JCH like models / Y. I. Ozhigov, N. A. Skovoroda. — 2015. — arXiv: [1506.03833](https://arxiv.org/abs/1506.03833) [quant-ph].
59. *Ожигов, Ю. И.* Компьютерное моделирование проводимости атомных возбуждений с помощью квантового основного уравнения / Ю. И. Ожигов, Н. А. Скворода // *Математическое моделирование*. — 2017. — Т. 29, № 12. — С. 105—116.
60. *Victorova, N. B.* Quasi-Classical Description of the "Quantum Bottleneck" Effect for Thermal Relaxation of an Atom in a Resonator / N. B. Victorova, A. V. Kulagin, Y. I. Ozhigov // *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).

61. *Plenio, M. B.* Dephasing-assisted transport: quantum networks and biomolecules / M. B. Plenio, S. F. Huelga // *New Journal of Physics*. — 2008. — Vol. 10, no. 11. — P. 113019. — DOI: [10.1088/1367-2630/10/11/113019](https://doi.org/10.1088/1367-2630/10/11/113019).
62. Dephasing-assisted transport in linear triple quantum dots / L. D. Contreras-Pulido [et al.] // *New Journal of Physics*. — 2014. — Vol. 16, no. 11. — P. 113061. — DOI: [10.1088/1367-2630/16/11/113061](https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/11/113061).
63. One-dimensional quantum walks / A. Ambainis [et al.] // *Proceedings of the Thirty-Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. — Association for Computing Machinery, 2001. — P. 37—49. — (STOC '01). — ISBN 1581133499. — DOI: [10.1145/380752.380757](https://doi.org/10.1145/380752.380757).
64. *Ambainis, A.* Quantum walks and their algorithmic applications / A. Ambainis // *International Journal of Quantum Information*. — 2003. — Vol. 1, no. 4. — P. 507—518. — DOI: [10.1142/S0219749903000383](https://doi.org/10.1142/S0219749903000383).
65. *Salimi, S.* Mixing and decoherence in continuous-time quantum walks on long-range interacting cycles / S. Salimi, R. Radgozar // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2009. — Vol. 42, no. 47. — P. 475302. — DOI: [10.1088/1751-8113/42/47/475302](https://doi.org/10.1088/1751-8113/42/47/475302).
66. Quadratic speedup for finding marked vertices by quantum walks / A. Ambainis [et al.] // *Proceedings of the 52nd Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*. — Association for Computing Machinery, 2020. — P. 412—424. — (STOC 2020). — ISBN 9781450369794. — DOI: [10.1145/3357713.3384252](https://doi.org/10.1145/3357713.3384252).
67. *Ландау, Л. Д.* Теоретическая физика. В 10 т. Т.3. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: Физматлит, 2021. — 800 с. — ISBN 978-5-9221-0530-9.
68. *Белоусов, Ю. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Ю. М. Белоусов. — М.: МЦНМО, 2023. — 364 с. — ISBN 978-5-4439-1761-0.
69. *Мессиа, А.* Квантовая механика. Т.1 / А. Мессиа. — М.: Наука, 1978. — 478 с.
70. *Kossakowski, A.* On quantum statistical mechanics of non-Hamiltonian systems / A. Kossakowski // *Reports on Mathematical Physics*. — 1972. — Vol. 3, no. 4. — P. 247—274. — DOI: [10.1016/0034-4877\(72\)90010-9](https://doi.org/10.1016/0034-4877(72)90010-9).

71. *Lindblad, G.* On the generators of quantum dynamical semigroups / G. Lindblad // Communications in Mathematical Physics. — 1976. — Vol. 48, no. 2. — P. 119—130. — DOI: [10.1007/BF01608499](https://doi.org/10.1007/BF01608499).
72. Квантовая криптографическая система АКМ2017 на основе ресурса неслепотности состояния спиновой синглет / Ф. К. Алиев [и др.] // Системы высокой доступности. — 2018. — Т. 14, № 4. — С. 61—72.
73. *Ожигов, Ю. И.* О размерности пространства темных состояний в модели Тависа-Каммингса / Ю. И. Ожигов // Матем. заметки. — 2022. — Т. 111, № 3. — С. 433—442. — DOI: [10.4213/mzm13464](https://doi.org/10.4213/mzm13464).
74. *Silverman, M. P.* Zeeman and Stark Effects / M. P. Silverman // The Optics Encyclopedia. — John Wiley & Sons, Ltd, 2007. — ISBN 9783527600441. — DOI: [10.1002/9783527600441.oel103](https://doi.org/10.1002/9783527600441.oel103).
75. *Virgo, W. L.* Simultaneous Stark and Zeeman effects in atoms with hyperfine structure / W. L. Virgo // American Journal of Physics. — 2013. — Vol. 81, no. 12. — P. 936—942. — DOI: [10.1119/1.4823999](https://doi.org/10.1119/1.4823999).
76. *Ozhigov, Y. I.* Quantum gates on asynchronous atomic excitations / Y. I. Ozhigov // Quantum Electronics. — 2020. — Vol. 50, no. 10. — P. 947—950. — DOI: [10.1070/QEL17320](https://doi.org/10.1070/QEL17320).
77. *Винберг, Э. Б.* Курс алгебры / Э. Б. Винберг. — М.: МЦНМО, 2011. — 590 с. — ISBN 978-5-94057-685-3.
78. *Ozhigov, Y. I.* About quantum computer software / Y. I. Ozhigov // Quant. Inf. Comput. — 2020. — Vol. 20, no. 7 & 8. — P. 570—580. — DOI: [10.26421/QIC20.7-8-3](https://doi.org/10.26421/QIC20.7-8-3).
79. *Ozhigov, Y. I.* Computer simulation of quantum effects in Tavis-Cummings model and its applications / Y. I. Ozhigov, N. A. Skovoroda, V. Y. Ladunov // International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2016. Vol. 10224. — SPIE, 2016. — P. 102242X. — DOI: [10.1117/12.2267190](https://doi.org/10.1117/12.2267190).
80. Homogeneous atomic ensembles and single-mode field: review of simulation results / A. V. Kulagin [et al.] // International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2018. Vol. 11022. — SPIE, 2019. — P. 110222C. — DOI: [10.1117/12.2521763](https://doi.org/10.1117/12.2521763).

81. *Miao, H.-h.* Using a modified version of the Tavis-Cummings-Hubbard model to simulate the formation of neutral hydrogen molecule / H.-h. Miao, Y. I. Ozhigov // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 2023. — Vol. 622. — P. 128851. — DOI: [10.1016/j.physa.2023.128851](https://doi.org/10.1016/j.physa.2023.128851).
82. *Chin, A. W.* Coherence and decoherence in biological systems: principles of noise-assisted transport and the origin of long-lived coherences / A. W. Chin, S. F. Huelga, M. B. Plenio // *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — 2012. — Vol. 370, no. 1972. — P. 3638—3657. — DOI: [10.1098/rsta.2011.0224](https://doi.org/10.1098/rsta.2011.0224).
83. *Huelga, S. F.* Vibrations, quanta and biology / S. F. Huelga, M. B. Plenio // *Contemporary Physics*. — 2013. — Vol. 54, no. 4. — P. 181—207. — DOI: [10.1080/00405000.2013.829687](https://doi.org/10.1080/00405000.2013.829687).
84. Photon emission statistics of a driven microwave cavity / P. Portugal [et al.] // *Phys. Rev. Res.* — 2023. — Vol. 5, no. 3. — P. 033091. — DOI: [10.1103/PhysRevResearch.5.033091](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.5.033091).
85. *Зубанов, А. М.* Одностадийный метод Розенброка с комплексными коэффициентами и автоматическим выбором шага / А. М. Зубанов, Н. И. Коконков, П. Д. Ширков. — 2011.
86. *ScaLAPACK Users' Guide* / L. S. Blackford [et al.]. — Society for Industrial, Applied Mathematics, 1997. — DOI: [10.1137/1.9780898719642](https://doi.org/10.1137/1.9780898719642).
87. *ScaLAPACK: A Portable Linear Algebra Library for Distributed Memory Computers - Design Issues and Performance* / J. Choi [et al.] // *PARA*. Vol. 1041. — Springer Nature, 1995. — P. 95—106. — (Lecture Notes in Computer Science). — ISBN 3-540-60902-4.
88. *Арушанян, О. Б.* Решение линейной алгебраической проблемы собственных значений для симметричных и эрмитовых матриц на основе пакета ScaLAPACK / О. Б. Арушанян, Н. И. Волченскова. — М.: Издательство Московского государственного университета, Научно-исследовательский вычислительный центр, 2016. — 74 с.
89. ScaLAPACK — Scalable Linear Algebra PACKage [Электронный ресурс]. — URL: <http://www.netlib.org/scalapack/index.html>.

90. ScaLAPACK Routines [Электронный ресурс]. — URL: <https://www.intel.com/content/www/us/en/docs/onemkl/developer-reference-c/2023-0/scalapack-routines.html>.
91. Matrix Algebra for GPU and Multicore Architectures [Электронный ресурс]. — URL: <https://icl.utk.edu/projectsfiles/magma/doxygen>.
92. Самарский, А. А. Численные методы / А. А. Самарский, А. В. Гулин. — М.: Наука, 1989. — 432 с. — ISBN 5-02-013996-3.
93. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. — М.: Наука, 1989. — 616 с. — ISBN 5-02-014576-9.
94. Хайпер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / Э. Хайпер, С. Нерсетт, Г. Ваннер. — М.: Мир, 1990. — 512 с. — ISBN 5-03-001179-X.
95. Бахвалов, Н. С. Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. — М.: Лаборатория знаний, 2023. — 636 с. — ISBN 978-5-93208-359-8.
96. 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).
97. Schumacher, B. Quantum coding / B. Schumacher // Phys. Rev. A. — 1995. — Vol. 51, no. 4. — P. 2738—2747. — DOI: [10.1103/PhysRevA.51.2738](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.51.2738).
98. Ma, Z. Fidelity induced distance measures for quantum states / Z. Ma, F.-L. Zhang, J.-L. Chen // Physics Letters A. — 2009. — Vol. 373, no. 38. — P. 3407—3409. — DOI: [10.1016/j.physleta.2009.07.042](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2009.07.042).
99. Uhlmann, A. Transition Probability (Fidelity) and Its Relatives / A. Uhlmann // Foundations of Physics. — 2011. — Vol. 41, no. 3. — P. 288—298. — DOI: [10.1007/s10701-009-9381-y](https://doi.org/10.1007/s10701-009-9381-y).
100. Photon-echo quantum memory in solid state systems / W. Tittel [et al.] // Laser & Photonics Reviews. — 2010. — Vol. 4, no. 2. — P. 244—267. — DOI: [10.1002/lpor.200810056](https://doi.org/10.1002/lpor.200810056).
101. Experimental realization of revival of silenced echo memory protocol in optical cavity / M. Minnegaliev [et al.] // EPJ Web Conf. — 2018. — Vol. 190. — P. 03007. — DOI: [10.1051/epjconf/201819003007](https://doi.org/10.1051/epjconf/201819003007).

102. Quantum memory in the revival of silenced echo scheme in an optical resonator / M. M. Minnegaliev [et al.] // *Quantum Electronics*. — 2018. — Vol. 48, no. 10. — P. 894. — DOI: [10.1070/QEL16762](https://doi.org/10.1070/QEL16762).
103. *Moiseev, S. A.* Photon/spin echo in a Fabry-Perot cavity / S. A. Moiseev, R. V. Urmancheev // *Opt. Lett.* — 2022. — Vol. 47, no. 15. — P. 3812—3815. — DOI: [10.1364/OL.465434](https://doi.org/10.1364/OL.465434).
104. Photonuclear reactions triggered by lightning discharge / T. Enoto [et al.] // *Nature*. — 2017. — Vol. 551, no. 7681. — P. 481—484. — DOI: [10.1038/nature24630](https://doi.org/10.1038/nature24630).
105. Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community / V. V. Voevodin [et al.] // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. — 2019. — Vol. 6, no. 2. — P. 4—11. — DOI: [10.14529/jsfi190201](https://doi.org/10.14529/jsfi190201).
106. *André, A.* Coherent atom interactions mediated by dark-state polaritons / A. André, L. M. Duan, M. D. Lukin // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 88, no. 24. — P. 243602. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.88.243602](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.243602).
107. Environment-assisted quantum control of a solid-state spin via coherent dark states / J. Hansom [et al.] // *Nature Physics*. — 2014. — Vol. 10. — P. 725—730. — DOI: [10.1038/nphys3077](https://doi.org/10.1038/nphys3077).
108. Dark states of dressed Bose-Einstein condensates / E. S. Lee [et al.] // *Phys. Rev. A*. — 1999. — Vol. 60, no. 5. — P. 4006—4011. — DOI: [10.1103/PhysRevA.60.4006](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.60.4006).
109. *Kozyrev, S. V.* Dark States in Quantum Photosynthesis / S. V. Kozyrev, I. V. Volovich // *Trends in Biomathematics: Modeling, Optimization and Computational Problems: Selected works from the BIOMAT Consortium Lectures, Moscow 2017*. — Springer International Publishing, 2018. — P. 13—26. — ISBN 978-3-319-91092-5. — DOI: [10.1007/978-3-319-91092-5_2](https://doi.org/10.1007/978-3-319-91092-5_2).
110. *Pörtl, C.* Spin-entangled two-particle dark state in quantum transport through coupled quantum dots / C. Pörtl, C. Emary, T. Brandes // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 87, no. 4. — P. 045416. — DOI: [10.1103/PhysRevB.87.045416](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.045416).

111. *Tanamoto, T.* Steady-State Solution for Dark States Using a Three-Level System in Coupled Quantum Dots / T. Tanamoto, K. Ono, F. Nori // Japanese Journal of Applied Physics. — 2012. — Vol. 51, 2S. — 02BJ07. — DOI: [10.1143/JJAP.51.02BJ07](https://doi.org/10.1143/JJAP.51.02BJ07).
112. *Berkeland, D. J.* Destabilization of dark states and optical spectroscopy in Zeeman-degenerate atomic systems / D. J. Berkeland, M. G. Boshier // Phys. Rev. A. — 2002. — Vol. 65, no. 3. — P. 033413. — DOI: [10.1103/PhysRevA.65.033413](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.65.033413).
113. *Nunez-Iglesias, J.* Elegant SciPy: The Art of Scientific Python / J. Nunez-Iglesias, S. van der Walt, H. Dashnow. — 1st edition. — O'Reilly Media, 2017. — 275 p. — ISBN 978-1491922873.
114. *Johansson, R.* Numerical Python: Scientific Computing and Data Science Applications with Numpy, SciPy and Matplotlib / R. Johansson. — 2nd edition. — Apress, 2018. — 723 p. — ISBN 978-1484242452.
115. *Fuhrer, C.* Scientific Computing with Python — Second Edition: High-performance scientific computing with NumPy, SciPy, and pandas / C. Fuhrer, J. E. Solem, O. Verdier. — 2nd edition. — Packt Publishing, 2021. — 392 p. — ISBN 978-1838822323.
116. Demonstration of a Fundamental Quantum Logic Gate / C. Monroe [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 1995. — Vol. 75, no. 25. — P. 4714—4717. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.75.4714](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.4714).
117. *Воеводин, В. В.* Параллельные вычисления / В. В. Воеводин. — БХВ-Петербург, 2002. — 608 с. — ISBN 5-94157-160-7.
118. *Robey, R.* Parallel and High Performance Computing / R. Robey, Y. Zamora. — Manning, 2021. — 704 p. — ISBN 978-1617296468.
119. MPI - The Complete Reference, Volume 1: The MPI Core / M. Snir [et al.]. — 2nd. — MIT Press, 1998. — 450 p. — ISBN 978-0262692151.
120. *Шпаковский, Г. И.* Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI / Г. И. Шпаковский, Н. В. Серикова. — Мн.: БГУ, 2002. — 323 с. — ISBN 985-445-727-3.
121. *Gropp, W.* Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface / W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum. — MIT Press, 2014. — 336 p. — ISBN 978-0-262-52739-2.

122. *Meyers, S.* Effective C++: 55 Specific Ways to Improve Your Programs and Designs / S. Meyers. — 3rd edition. — Addison-Wesley Professional, 2005. — 320 p. — ISBN 978-0321334879.
123. *Josuttis, N. M.* The C++ Standard Library: A Tutorial and Reference / N. M. Josuttis. — 2nd edition. — Addison-Wesley Professional, 2012. — 1136 p. — ISBN 978-0321623218.
124. *Stroustrup, B.* The C++ Programming Language / B. Stroustrup. — 4th edition. — Addison-Wesley Professional, 2013. — 1376 p. — ISBN 978-0275967307.
125. *Guntheroth, K.* Optimized C++: Proven Techniques for Heightened Performance / K. Guntheroth. — 1st edition. — O'Reilly Media, Inc., 2016. — 385 p. — ISBN 978-1491922064.
126. *O'Dwyer, A.* Mastering the C++17 STL: Make Full Use of the Standard Library Components in C++17 / A. O'Dwyer. — 1st edition. — Packt Publishing, 2017. — 384 p. — ISBN 978-1787126824.
127. *Andrist, B.* C++ High Performance: Master the art of optimizing the functioning of your C++ code / B. Andrist, V. Sehr, B. Garney. — 2nd edition. — Packt Publishing, 2020. — 544 p. — ISBN 978-1839216541.
128. *Idris, I.* Numpy Beginner's Guide: Build Efficient, High-speed Programs Using the High-performance Numpy Mathematical Library / I. Idris. — 3rd edition. — Packt Publishing, 2015. — 317 p. — ISBN 978-1785281969.

Приложение.
Коллективные осцилляции многоатомных ансамблей
(программный комплекс)

Листинг 1: main.py

```
1 from shutil import copyfile
2 import plotly.express as px
3 import pandas as pd
4 import sys
5 import os
6
7 # lib
8 from lib.LoadPackage import load_pkg
9 from lib.PyPlot import PyPlot3D
10
11 # Bipartite
12 from Bipartite.Cavity import Cavity
13 from Bipartite.Evolution import run_w
14 from Bipartite.Hamiltonian import Hamiltonian
15 from Bipartite.WaveFunction import WaveFunction
16
17
18 # подгрузка конфига квантовой системы
19 config = load_pkg("config", "config.py")
20
21 if not os.path.exists(config.path):
22     os.makedirs(config.path)
23
24 copyfile("config.py", config.path + '/config.py')
25
26 # объект полости
27 cavity = Cavity(n=config.n, wc=config.wc, wa=config.wa, g=config.g)
28
29 # построение гамильтониана
30 H = Hamiltonian(capacity=config.capacity, cavity=cavity)
31
32 # начальное состояние квантовой системы
33 w_0 = WaveFunction(states=H.states, init_state=config.init_state)
34 w_0.normalize()
35
36 # эволюция начального состояния квантовой системы
37 run_w(
38     w_0,
39     H,
40     dt=config.dt,
41     nt=config.nt,
42     config=config,
```

```

43     fidelity_mode=True
44 )
45
46 y_scale = 1
47
48 if config.T <= 0.25 * config.mks:
49     y_scale = 0.1
50 elif config.T <= 0.5 * config.mks:
51     y_scale = 0.1
52 elif config.T == 0.5 * config.mks:
53     y_scale = 0.01
54 elif config.T == 1 * config.mks:
55     y_scale = 7.5
56 elif config.T == 5 * config.mks:
57     y_scale = 1
58
59
60 def time_with_units(T):
61     if T >= 1e-3:
62         T_str = " ms"
63     elif T >= 1e-6:
64         T_str = " mks"
65     elif T >= 1e-9:
66         T_str = " ns"
67
68     return T_str
69
70
71 # построение графика ансамблевых осцилляций
72 PyPlot3D(
73     x_csv=config.path + "/" + "x.csv",
74     y_csv=config.path + "/" + "t.csv",
75     z_csv=config.path + "/" + "z.csv",
76     x_axis="states",
77     y_axis="time, " + time_with_units(config.T),
78     y_scale=y_scale,
79     path=config.path,
80     filename="Bipartite"
81 )
82
83
84 def plot_fidelity(filename=config.fid_csv):
85     z_data = pd.read_csv(filename)
86
87     fig = px.line(z_data["fidelity"])
88
89     fig.update_layout(
90         title="Fidelity",
91         xaxis_title='Time, ' + time_with_units(config.T),
92         yaxis_title="Fidelity",
93         showlegend=False,

```

```

94     font=dict(size=16)
95 )
96
97     fig.show()
98
99
100 # построение графика fidelity
101 plot_fidelity(config.fid_csv)

```

Листинг 2: config.py

```

1 from math import sqrt
2
3 KHz = 10 ** 3 # 1 КГц
4 MHz = 10 ** 6 # 1 МГц
5 GHz = 10 ** 9 # 1 ГГц
6
7 mks = 1e-6 # 1 мкс
8 ns = 1e-9 # 1 нс
9
10 # BEGIN----- CAVITY -----
11 capacity = 10
12 n = 5
13
14 wc = 21.506 * GHz
15 wa = 21.506 * GHz
16
17 g = 1e-2 * wa
18 # END----- CAVITY -----
19
20 # -----
21 T = 0.05 * mks
22 nt = 20000
23 dt = T / nt
24 # -----
25
26 init_state = [0, n]
27
28 # -----
29 path = "Bipartite/out/" + str(capacity) + "_" + str(n) + "/"
30
31 U_csv = path + "U.csv"
32 x_csv = path + "x.csv"
33 y_csv = path + "t.csv"
34 z_csv = path + "z.csv"
35 fid_csv = path + "fid.csv"
36 # -----

```

Листинг 3: Bipartite/Cavity.py

```

1 # lib
2 from lib.Assert import Assert, cf
3
4
5 # класс "Полость"
6 class Cavity:
7     def __init__(self, n, wc, wa, g):
8         Assert(isinstance(n, int), "n is not integer", cf())
9         Assert(isinstance(wc, (int, float)), "wc is not numeric", cf())
10        Assert(isinstance(wa, (int, float)), "wa is not numeric", cf())
11        Assert(isinstance(g, (int, float)), "g is not numeric", cf())
12
13        Assert(n > 0, "n <= 0", cf())
14        Assert(wc > 0, "wc <= 0", cf())
15        Assert(wa > 0, "wa <= 0", cf())
16        Assert(g > 0, "g <= 0", cf())
17
18        self.n = n
19
20        self.wc = wc
21        self.wa = wa
22
23        self.g = g

```

Листинг 4: Bipartite/Evolution.py

```

1 import numpy as np
2 import scipy.linalg as lg
3 import csv
4
5 # lib
6 from lib.Assert import Assert, cf
7 from lib.FileWriter import list_to_csv, write_x, write_t
8
9 # Bipartite
10 from Bipartite.Unitary import Unitary
11
12
13 def run_w(w_0, H, dt, nt, config, fidelity_mode=False):
14     U = Unitary(H, dt)
15     U_conj = U.conj()
16
17     if fidelity_mode:
18         fidelity = []
19
20     w_0 = np.matrix(w_0.data)

```



```

21 w_t = np.array(w_0.data)
22
23 dt_ = nt / (config.T / config.mks) / 20000 * 1000
24 nt_ = int(nt / dt_)
25
26 z_0 = []
27 z_1 = []
28 z_max = []
29
30 ind_0 = None
31 ind_1 = None
32
33 for k, v in H.states.items():
34     if v == [0, H.n]:
35         ind_0 = k
36     elif v == [H.n, 0]:
37         ind_1 = k
38
39 # эволюция начального состояния квантовой системы
40 with open(config.z_csv, "w") as csv_file:
41     writer = csv.writer(
42         csv_file, quoting=csv.QUOTE_NONE, lineterminator="\n")
43
44     for t in range(0, nt + 1):
45         w_t_arr = w_t.reshape(1, -1)[0]
46
47         diag_abs = np.abs(w_t_arr)**2
48         trace_abs = np.sum(diag_abs)
49
50         # проверка нормированности матрицы плотности
51         Assert(abs(1 - trace_abs) <= 0.1, "ro is not normed", cf())
52
53         if fidelity_mode:
54             w_t = np.matrix(w_t)
55
56             p = w_0.getH().dot(w_t).reshape(-1)[0, 0]
57
58             fidelity_t = round(abs(p), 3)
59             fidelity_t = "{:>.5f}".format(fidelity_t)
60
61             fidelity.append(fidelity_t)
62
63         z_0.append("{:.5f}".format(diag_abs[ind_0]))
64         z_1.append("{:.5f}".format(diag_abs[ind_1]))
65
66         zmax = 0
67
68         for i in range(0, len(diag_abs)):
69             if i != ind_0 and i != ind_1 and diag_abs[i] > zmax:
70                 zmax = diag_abs[i]
71

```

```

72         z_max.append(zmax)
73
74         writer.writerow(["{: .5f} ".format(x) for x in diag_abs])
75
76         w_t = np.array(U.data.dot(w_t))
77
78     states = H.states
79
80     write_x(states, config.x_csv, ind=[[0, H.n], [H.n, 0]])
81     write_t(t_for_plot(config.T), config.nt, config.y_csv)
82
83     if fidelity_mode:
84         list_to_csv(config.fid_csv, fidelity, header=["fidelity"])
85
86     list_to_csv(config.path + 'z_max.csv', z_max, header=["fidelity"])
87     list_to_csv(config.path + 'z_0.csv', z_0, header=["fidelity"])
88     list_to_csv(config.path + 'z_1.csv', z_1, header=["fidelity"])
89
90
91 def t_for_plot(T):
92     if T >= 1e-3:
93         T_str = round(T * 1e3, 3)
94     elif T >= 1e-6:
95         T_str = round(T * 1e6, 3)
96     elif T >= 1e-9:
97         T_str = round(T * 1e9, 3)
98     else:
99         T_str = round(T, 3)
100    return T_str

```

Листинг 5: Bipartite/Hamiltonian.py

```

1 import numpy as np
2 from math import sqrt
3
4 # lib
5 from lib.Matrix import Matrix
6
7
8 class Hamiltonian:
9     def __init__(self, capacity, cavity):
10        self.cavity = cavity
11
12        self.n = n = cavity.n
13
14        wc = cavity.wc
15        wa = cavity.wa
16        g = cavity.g

```



```

68             (capacity - (i1 + i2)) * wc + \
69             (i1 + i2) * wa
70         else:
71             self.matrix.data[i - 1, j - 1] = 0
72
73         j += 1
74
75         i += 1

```

Листинг 6: Bipartite/Unitary.py

```

1 import numpy as np
2 import scipy.linalg as lg
3
4 # lib
5 from lib.Assert import Assert, cf
6 from lib.Matrix import Matrix
7
8 # Bipartite
9 from Bipartite.Hamiltonian import Hamiltonian
10
11
12 class Unitary(Matrix):
13     def __init__(self, H, dt):
14         Assert(isinstance(H, Hamiltonian), "H is not Hamiltonian", cf())
15         Assert(isinstance(dt, (int, float)), "dt is not numeric", cf())
16         Assert(dt > 0, "dt <= 0", cf())
17
18         super(Unitary, self).__init__(
19             m=H.size, n=H.size,
20             dtype=np.complex128
21         )
22
23         H_data = np.array(H.matrix.data, dtype=np.complex128)
24
25         # оператор эволюции U = exp(-i * H * dt)
26         self.data = np.matrix(
27             lg.expm(-1j * H_data * dt),
28             dtype=np.complex128
29         )

```

Листинг 7: Bipartite/WaveFunction.py

```

1 import numpy as np
2

```

```

3 # lib
4 from lib.Assert import Assert, cf
5 from lib.Matrix import Matrix
6
7
8 class WaveFunction(Matrix):
9     def __init__(self, states, init_state, amplitude=1):
10         Assert(isinstance(states, dict), "states isn't dict", cf())
11         Assert(isinstance(init_state, list), "init_state isn't list", cf())
12         Assert(len(states) > 1, "len(states) <= 1", cf())
13
14         self.states = states
15
16         pos_found = None
17         for pos, state in states.items():
18             if init_state == state:
19                 pos_found = pos
20                 break
21
22         Assert(pos_found, "failed to set w_0", cf())
23
24         super(WaveFunction, self).__init__(
25             m=len(states), n=1,
26             dtype=np.complex128
27         )
28
29         self.data[pos_found] = amplitude
30
31     def set_amplitude(self, state_to_set, amplitude=1):
32         pos_found = None
33         for pos, state in self.states.items():
34             if state == state_to_set:
35                 pos_found = pos
36                 break
37
38         Assert(pos_found is not None, "amplitude not set", cf())
39
40         self.data[pos_found] = amplitude
41
42     def normalize(self):
43         norm = np.linalg.norm(self.data)
44         Assert(norm > 0, "norm <= 0", cf())
45
46         self.data /= norm
47
48     def print(self):
49         for k, v in self.states.items():
50             print(v, np.asarray(self.data[k]).reshape(-1)[0])

```

Листинг 8: lib/PyPlot.py

```

1 import numpy as np
2 import pandas as pd
3 import plotly
4 import plotly.graph_objects as go
5
6
7 def PyPlot3D(z_csv, x_csv, y_csv, title="", t_coeff=1, path=".", filename="
", x_axis="states", y_axis="time", to_file="", y_scale=1):
8     z_data = pd.read_csv(z_csv, header=None)
9
10    x = pd.read_csv(x_csv, keep_default_na=False)
11    x.replace(r'\[(.+)\]', r'\1>', regex=True, inplace=True)
12
13    x_header = list(x)[0]
14    x_ticktext = list(x['x'])
15    x_tickvals = list(x['vals'])
16
17    for i in range(len(x_ticktext)):
18        x_ticktext[i] = x_ticktext[i]
19        x_ticktext[i] = str(x_ticktext[i])
20
21    y = pd.read_csv(y_csv, keep_default_na=False)
22
23    y_header = list(y)[0]
24    y_ticktext = list(y["y"])
25    y_tickvals = np.array(list(y["vals"])) / t_coeff
26
27    data = [
28        go.Surface(
29            showscale=False,
30            lighting=dict(diffuse=0.5, specular=.2, fresnel=0.2),
31            z=z_data.values,
32            colorscale="Portland"
33        )
34    ]
35
36    scale = int(y_ticktext[-1])
37
38    layout = go.Layout(
39        title=title,
40        titlefont=dict(family='Lato', size=20, color="#222"),
41        margin=go.Margin(l=0, r=0, b=0, t=35, pad=50),
42        xaxis=dict(
43            ticks='outside',
44            tickfont=dict(size=200)
45        ),
46        yaxis=dict(
47            title="y Axis",
48            titlefont=dict(

```

```

49         family="Courier New, monospace",
50         size=40,
51         color="#FFFFFF"
52     ),
53     ticks='outside',
54     tickfont=dict(size=200)
55 ),
56 autosize=False,
57 width=1200,
58 height=650,
59 plot_bgcolor="#AAA",
60 scene=go.Scene(
61     camera=dict(
62         up=dict(x=0, y=0, z=1),
63         center=dict(x=0, y=0, z=0.2),
64         eye=dict(x=3.75, y=3.75, z=3.75)
65     ),
66     aspectratio={"x": 1, "y": y_scale * y_ticktext[-1], "z": 1},
67     xaxis={
68         "title": x_axis,
69         "showgrid": False,
70         "showline": False,
71         "tickvals": x_tickvals,
72         "ticktext": x_ticktext,
73         'titlefont': dict(size=18),
74         'tickfont': dict(size=14),
75         'autorange': True
76     },
77     yaxis={
78         'autorange': True,
79         "title": y_axis,
80         "ticktext": y_ticktext[:2],
81         "tickvals": y_tickvals[:2],
82         "linewidth": 1,
83         'titlefont': dict(size=18),
84         'tickfont': dict(size=14)
85     },
86     zaxis={
87         'autorange': True,
88         "range": [0, 1],
89         "title": "prob.",
90         "linewidth": 1,
91         'titlefont': dict(size=18),
92         'tickfont': dict(size=14)
93     }
94 )
95 )
96 fig = go.Figure(data=data, layout=layout)
97
98 print("Making plot...")
99 plotly.offline.plot(fig, filename=path + filename + ".html")

```