Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики

Ладунов Виталий Юрьевич

Термически-стационарные квантовые состояния в модели Тависа-Каммингса

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., профессор

Ю. И. Ожигов

Москва, 2018

Содержание

Аннотация **3**

1 Введение **4**

2 Постановка задачи **6**

3 Используемые математические модели **7**

3.1 Уравнение Шрёдингера 7

3.2 Операторы рождения и уничтожения фотонов 7

3.3 Состояния теплового равновесия 8

3.4 Модель Джейнса-Каммингса (JC) 8

3.5 Модель Тависа-Каммингса (TC) 10

3.6 Тёмные состояния в модели TC с RWA 10

3.7 Марковское приближение 11

4 Используемые численные методы **12**

4.1 Расчёт неунитарной динамики 12

4.2 Точное решение мастер-уравнения 12

4.3 Метод Паде для вычисления матричной экспоненты 13

4.4 Визуализация аттракторов 14

5 Полученные результаты **15**

5.1 Эффективность метода получения тёмных состояний с помощью эффекта Штарка 15

5.2 Стационарное состояние системы из одного атома с притоком и оттоком фотонов 16

5.3 Аттрактор для системы из двух атомов без притока фотонов 17

5.4 Стационарное состояние системы из двух атомов с притоком и оттоком фотонов 19

6 Заключение **21**

7 Список литературы **22**

8 Приложения **23**

8.1 Фрагмент кода используемой библиотеки 23

Аннотация

В работе рассматриваются тёмные и стационарные квантовые состояния систем из многих атомов в присутствии декогеренции, вызванной притоком и оттоком фотонов из оптического резонатора, а также аттракторы атомных состояний. Предложен точный метод расчёта неунитарной квантовой динамики и метод визуализации аттракторов атомных состояний. Дана классификация стационарных состояний и аттракторов систем из одного и двух атомов. Кроме того, рассчитана эффективность метода получения тёмных квантовых состояний с помощью эффекта Штарка.

1 Введение

Интерес в исследованиях в области квантовых вычислений продиктован двумя тенденциями в вычислительной технике и в фундаментальной науке. Первая из них связана с законом Мура. Согласно этому эмпирическому закону, с начала 1970-х годов по 2010-й год число транзисторов на кристалле интегральной схемы удваивалось примерно каждые два года. С другой стороны, по мере приближения размера элементарных вычислительных элементов к длине порядка одного нанометра, становится невозможно пренебрегать квантовыми эффектами, которые имеют место на таких масштабах. Таким образом, естественным продолжением тренда миниатюризации вычислительной архитектуры стала бы квантовая вычислительная машина, которая бы использовала квантовые эффекты как преимущество.

Вторая тенденция связана с моделированием физических процессов. Вычислительная техника с самого момента своего появления показала высокую эффективность в решении задач из различных областей естественных наук путём моделирования. На современных вычислительных машинах могут быть решены с высокой точностью различные задачи классической механики, гидро- и аэродинамики, небесной механики, и многие другие. Однако на пути моделирования всех возможных физических процессов стоят два серьёзных препятствия. Первое препятствие — отсутствие устойчивости в используемых математических моделях. В этой ситуации небольшие отклонения начальных условий задачи могут непредсказуемо повлиять на результат. По этой причине невозможно предсказывать движение атмосферных фронтов на длительные временные интервалы. В частности, один из первых примеров возникновения хаотической динамики в математических моделях, аттрактор Лоренца, был придуман как модель движения воздушных масс. Второй препятствие связано с моделированием явлений квантовой механики. Базовым принципом квантовой меаники является принцип суперпозиции. Следствием этого принципа является тот факт, что сложность описания квантовых состояний системы растёт экспоненциально в зависимости от числа частиц, входящих в эту систему. По этой причине моделирование сложных квантовых систем становится невозможным на классических вычислительных машинах. Один из путей решения этой проблемы был предложен в начале 1980-х Р. Фейнманом и другими. Этот путь заключается в построении квантовой вычислительной машины, использующей квантовую память, состояние которой меняется во времени согласно уравнению Шрёдингера.

С начала 1990-х интерес к квантовым вычислениям значительно возрос, так как в работах П. Шора и Л. Гровера была показана теоретическая возможность решать некоторые математические задачи со значительно более низкой сложностью, чем в известных классических алгоритмах. В частности, алгоритм факторизации Шора даёт возможность факторизовать число длины n на квантовом вычислительном устройстве за время порядка $n^2 \log n \log\log n$, тогда как лучший классический алгоритм имеет почти экспоненциальную сложность по n. Такое ускорение сводит на нет криптографическую стойкость современных асимметрических алгоритмов шифрования, таких, как RSA, так как они зависят от сложности решения задачи

факторизации.

С момента публикации перечисленных работ предпринимались многие попытки построения универсального масштабируемого квантового компьютера. Но самые большие квантовые компьютеры на сегодняшний день имеют недостаточное число кубит для решения практических задач. Причина заключается в декогеренции, быстром распаде квантовых состояний и потере запутанности между кубитами. На сегодняшний день существуют квантовые компьютеры, в качестве квантовой памяти использующие различные физические принципы. Например, существуют фотонные кубиты, кубиты на ионах в ловушках, кубиты на джозефсоновских переходах.

Кроме того, одним из перспективных способов реализации кубитов являются состояния атомов в оптических резонаторах. Электромагнитное поле в оптическом резонаторе является одномодовым, и по этой причине задача моделирования взаимодействия вещества и поля в оптическом резонаторе значительно упрощается и становится конечномерной. В работах Раби, Джейнса, Каммингса, Тависа и Дикке были введены конечномерные модели квантовой электродинамики, которые затем были подтверждены многочисленными экспериментами (например, Ремпе, Вальтера и Клейна), в том числе, с использованием оптических полостей со сверхвысоким коэффициентом отражения. Конечномерные модели квантовой электродинамики также применимы и для описания так называемы искуственных атомов, основанных на джозефсоновских переходах. Интересным феноменом, возникающим в оптических полостях, являются так называемые тёмные квантовые состояния. Это такие виды атомных состояний, в которых невозможно взаимодействие атомов с электромагнитным полем. Таким образом, атомы в таких состояниях являются свободными от главного вида декогеренции, вызванного взаимодействием с фоновым электромагнитным полем.

При изучении математических моделей, заданных дифференциальными уравнениями с зависимостью от времени, полезно знать структуру стационарных состояний этих уравнений. Уравнение на стационарные состояния может быть получено приравниванием первой производной зависимой переменной к нулю. Если стационарные состояния существуют, то некоторые из них также могут являться пределом решения исходного дифференциального уравнения с произвольными начальными условиями при бесконечно большом временном интервале. Также уравнение может не иметь стационарных состояний, но иметь аттракторы — траектории (или другие множества), к которым зависимая переменная приближается сколь угодно близко в смысле некоторой нормы при бесконечно большом временном интервале. Изучение стационарных состояний и аттракторов открытых квантовых систем особенно интересно, так как в такие состояния квантовые системы переходят после длительного воздействия декогеренции.

Основная модель, используемая в данной работе — модель Тависа-Каммингса или модель нескольких двухуровневых атомов в оптической полости. В работе исследована задача получения тёмных состояний в модели Тависа-Каммингса и задача стационарных состояний в этой модели при условии постоянного теплообмена со внешней средой.

2 Постановка задачи

1. Провести расчёт эффективности способа получения тёмных квантовых состояний в модели ТС с помощью эффекта Штарка.

2. Изучить структуру стационарных состояний в модели ТС и долю тёмных квантовых состояний в них.

3 Используемые математические модели

3.1 Уравнение Шрёдингера

Уравнение Шрёдингера описывает изменение во времени физических систем, в которых значимы квантовые эффекты. Это уравнение записывается следующим образом:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(t)\right\rangle = H\left|\Psi(t)\right\rangle, \tag{1}$$

где $\hbar$ — постоянная Планка, $\left|\Psi(t)\right\rangle$ — волновая функция системы в момент времени t, H — гамильтониан системы (оператор полной энергии).

Для конечномерных квантовых систем $\left|\Psi(t)\right\rangle \in \mathbb{C}^n$, $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 1$, а H — эрмитов оператор, действующий на $\mathbb{C}^n$. Для таких систем может быть записано общее решение уравнения Шрёдингера:

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H}\left|\Psi(0)\right\rangle. \tag{2}$$

3.2 Операторы рождения и уничтожения фотонов

В квантовых моделях взаимодействия атомов с одномодовым электромагнитным полем используются операторы рождения и уничтожения фотонов $a^\dagger$ и a. Эти операторы являются взаимно сопряжёнными и не являются эрмитовыми.

Гамильтониан электромагнитного поля определяется выражением

$$H = \hbar\omega a^\dagger a. \tag{3}$$

Рассмотрим более подробно, как операторы $a^\dagger$ и a действуют на пространстве состояний электромагнитного поля.

Фотон является частицей с целым спином, следовательно, фоковское пространство $\mathcal{H}$ для фотона имеет базис $\left|0\right\rangle, \left|1\right\rangle, \ldots, \left|n\right\rangle, \ldots$. Операторы рождения и уничтожения фотонов действуют на базисных состояниях следующим образом:

$$a^\dagger\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle, \tag{4}$$

$$a\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle \text{ при } n \neq 0, \tag{5}$$

$$a\left|0\right\rangle = 0. \tag{6}$$

Оператор $a^\dagger a$ называется оператором числа фотонов и действует на базисных состояниях следующим образом:

$$a^\dagger a\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle. \tag{7}$$

Оператор числа фотонов является эрмитовым, а его собственными векторами являются фоковские состояния.

3.3 Состояния теплового равновесия

Далее, если не оговорено иное, мы будем рассматривать только одномодовое электромагнитное поле.

Исчерпывающее описание состояния поля даёт оператор плотности ρ, действующий на пространстве $\mathcal{H}$. Оператор ρ обладает следующими свойствами:

$$\begin{gathered} \rho = \rho^*, \\ \rho \geq 0, \\ Tr\rho = 1. \end{gathered} \tag{8}$$

Излучение абсолютно чёрного тела или полости при температуре T описывается состоянием канонического ансамбля (распределение Больцмана-Гиббса):

$$\rho = \frac{\exp\left(-H/kT\right)}{Tr\left[\exp\left(-H/kT\right)\right]} = \frac{\exp\left(-H/kT\right)}{1-\exp\left(-\hbar\omega/kT\right)}. \tag{9}$$

Такое состояние поля также называется состоянием теплового равновесия. Найдём среднее число фотонов и дисперсию числа фотонов в таком состоянии:

$$\langle n\rangle_T = Tr(\rho a^\dagger a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n\exp(-n\hbar\omega/kT)}{1-\exp\left(-\hbar\omega/kT\right)} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT)-1}, \tag{10}$$

$$\left\langle \Delta n^2\right\rangle_T = \langle n\rangle_T^2 + \langle n\rangle_T . \tag{11}$$

Состояния теплового равновесия хорошо описывают такие виды излучения, как солнечный свет, свет лампы накаливания, фоновое тепловое излучение внешней среды.

3.4 Модель Джейнса-Каммингса (JC)

Данная модель, предложенная Джейнсом и Каммингсом в 1963 году, является одной из базовых моделей квантовой оптики. Эффекты, предсказываемые этой моделью, были подтверждены экспериментально в 1987 году Ремпе, Вальтером и Клейном.

В модели JC средой, взаимодействующей с полем, является идеализированный двухуровневый атом. Электромагнитное поле в модели JC является одномодовым. Исключение других электромагнитных мод достигается за счёт применения оптической полости (резонатора) — двух взаимно направленных зеркал, имеющих высокую отражательную способность. Модель JC также допускает разнообразные модификации.

Состояние одного атома задаётся нормированным вектором из пространства $\mathbb{C}^2 = \mathcal{H}_{\text{atom}}$, при этом базисные векторы $(1,0)^T$ и $(0,1)^T$ соответствуют основному и возбуждённому состояниям атома (далее будем записывать их через обозначения Дирака $|0\rangle$ и $|1\rangle$, или же $|g\rangle$ и $|e\rangle$, от англ. ground state и excited state).

Состояние системы, состоящей из подсистем $\mathcal{H}_{\text{atom}}$ и $\mathcal{H}_{\text{field}}$, задаётся нормированным вектором, лежащим в пространстве

$$\mathcal{H}_{\text{system}} = \mathcal{H}_{\text{atom}} \otimes \mathcal{H}_{\text{field}}, \tag{12}$$

базисом которого является декартово произведение базисов подсистем $\mathcal{H}_{\text{atom}}$ и $\mathcal{H}_{\text{field}}$.

Для описания переходов между энергетическими уровнями атома используются операторы рождения и уничтожения возбуждений, которые задаются на базисных состояниях следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma^\dagger |0\rangle = |1\rangle\,,\ \sigma^\dagger |1\rangle = 0, \\ \sigma |0\rangle = 0,\ \sigma |1\rangle = |0\rangle\,. \end{aligned} \tag{13}$$

Теперь мы можем записать гамильтониан модели JC, используя введённые обозначения:

$$H_{JC} = \hbar\omega_a \sigma^\dagger\sigma + \hbar\omega_c a^\dagger a + g(\sigma + \sigma^\dagger)(a + a^\dagger), \tag{14}$$

где $\hbar\omega_a$ — энергия перехода для атома, ω_c — частота электромагнитного поля, g — интенсивность взаимодействия атом-поле. Гамильтониан H_{JC} применим только в случае так называемого дипольного приближения, когда $|\omega_c - \omega_a| \ll \omega_c$.

Если интенсивность взаимодействия атом-поле значительно меньше энергии переходов, а именно $\left|\frac{g}{\hbar\omega_c}\right| \ll 1$, то может быть использовано приближение вращающейся волны (RWA, rotating wave approximation). Это приближение даёт возможность удалить из гамильтониана члены, не сохраняющие энергию:

$$H_{RWA} = \hbar\omega_a \sigma^\dagger\sigma + \hbar\omega_c a^\dagger a + g(\sigma a^\dagger + \sigma^\dagger a). \tag{15}$$

Переписав гамильтониан в представлении взаимодействия, можно увидеть, что члены, не сохраняющие энергию, будут иметь быстро осциллирующие сомножители, поэтому их вклад в эволюцию системы будет очень мал. Так как в RWA-приближении многие состояния вещества и поля не могут быть достигнуты, размерность задачи значительно понижается.

Найдём аналитическое решение уравнения Шрёдингера с гамильтонианом H_{RWA} с частотами атома и полости, настроенными в резонанс:

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-\frac{i}{\hbar} H_{RWA} t)\,|\psi(0)\rangle\,, \tag{16}$$

$$H_{RWA} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega & g & 0 \\ 0 & g & \hbar\omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\hbar\omega \end{pmatrix}, \tag{17}$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H_{RWA}t} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i(\omega+g/\hbar)t}+e^{-i(\omega-g/\hbar)t}}{2} & \frac{e^{-i(\omega+g/\hbar)t}-e^{-i(\omega-g/\hbar)t}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i(\omega+g/\hbar)t}-e^{-i(\omega-g/\hbar)t}}{2} & \frac{e^{-i(\omega+g/\hbar)t}+e^{-i(\omega-g/\hbar)t}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-2i\omega t} \end{pmatrix}. \tag{18}$$

Пусть атом в начальный момент времени находился в основном состоянии $|g\rangle$, а поле — в состоянии Фока, соответствующем одному фотону $|1\rangle$. Тогда населённость уровня атома $|e\rangle$

в момент времени t определяется из (18) как

$$p_{|e\rangle}(t) = \left| \frac{e^{-i(\omega+g/\hbar)t} - e^{-i(\omega-g/\hbar)t}}{2} \right|^2, \tag{19}$$

$$p_{|e\rangle}(t) = \frac{1+\cos(2gt/\hbar)}{2}. \tag{20}$$

Величина $\Omega = \frac{2g}{\hbar}$ называется частотой Раби. Для полости, имеющей объём V, выполняется следующая зависимость интенсивности взаимодействия атома с полем от расположения атома в полости:

$$g(x) = d\sqrt{\frac{\hbar\omega_a}{2\varepsilon_0 V}} \sin\frac{\omega_c x}{c}, \tag{21}$$

где d — дипольный момент перехода $|g\rangle \leftrightarrow |e\rangle$.

3.5 Модель Тависа-Каммингса (TC)

Модель TC является обобщением модели JC. В этой модели взаимодействовать с полем может ансамбль двухуровневых атомов. Если для каждого атома выполняется дипольное приближение, то гамильтониан модели TC записывается в виде

$$H_{TC} = \sum_{k=1}^{n} \hbar\omega_k \sigma_k^\dagger \sigma_k + \hbar\nu a^\dagger a + \sum_{k=1}^{n} g_k(\sigma_k + \sigma_k^\dagger)(a + a^\dagger), \tag{22}$$

где $\hbar\omega_k$ — энергии переходов для атомов, ν — частота электромагнитного поля, g_k — интенсивности взаимодействий k-й атома с полем, рассчитываемые по формуле (21).

3.6 Тёмные состояния в модели TC с RWA

Рассмотрим модель TC с двумя атомами с условием выполнения приближения RWA, с частотами атомов и поля, настроенными в резонанс, и с одинаковыми интенсивностями взаимодействия атомов с полем. В такой модели могут существовать такие состояния атомного ансамбля, которые не будут взаимодействовать с полем. В самом деле, рассмотрим состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ и подействуем на него частью гамильтониана H_{TC}, отвечающей за взаимодействие:

$$\begin{aligned} g(\sigma_1^\dagger a + \sigma_2^\dagger a + \sigma_1 a^\dagger + \sigma_2 a^\dagger)\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_a |n\rangle_c - |10\rangle_a |n\rangle_c) = \\ = \frac{g}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\,|11\rangle_a |n-1\rangle_c + \sqrt{n+1}\,|00\rangle_a |n+1\rangle_c - \\ - \sqrt{n}\,|11\rangle_a |n-1\rangle_c - \sqrt{n+1}\,|00\rangle_a |n+1\rangle_c) = 0. \end{aligned} \tag{23}$$

При этом такое состояние является собственным для гамильтониана H_{TC}. Несложно проверить, что это состояние будет тёмным и без приближения RWA.

3.7 Марковское приближение

Оптические полости, вообще говоря, не являются изолированными системами и могут взаимодействовать с окружением. Примеры процессов взаимодействия с окружением — приток и отток фотонов во внешнюю среду за счёт неидеальности зеркал, поглощение фотонов зеркалами, взаимодействие с тепловым резервуаром. Марковское приближение состоит в том, что предполагается отсутствие памяти у внешней среды. В случае марковского приближения динамика системы перестаёт быть унитарной, но она сохраняет структуру квантовой динамической полугруппы в следующем смысле:

$$\Lambda_0(\rho) = \rho, \tag{24}$$

$$\Lambda_{s+t}(\rho) = (\Lambda_s \circ \Lambda_t)(\rho),\ t, s \geq 0. \tag{25}$$

Наиболее общее описание квантовой динамической полугруппы даёт основное кинетическое уравнение в форме Горини-Коссаковского-Сударшана-Линдблада. Оно имеет вид

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \sum_k \lambda_k \left(\mathcal{L}_k \rho \mathcal{L}_k^* - \frac{1}{2}\mathcal{L}_k^* \mathcal{L}_k \rho - \frac{1}{2}\rho \mathcal{L}_k^* \mathcal{L}_k \right), \tag{26}$$

где λ_k — интенсивность k-го необратимого процесса, $\mathcal{L}_k$ — оператор Линдблада k-го необратимого процесса.

Примеры операторов Линдблада:

- a — необратимый отток фотонов;
- $a^\dagger$ — необратимый приток фотонов;
- $\sigma^\dagger\sigma$ — дефазировка атомного состояния;
- $|j\rangle\langle i|$ — необратимый отток амплитуды из i-го состояния в j-е.

Как будет показано в дальнейшем, решение основного кинетического уравнения сводится к решению матричного дифференциального уравнения для векторизованной матрицы ρ.

4 Используемые численные методы

4.1 Расчёт неунитарной динамики

Мастер-уравнение для модели Тависа-Каммингса с притоком и оттоком фотонов выглядит следующим образом ($\hbar = 1$):

$$\dot{\rho} = -i[H_{TC}, \rho] + \mu_{in}(a^\dagger \rho a - \frac{1}{2} a a^\dagger \rho - \frac{1}{2} \rho a a^\dagger) + \mu_{out}(a \rho a^\dagger - \frac{1}{2} a^\dagger a \rho - \frac{1}{2} \rho a^\dagger a), \tag{27}$$

$$H_{TC} = \omega_c a^\dagger a + \sum_{k=1}^{n} \left(\omega_k \sigma_k^\dagger \sigma_k + g_k \sigma_k^\dagger a + g_k \sigma_k a^\dagger \right). \tag{28}$$

Проводились расчёты неунитарной динамики для начальной матрицы плотности, выбранной случайно. Выбор случайной начальной матрицы плотности проводился следующим образом:

$$A = (a_{mn}), \tag{29}$$

где $a_{mn} = x_{mn} + i y_{mn}$, $x_{mn}, y_{mn} = unif(-1, 1)$.

$$\rho_{rand} = \frac{A^* A}{tr(A^* A)}. \tag{30}$$

4.2 Точное решение мастер-уравнения

Для приближённого решения мастер-уравнения используется разностный метод или его комбинация с точным решением для унитарной части. Если матрица плотности небольшая, то возможно точное решение мастер-уравнения через векторизацию матрицы плотности.

Запишем мастер-уравнение в наиболее общем виде, $\hbar = 1$:

$$\dot{\rho} = -i \left[H, \rho \right] + \sum_{k=1}^{n} \left(L_k \rho L_k^* - \frac{1}{2} L_k^* L_k \rho - \frac{1}{2} \rho L_k^* L_k \right). \tag{31}$$

Пусть ψ_k — вектор-столбец, тогда ψ_k^* — вектор-строка. Тогда, если

$$\rho = \sum_{k=1}^{m} \psi_k \otimes \psi_k^* = \sum_{k=1}^{m} \psi_k \otimes (\psi_k^H)^T, \tag{32}$$

определим векторизованную матрицу плотности ρ_{vec} как

$$\rho_{vec} = \sum_{k=1}^{m} \psi_k \otimes \psi_k^H. \tag{33}$$

Рассмотрим действие следующего супероператора на матрицу плотности ρ:

$$L(\rho) = A \rho B = A \left(\sum_{k=1}^{m} \psi_k \otimes (\psi_k^H)^T \right) B = \sum_{k=1}^{m} A \psi_k \otimes (B^T \psi_k^H)^T, \tag{34}$$

тогда оператор, который аналогичным образом будет действовать на векторизованную матрицу плотности, имеет вид

$$L_{vec}(\rho_{vec}) = \sum_{k=1}^{m} A \psi_k \otimes B^T \psi_k^H = (A \otimes B^T) \rho_{vec}. \tag{35}$$

Используя (34) и (35), можно переписать мастер-уравнение для векторизованной матрицы плотности:

$$\dot{\rho}_{vec} = L_{vec}\rho_{vec}, \tag{36}$$

$$L_{vec} = -i(H \otimes I) + i(I \otimes H) + \sum_{k=1}^{n} \left(L_k \otimes L_k^H - \frac{1}{2}(L_k^* L_k \otimes I) - \frac{1}{2}(I \otimes L_k^T L_k^H) \right). \tag{37}$$

Точное решение мастер-уравнения можно записать через матричную экспоненту оператора для векторизованной матрицы плотности:

$$\rho_{vec}(t) = \exp(L_{vec}t)\rho_{vec}(0). \tag{38}$$

Так как L_{vec} является матрицей общего вида, для вычисления её экспоненты используется метод рациональной аппроксимации Паде.

4.3 Метод Паде для вычисления матричной экспоненты

Изучение многих физических, биологических и экономических процессов часто требует поиска решения системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами:

$$\dot{X}(t) = AX(t),\ X(0) = I, \tag{39}$$

где A, $X(t)$, $\dot{X}(t)$ — матрицы порядка $n \times n$, а I — единичная матрица.

Единственным решением этой системы является матричная экспонента, обозначаемая e^{At}, которая может быть выражена через степенной ряд

$$e^{At} = \sum_{t=0}^{\infty} \frac{(At)^i}{i!}. \tag{40}$$

Одним из наиболее точных методов расчёта матричной экспоненты является метод Паде. Пусть A — матрица $n \times n$, тогда аппроксимация Паде для e^A задаётся выражением

$$R_{pq}(A) = [D_{pq}(A)]^{-1} N_{pq}(A), \tag{41}$$

где

$$N_{pq}(A) = \sum_{j=0}^{p} \frac{(p+q-j)!p!}{(p+q)!j!(p-j)!} A^j \tag{42}$$

и

$$D_{pq}(A) = \sum_{j=0}^{q} \frac{(p+q-j)!q!}{(p+q)!j!(q-j)!} (-A)^j. \tag{43}$$

Случай, в котором $p = q$, называется диагональной аппроксимацией Паде, при которой достигается максимальный порядок аппроксимации при фиксированном числе матричных умножений. Кроме того, при расчёте $R_{qq}(B)$ погрешность аппроксимации возрастает по мере возрастания нормы B, по этой причине целесообразно расчитывать e^A по формуле $[R_{qq}(A/m)]^m$, где m — минимальное натуральное число, при котором $||A/m||_1 < 0.5$.

Метод Паде имеет точность $O(|A|_1^{2q+1})$, то есть его порядок точности в два раза выше, чем порядок точности метода Тейлора при том же числе матричных умножений.

Таким образом, метод Паде для вычисления матричной экспоненты произвольной матрицы A может быть задан следующим образом:

1. Если $||A||_1 < 0.5$, то перейти к шагу 4.
2. Найти минимальное целое число m, при котором $||A/m||_1 < 0.5$.
3. Найти $A := A/m$.
4. Вычислить $N_{qq}(A)$ и $D_{qq}(A)$.
5. Вычислить $e^A := [D_{pq}(A)]^{-1} N_{pq}(A)$ путём решения системы $D_{pq}(A)e^A = N_{pq}(A)$ методом Гаусса.
6. Если шаги 2 и 3 не были пропущены, вычислить $e^A := (e^A)^m$ с помощью бинарного возведения в степени, выбрав при этом $m = 2^k$, чтобы избежать лишних матричных умножений.

4.4 Визуализация аттракторов

Для визуализации аттракторов выполнялась следующая последовательность действий:

1. Выбирался достаточно большой момент времени t_1, в который не наблюдалось резкого изменения числа фотонов. В качестве первой точки аттрактора выбиралось значение матрицы плотности в момент времени t_1: $Attr_1 = \rho(t_1)$.
2. Проводился поиск момента времени t_2, соответствующего локальному максимуму следового расстояния до $Attr_1$.

$$dist(\rho(t_2), Attr_1) \geq dist(\rho(t_2 + \varepsilon), Attr_1),\ \forall \varepsilon > 0, \tag{44}$$

$$dist(A, B) = \frac{1}{2} tr\left(\sqrt{(A-B)^\dagger (A-B)}\right). \tag{45}$$

   В качестве второй точки аттрактора выбиралось значение матрицы плотности в средний момент времени между t_1 и t_2: $Attr_2 = \rho(\frac{t_2 - t_1}{2})$.
3. Строился параметрический график, первая ось которого соответствовала расстоянию $dist(\rho(t), Attr_1)$, а вторая — $dist(\rho(t), Attr_2)$.

5 Полученные результаты

5.1 Эффективность метода получения тёмных состояний с помощью эффекта Штарка

Эффект Штарка заключается в расширении спектральных линий атомов в присутствии постоянного электрического поля.

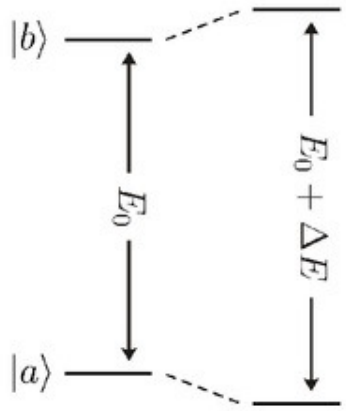

Рис. 1: Действие постоянного электрического поля на двухуровневый атом в оптической полости.

Он может быть учтён путём следующей модификации гамильтониана ТС:

$$H^k_{Interaction} = \kappa_k \omega_k \sigma^\dagger_k \sigma_k + \sqrt{\kappa_k} g_k \sigma^\dagger_k a + \sqrt{\kappa_k} g_k \sigma_k a^\dagger. \tag{46}$$

Тёмное состояние пары атомов может быть получено при резком прекращении действия постоянного электрического поля на один из атомов.

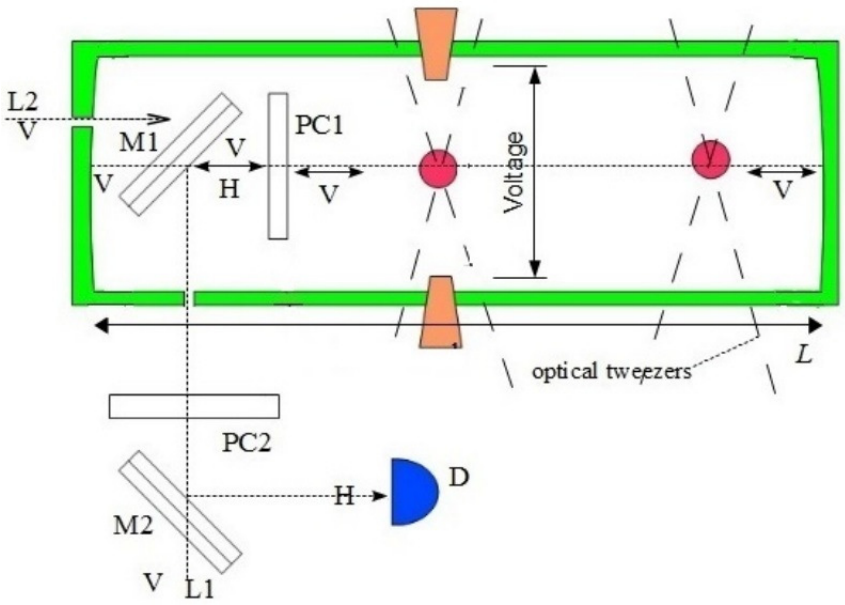

Рис. 2: Получение тёмных состояний в оптической полости. [10]

Был проведён расчёт эффективности данного метода. На следующем графике изображена доля тёмных состояний, которую можно получить, отключив электрическое поле, действующее на один из атомов, в соответствующий момент времени.

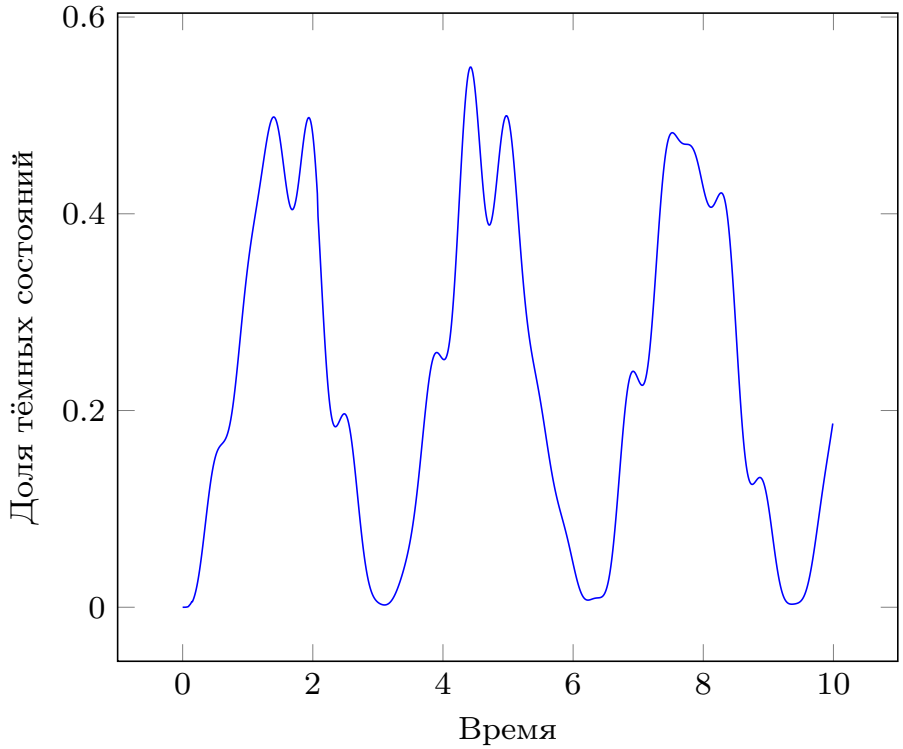

Рис. 3: Эффективность метода получения тёмных квантовых состояний с помощью эффекта Штарка, $\omega = 100$, $g_1 = 1$, $g_2 = 1$, $\kappa_1 = 1$, $\kappa_2 = 1.1$, для t от 0 до 10.

5.2 Стационарное состояние системы из одного атома с притоком и оттоком фотонов

Так как система из одного атома не имеет тёмных состояний, существует лишь одно стационарное состояние в случае притока и оттока фотонов — полностью смешанное термодинамически равновесное состояние:

$$\rho_{Steady} = (p_0 \left|g\right\rangle \left\langle g\right| + e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} p_0 \left|e\right\rangle \left\langle e\right|), \tag{47}$$

где T выражается через μ_{in} и μ_{out} следующим образом:

$$T = \frac{\hbar\omega}{k \ln \frac{\mu_{out}}{\mu_{in}}}. \tag{48}$$

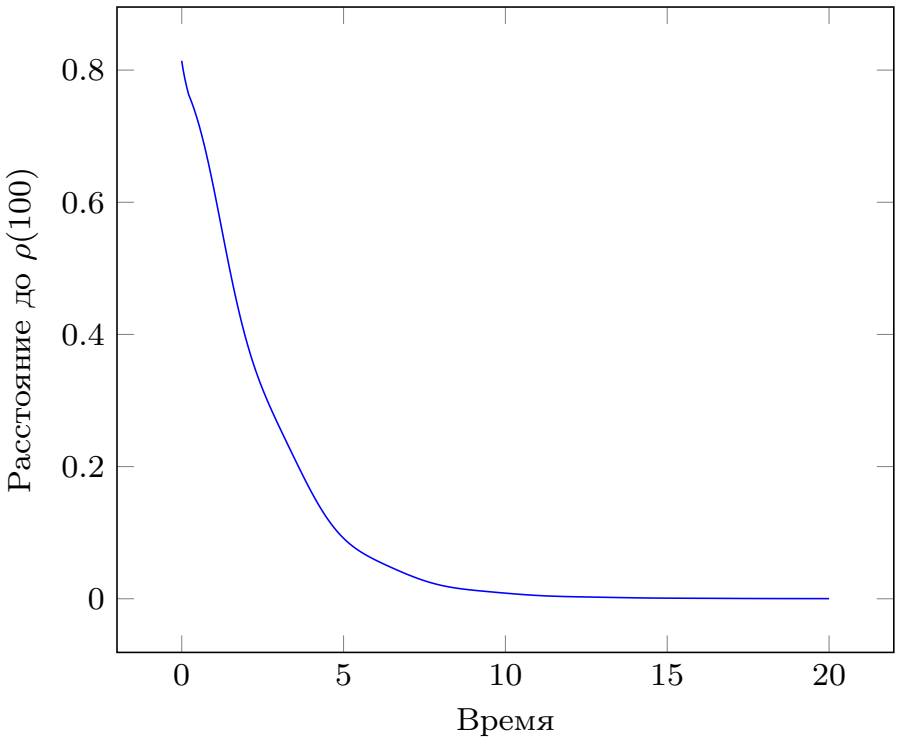

Рис. 4: Динамика следового расстояния до матрицы плотности в точке $t = 100$ для модели ТС с одним атомом с $\omega = 10$, $g = 1$, $\mu_{out} = 1$, $\mu_{in} = 0.25$, для t от 0 до 20.

5.3 Аттрактор для системы из двух атомов без притока фотонов

По алгоритму, описанному в предыдущем разделе, был построен аттрактор для системы из двух атомов без притока фотонов. Параметры модели указаны в подписях к графикам.

Полученный результат согласуется с теоретическим предсказанием: как вакуумное состояние $|00\rangle$, так и тёмное состояние $|Dark\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ являются стационарными, если имеет место только отток фотонов. Следовательно, аттрактор имеет вид

$$\rho = p_0 \left|00\right\rangle \left\langle 00\right| + \alpha \exp(i\omega t) \left|00\right\rangle \left\langle Dark\right| + \alpha \exp(-i\omega t) \left|Dark\right\rangle \left\langle 00\right| + p_1 \left|Dark\right\rangle \left\langle Dark\right|. \quad (49)$$

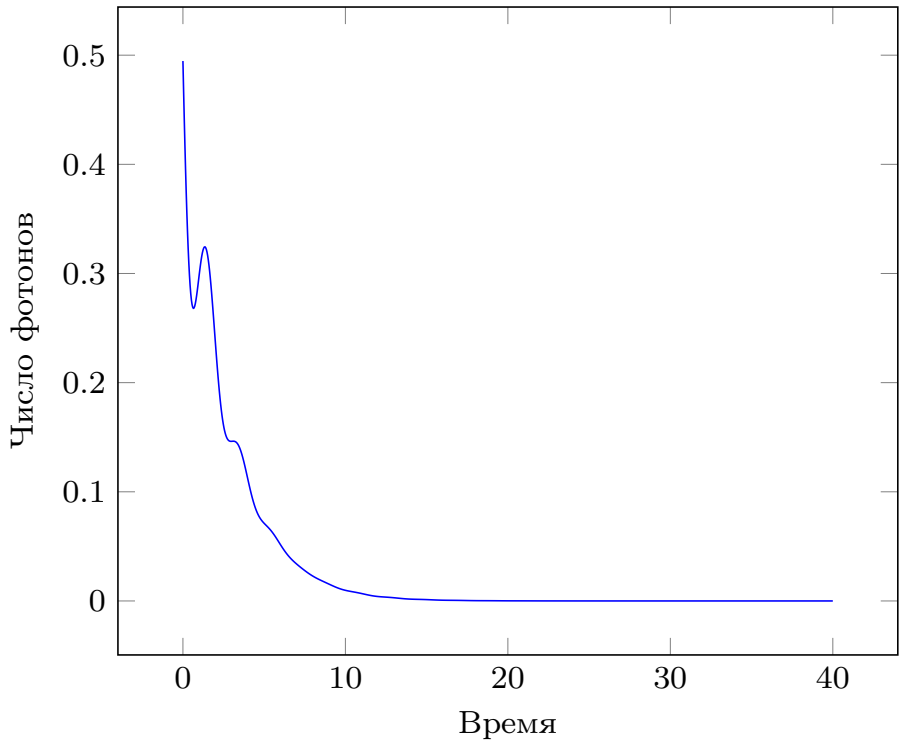

Рис. 5: Динамика числа фотонов для модели ТС с двумя атомами с $\omega = 10$, $g_1 = 0.85$, $g_2 = 1.29$, $\mu_{out} = 1$ для t от 0 до 40.

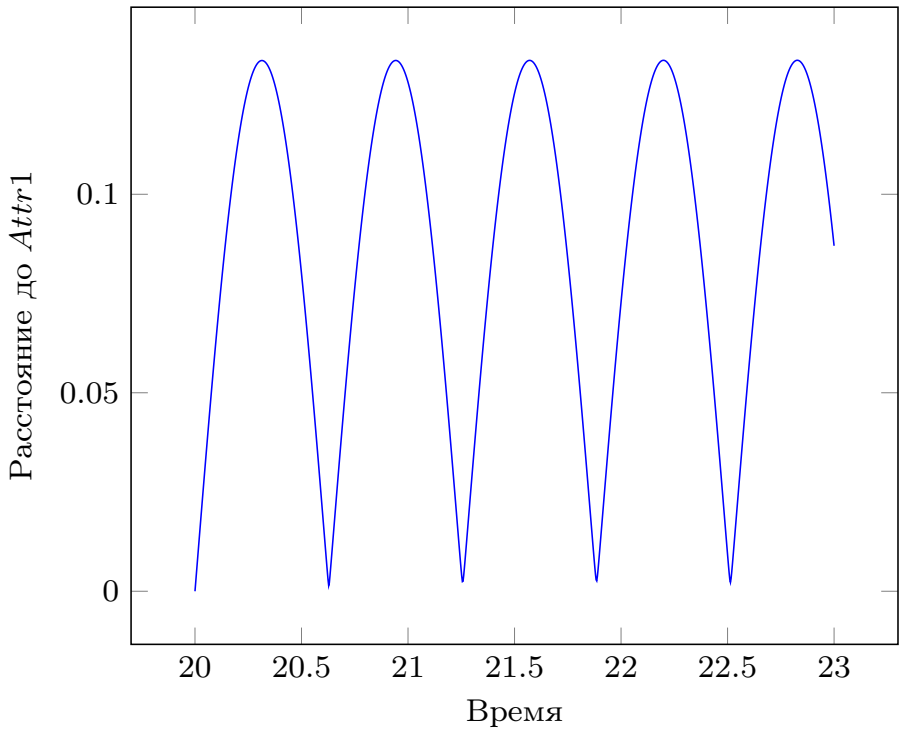

Рис. 6: Динамика следового расстояния до матрицы плотности в точке $t = 20$ для модели ТС с теми же параметрами.

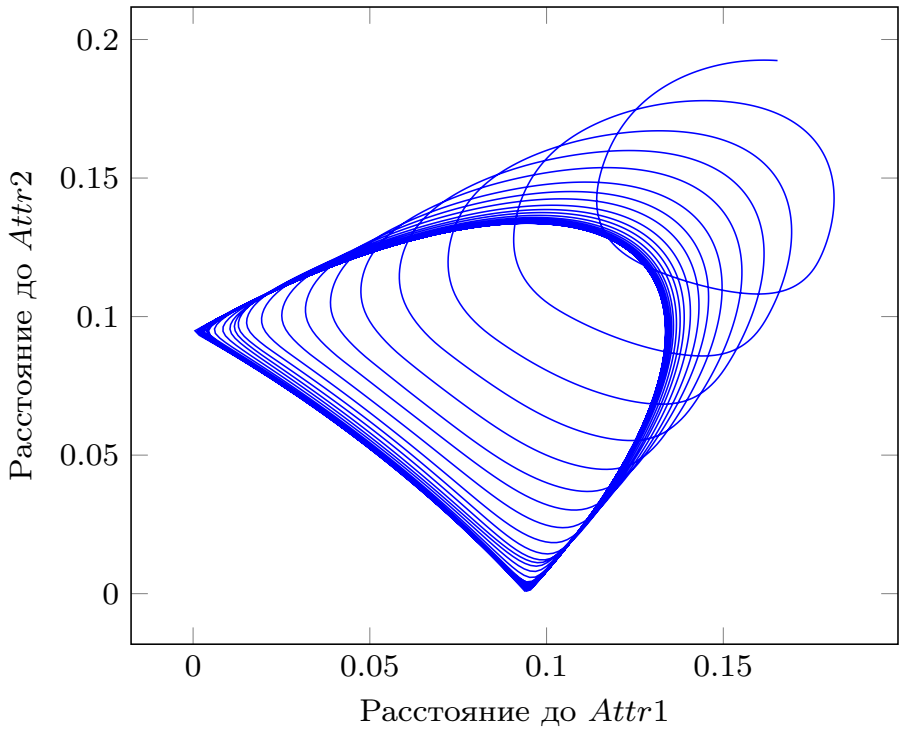

Рис. 7: Динамика следового расстояния до матриц плотности в точках $t_1 = 20$ и $t_2 = 20.157$ для модели ТС с теми же параметрами. Расчёт для t от 6 до 40.

5.4 Стационарное состояние системы из двух атомов с притоком и оттоком фотонов

Система из двух атомов в присутствии также и притока фотонов не имеет аттрактора, так как внедиагональные элементы матрицы плотности вида $|00\rangle \langle Dark|$ не будут стационарными и будут уничтожаться в ходе декогеренции.

Стационарное состояние в таком случае будет иметь вид

$$\rho_{Steady} = p_0 |00\rangle \langle 00| + p_1(|01\rangle + |10\rangle)(\langle 01| + \langle 10|) + p_2 |11\rangle \langle 11| + p_{Dark} |Dark\rangle \langle Dark| . \quad (50)$$

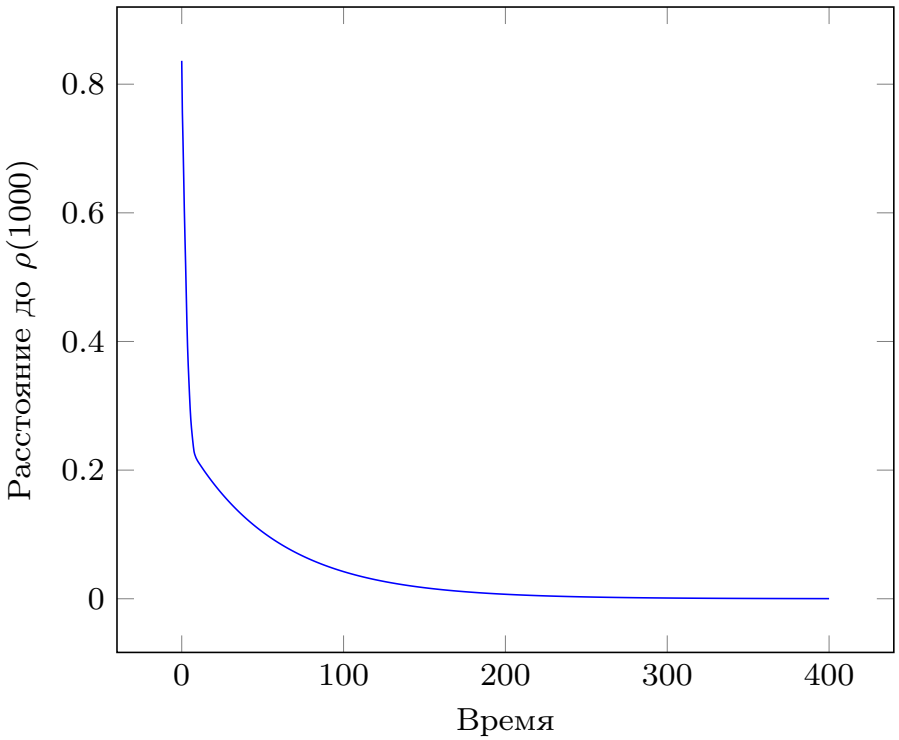

Рис. 8: Динамика следового расстояния до матрицы плотности в точке $t = 1000$ для модели ТС с двумя атомами с $\omega = 10$, $g_1 = 0.85$, $g_2 = 1.29$, $\mu_{out} = 1$, $\mu_{in} = 0.25$, для t от 0 до 400.

6 Заключение

В процессе подготовки магистерской диссертации были получены следующие результаты:

1. Исследован КПД метода получения тёмных квантовых состояний с помощью эффекта Штарка.

2. Дана классификация стационарных состояний одноатомной системы в модели ТС и двуатомной системы без притока фотонов.

3. Сформулированы предположения о структуре стационарных состояний систем из многих атомов в модели ТС.

4. Предложен метод точного расчёта неунитарной динамики квантовых систем для очень больших временных интервалов с помощью векторизации матрицы плотности и аппроксимации Паде.

5. Предложен метод визуализации аттракторов модели ТС.

7 Список литературы

[1] M Arioli, B Codenotti, and C Fassino. The padé method for computing the matrix exponential. *Linear algebra and its applications*, 240:111–130, 1996.

[2] Heinz-Peter Breuer and Francesco Petruccione. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press on Demand, 2002.

[3] Robert H Dicke. Coherence in spontaneous radiation processes. *Physical Review*, 93(1):99, 1954.

[4] Roy J Glauber. Coherent and incoherent states of the radiation field. *Physical Review*, 131(6):2766, 1963.

[5] Roy J Glauber. The quantum theory of optical coherence. *Physical Review*, 130(6):2529, 1963.

[6] Edwin T Jaynes and Frederick W Cummings. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proceedings of the IEEE*, 51(1):89–109, 1963.

[7] Yu I Ozhigov, Nikita Andreevich Skovoroda, and NB Victorova. Quantum revivals of a non-rabi type in a jaynes–cummings model. *Theoretical and Mathematical Physics*, 189(2):1673–1679, 2016.

[8] Yuri I Ozhigov. Dark states of atomic ensembles: properties and preparation. In *International Conference on Micro-and Nano-Electronics 2016*, volume 10224, page 102242Y. International Society for Optics and Photonics, 2016.

[9] Yuri I Ozhigov. Space of dark states in tavis-cummings model. *arXiv preprint arXiv:1606.08483*, 2016.

[10] Yuri I Ozhigov and Nikita A Skovoroda. Dark states of atomic ensembles. *arXiv preprint arXiv:1509.01024*, 2015.

[11] Yuri I Ozhigov, Nikita A Skovoroda, and Vitalii Y Ladunov. Computer simulation of quantum effects in tavis-cummings model and its applications. *Proceedings of the SPIE, Volume 10224, id. 102242X 13 pp.(2016).*, 224, 2016.

[12] Isidor Isaac Rabi. Space quantization in a gyrating magnetic field. *Physical Review*, 51(8):652, 1937.

[13] Gerhard Rempe, Herbert Walther, and Norbert Klein. Observation of quantum collapse and revival in a one-atom maser. *Physical review letters*, 58(4):353, 1987.

[14] Michael Tavis and Frederick W Cummings. Exact solution for an n-molecule—radiation-field hamiltonian. *Physical Review*, 170(2):379, 1968.

8 Приложения

Для удобства моделирования динамики различных конфигураций вещества и поля в оптических полостях часто используемые функции были сгруппированы в следующую библиотеку на языке Python 3.

8.1 Фрагмент кода используемой библиотеки

```
#!/usr/bin/env python3
# -*- coding: utf-8 -*-

import functools
import numpy as np
import random
from scipy.linalg import expm


error = 1e-10  # Допустимаяпогрешность .


def tensor(*args):
    """Возвращает тензорноепроизведениеаргументовматриц -.
    """

    return functools.reduce(np.kron, args)


def qeye(n):
    """Возвращает единичнуюматрицу nxn.
    """

    return np.eye(n)


def create(n):
    """Возвращает операторрождения nxn.
    """

    return np.diag(np.sqrt(np.arange(1, n)), -1)


def destroy(n):
    """Возвращает операторуничтожения nxn.
    """

    return np.diag(np.sqrt(np.arange(1, n)), 1)


def num(n):
    """Возвращает операторчислачастиц nxn.
    """

    return np.diag(np.arange(n))


def basis(n, i):
```

```
49      """Возвращает i-й базисный вектор в n-мерном пространстве нумерация
50      ( с нуля ).
51      """
52
53      psi = np.zeros(n)
54      psi[i] = 1
55      return psi
56
57
58  def unit(psi):
59      """Принимает ненормированный вектор psi и возвращает нормированный .
60      """
61
62      return psi / np.linalg.norm(psi)
63
64
65  def density_assert(rho, error):
66      """Проверянт неотрицательность, эрмитовость и единичность следа матрицы плотности
67          .
68      """
69
70      w, _ = np.linalg.eig(rho)
71      assert np.all(np.real(w) >= -error), \
72          "Error: the matrix is not non-negative!"
73      assert np.linalg.norm(rho - rho.T.conj()) < error, \
74          "Error: the matrix is not hermitian!"
75      assert np.abs(np.trace(rho) - 1) < error, \
76          "Error: trace is not 1!"
77
78
79  def hamiltonian_assert(H, error):
80      """Проверяет эрмитовость гамильтониана .
81      """
82
83      assert np.linalg.norm(H - H.T.conj()) < error, \
84          "Error: hamiltonian is not hermitian!"
85
86
87  def random_rho(n):
88      """Возвращает случайную матрицу плотности n x n.
89      """
90
91      rho = np.zeros((n, n), dtype=np.complex)
92      for i in range(n):
93          for j in range(n):
94              rho[i][j] = random.uniform(-1, 1) + 1j * random.uniform(-1, 1)
95      rho = np.dot(rho.T.conj(), rho)
96      rho = rho / np.trace(rho)
97      density_assert(rho, error)
98      return rho
99
100
101 def lindblad(H, rho0, t, c_ops):
102     """Точное решение мастер-уравнения -.
103     """
104
105     hamiltonian_assert(H, error)
106     density_assert(rho0, error)
107     n = len(H)
```

```
    I = qeye(n)
    A = -1j * (tensor(H, I.T) - tensor(I, H.T))
    for L in c_ops:
        Lc = L.T.conj()
        LL = np.dot(Lc, L)
        A += tensor(L, Lc.T) - 0.5 * tensor(LL, I.T) - 0.5 * tensor(I, LL.T)
    rho0_vec = np.resize(rho0, (n * n, 1))
    rho_vec = np.dot(expm(t * A), rho0_vec)
    rho = np.resize(rho_vec, (n, n))
    density_assert(rho, error)
    return rho


def partial_trace(rho, signature):
    """Частичный след.
    """

    left = 1
    right = np.prod([i for i, _ in signature])
    rho_old = rho
    for subdim, flag in signature:
        right //= subdim
        if flag == 0:
            rho_new = np.zeros((left * right, left * right), dtype=np.complex)
            for i_x in range(left):
                for i_y in range(left):
                    for j in range(subdim):
                        for k_x in range(right):
                            for k_y in range(right):
                                rho_new[
                                    i_x * right + k_x
                                ][
                                    i_y * right + k_y
                                ] += (
                                    rho_old[
                                        i_x * subdim * right + j * right + k_x
                                    ][
                                        i_y * subdim * right + j * right + k_y
                                    ]
                                )
            rho_old = rho_new
        else:
            left *= subdim
    return rho_old


def entanglement(rho, photon_bath):
    """Запутанность междусветомивеществом    .
    """

    matter_dim = len(rho) // photon_bath
    matter = partial_trace(rho, [(matter_dim, 1), (photon_bath, 0)])
    light = partial_trace(rho, [(matter_dim, 0), (photon_bath, 1)])
    return np.linalg.norm(rho - tensor(matter, light), ord="nuc")


if __name__ == "__main__":
    import doctest
    doctest.testmod()
```