

Сложные процессы с точки зрения квантовой физики

д.ф.-м.н., профессор

Ю.И.ОЖИГОВ

<http://sqi.cs.msu.su>

Содержание

1. Копенгагенская квантовая теория

Лекция 1. Введение. Принцип интерференции.

Лекция 2. Квантовая электродинамика. Наблюдения.

Лекция 3. Фейнмановские диаграммы.

2. Квантовый компьютер

Лекция 4. Введение. Феномен запутанности и квантовое дальноедействие.

Лекция 5. Квантовые алгоритмы.

Лекция 6. Квант амплитуды, принцип неопределенности «сложность-точность».

3. Квантовая информатика.

Лекция 7. Введение. КИ как новая наука. Компьютерные интерпретации КЭД и искусственный интеллект.

Лекция 8. Квантовые эффекты в нано-системах и в живом.

Лекция 9. Химический квантовый компьютер. Темы магистерских и аспирантских работ.

**Математика – язык, на котором Природа
говорит с нами (*Р.Фейнман*)**





Physics is much too hard for
physicists.

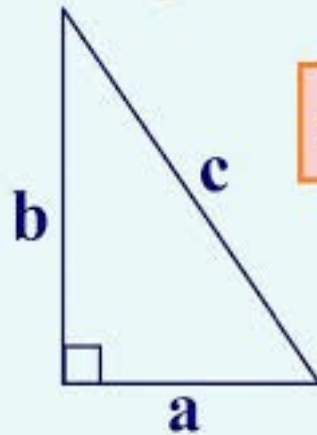
— *David Hilbert* —

AZ QUOTES

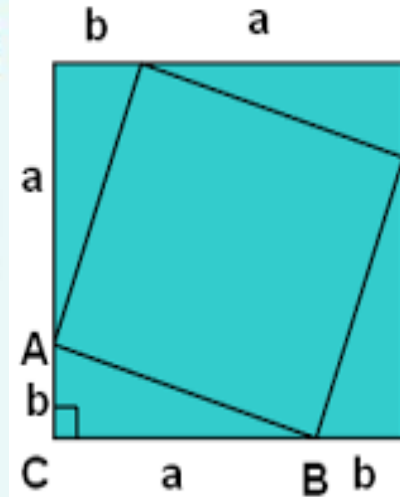
Пифагор



Теорема Пифагора



$$a^2 + b^2 = c^2$$



Дано:
 $\triangle ABC$, $\angle C = 90^\circ$,
Доказать:
 $a^2 + b^2 = c^2$.

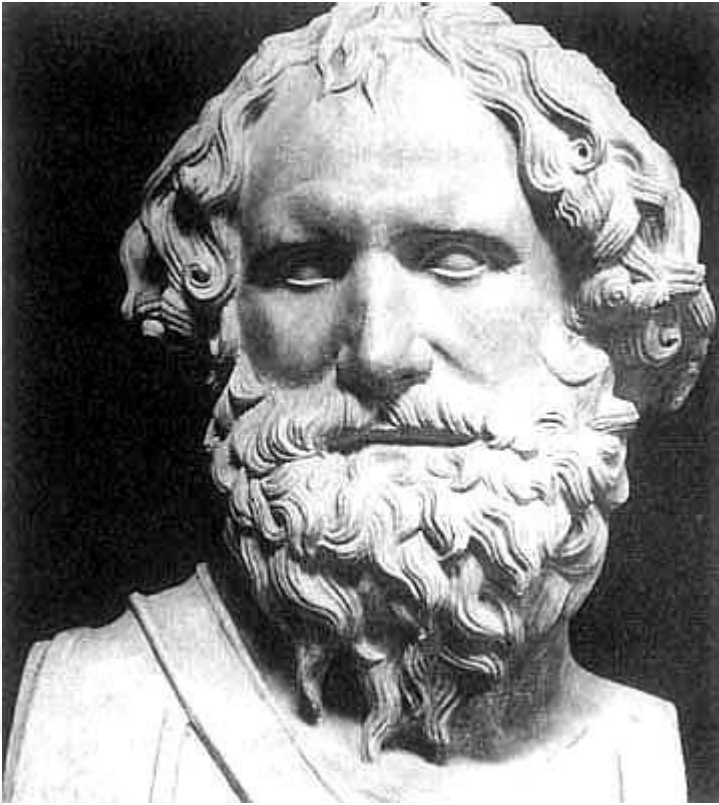
Доказательство:
 $S_{\text{кв.}} = (a + b)^2$,
 $S_{\text{кв.}} = c^2 + 2ab$,
 $a^2 + 2ab + b^2 = c^2 + 2ab$
 $c^2 = a^2 + b^2$

Евклид



Математика — это не гора формул, а
точность формулировок

Физика – наиболее продвинутая часть естествознания



Архимед:

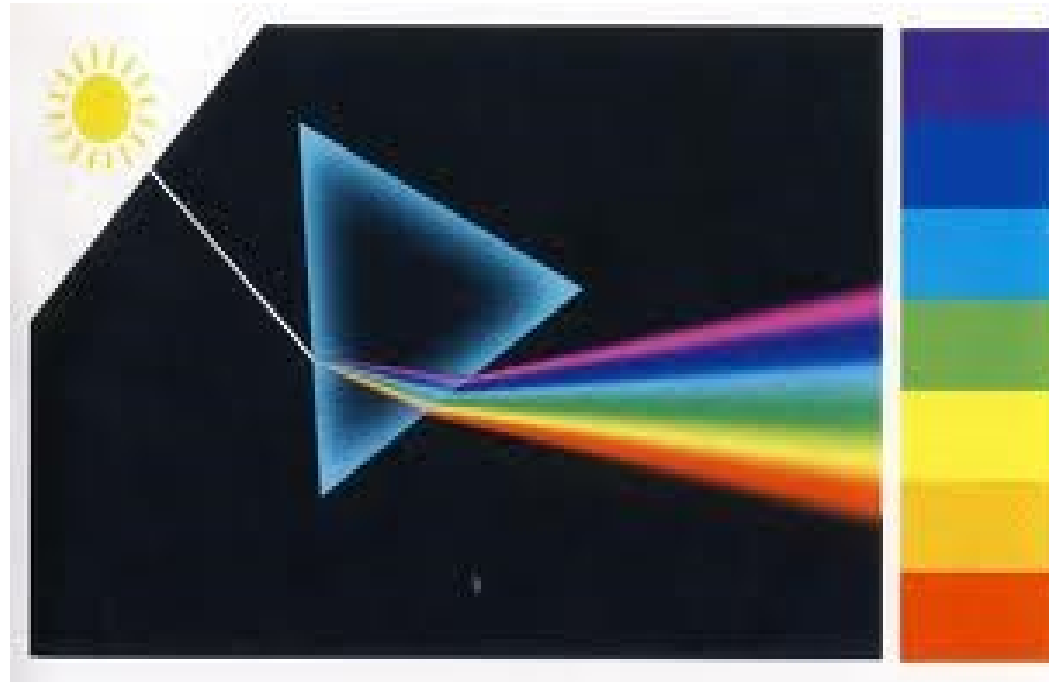
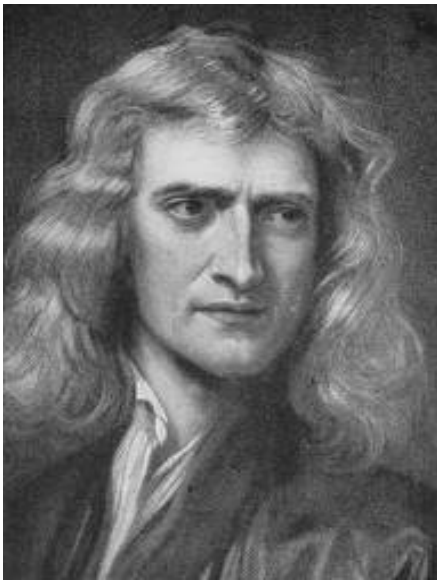
Бесконечно малые
величины, складываясь в
бесконечно больших
количествах, могут дать
любое число.

$$S_{\text{sphere}} = 4\pi R^2, \quad V_{\text{ball}} = \frac{4\pi R^3}{3}$$

ФОТОНЫ как корпускулы

- $df/dt = f'$, $F=am$
- The light consists of point wise particles

(I. Newton)



Принцип Мопертьюи

Вариация действия вдоль классической траектории должна быть нулевой:

$$\delta S[\gamma_{\text{class}}] / \delta \gamma_{\text{class}} = 0$$

$$S[\gamma] = \int (E_{\text{kin}} - E_{\text{pot}}) dt$$

$$\gamma: \mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$$

$$t_0 < t < t_1$$



Квантование – разбиение любой величины на части ненулевого размера - кванты

- Атомизм – квантование материи. Теплота есть количественная характеристика движений атомов вещества.

Полная энергия есть сумма динамической энергии цельного куска вещества и тепловой энергии всех его атомов.

Полная энергия не меняется во времени.

(М.В.Ломоносов)



Квантование – разбиение любой величины на части ненулевого размера - кванты

- Атомизм – квантование материи. Теплота есть количественная характеристика движений атомов вещества.

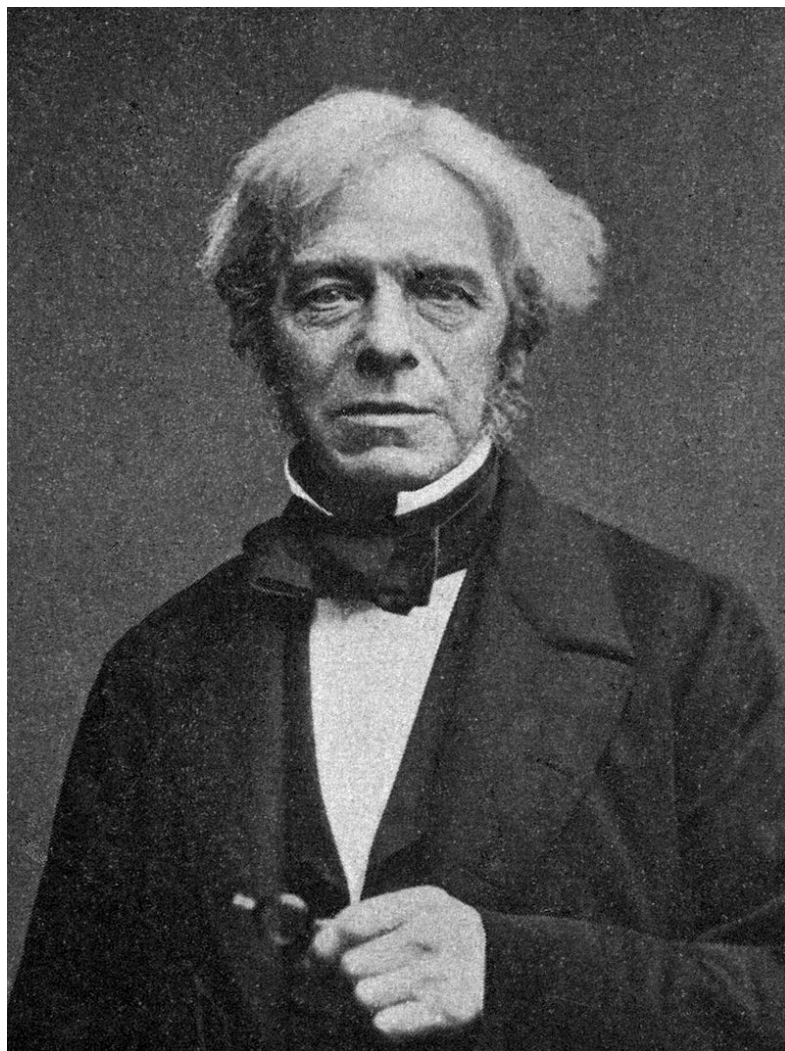
Полная энергия есть сумма динамической энергии цельного куска вещества и тепловой энергии всех его атомов.

Полная энергия не меняется во времени.

(М.В.Ломоносов)



Открытие Фарадея: электричество, магнетизм, свет — разные грани одного и того же



Математическая форма электромагнетизма — уравнения Максвелла

$$\operatorname{div} E = \rho$$

$$\nabla \times E = -\partial B / \partial t$$

$$\operatorname{div} B = 0$$

$$\nabla \times B = (j + \partial E / \partial t) / c^2$$

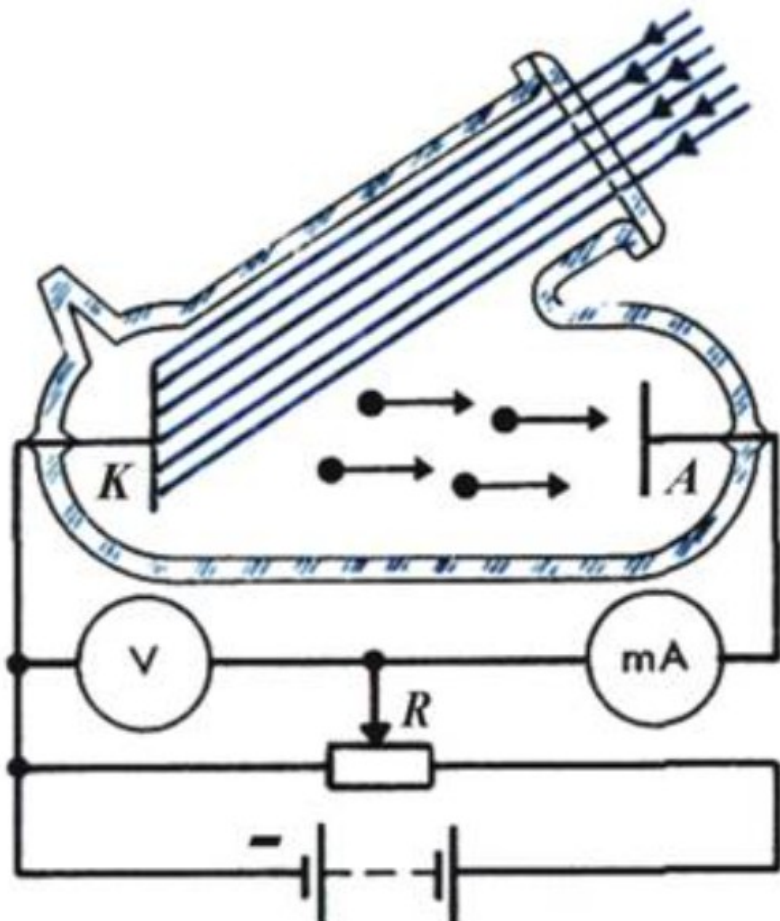
где

$$\nabla = (\partial E / \partial x, \partial E / \partial y, \partial E / \partial z)$$

$$\operatorname{div} = \partial E / \partial x + \partial E / \partial y + \partial E / \partial z$$

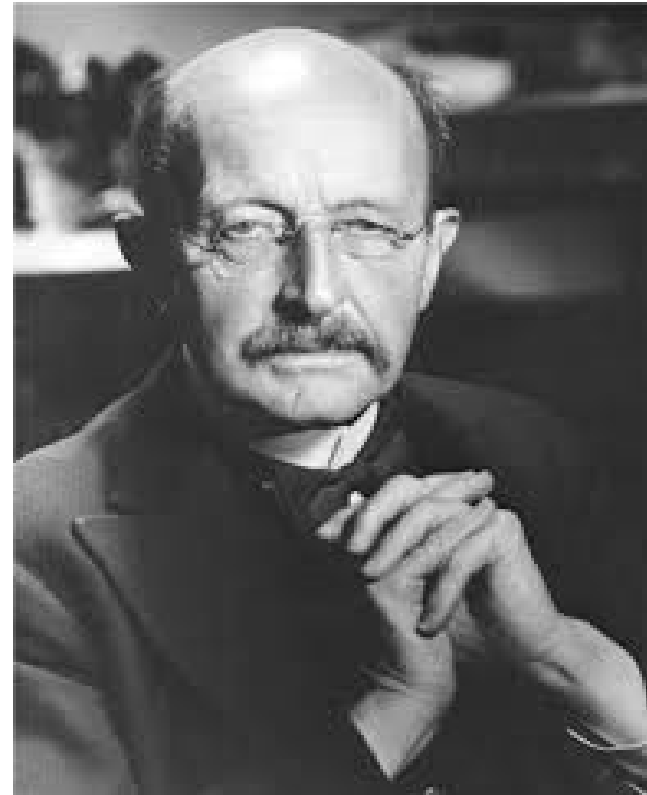


Фотоэффект Александра Столетова



Макс Планк: свет состоит из фотонов

*Энергия одного фотона
частоты ω равна $\hbar\omega$
где $\hbar \approx 10^{-27}$ эрг сек*



Фотон, поглощаемый атомом, выбивает из атома электрон

Альберт Эйнштейн:
Фотоэффект Столетова
Есть следствие
Квантования света:



Поглощение атомом фотона приводит к переходу
электрона на возбужденный уровень, при достаточной
энергии электрон вылетает за пределы атома

Что такое сложные процессы

- Если поведение системы n частиц можно так или иначе свести к поведению одной, отдельно взятой частицы, это – простая система. Пример: теория твердого тела, теория сплошных сред, теория конденсированного состояния.
- Сложная система – не проста. В динамике сложных систем главная роль принадлежит понятию информации, то есть связи с человеком.
- Функции сложной системы всегда связаны со случайностью.
- Сложный процесс – индивидуален.

Сложные процессы

Сложный процесс в точности непредсказуем: сама наша жизнь — такой процесс

Можно описывать его только сравнивая с другими — аналогичными процессами

Сложные процессы невозможно описать в терминах классической физики; для них нужна квантовая механика.

На каком расстоянии кончается классическая физика? На одном ангстреме!

1 миллиметр

делим на 1000:

1 микрон



делим на 1000:

1 нанометр



- 1 ангстрем, атом водорода

Нильс Бор: электрон в атоме водорода имеет стационарные состояния, в которых он НЕ ПАДАЕТ НА ЯДРО

Энергии этих состояний
расположены по формуле

Бальмера:

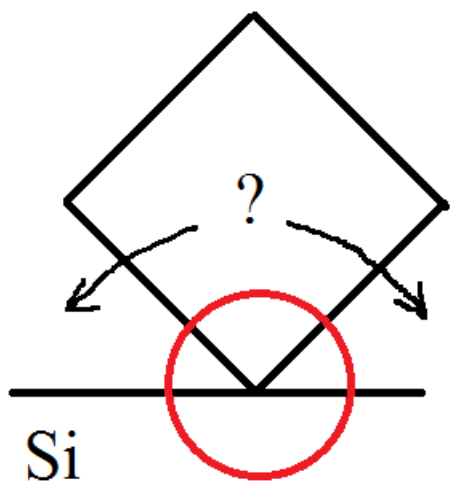
$$E_n \sim 1 - 1/n^2$$

-это установлено

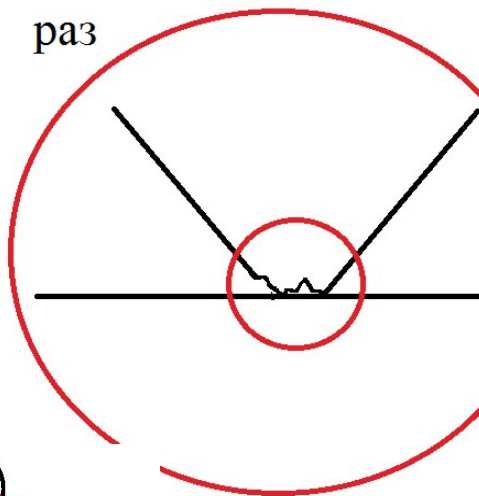
экспериментально



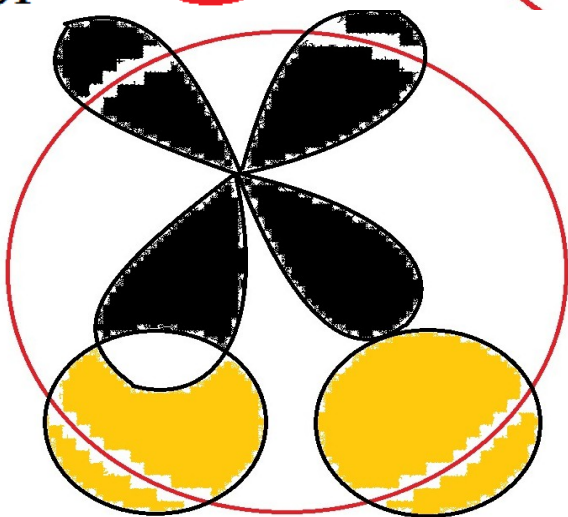
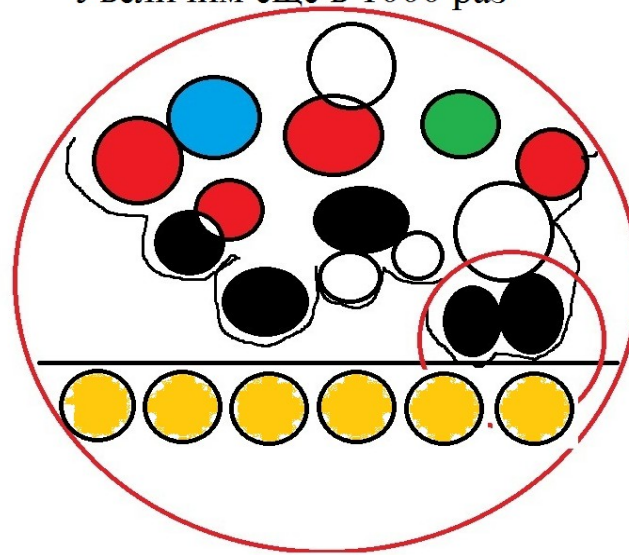
Микроскопическая природа случайности



Увеличим в 1000 раз
раз



Увеличим еще в 1000 раз



Квантовая механика – наиболее законченная часть естествознания

- Что входит в ее пределы:

ВСЯ классическая физика,

микроэлектроника, химия, оптика, материаловедение,

потенциально:

биология, экономика, политика -

Но это требует коренной перестройки самой квантовой теории

- Что пока лежит за ее пределами:

гравитация, ядерная физика

Предсказания квантовой теории — только вероятностные

Макс Борн:

Квадрат модуля

ψ — функции

есть вероятность

соответствующего

события



Квантовая парадигма

Квантовая теория НЕ описывает одной системы, а только огромное число одинаково приготовленных систем.

Например, атом водорода H — потому что таких атомов триллионы триллионов.

Например, молекула аммиака NH_3 — потому что таких молекул — миллиарды миллиардов.

Квантовая теория фактически описывает *фабрику приготовления* одинаковых систем.

Квантовая парадигма

Квантовая теория, примененная формально к одной конкретной системе, дает лишь вероятности наблюдения этой системы в том или ином состоянии через малый промежуток времени dt .

Например, позиция электрона в релаксированном состоянии атома водорода координата электрона будет иметь плотность вероятности по радиусу

$A \exp(-a R)$ (a, A — константы, R — расстояние от электрона до ядра).

Например, плотность вероятности обнаружения атома, имеющего точное значение скорости v одинакова во всем пространстве.

Квантовая парадигма

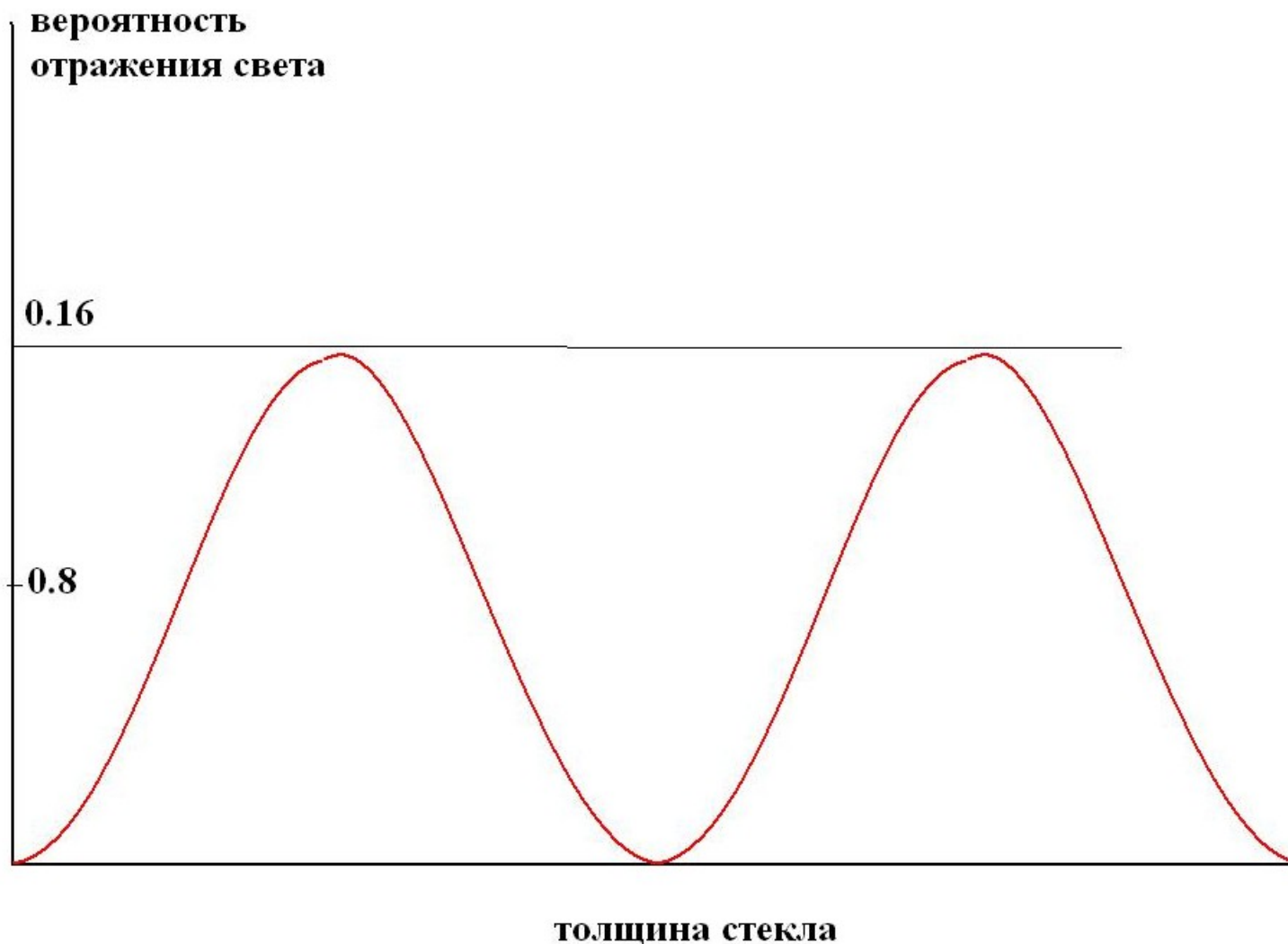
Квантовое описание любой системы состоит в том, что у этой системы есть очень много одинаковых копий, и у каждой копии — своя особенная траектория.

Причем траектории бывают ЛЮБЫЕ!

В этом — принципиальный плюрализм квантовой механики, который ставит жесткое ограничение на наше знание о микромире.

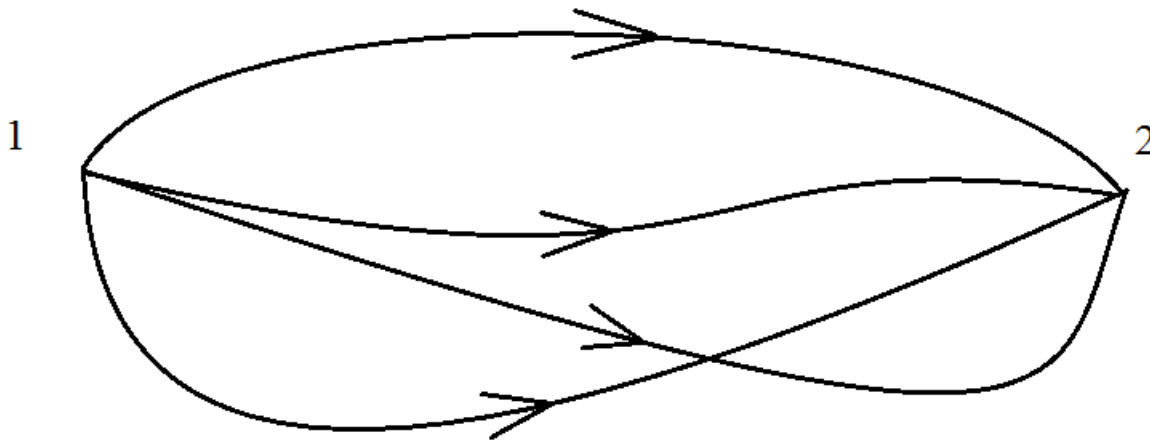
Прохождение света через вещество

- Парадоксальное поведение света: степень его отражения меняется периодически в зависимости от толщины стекла!



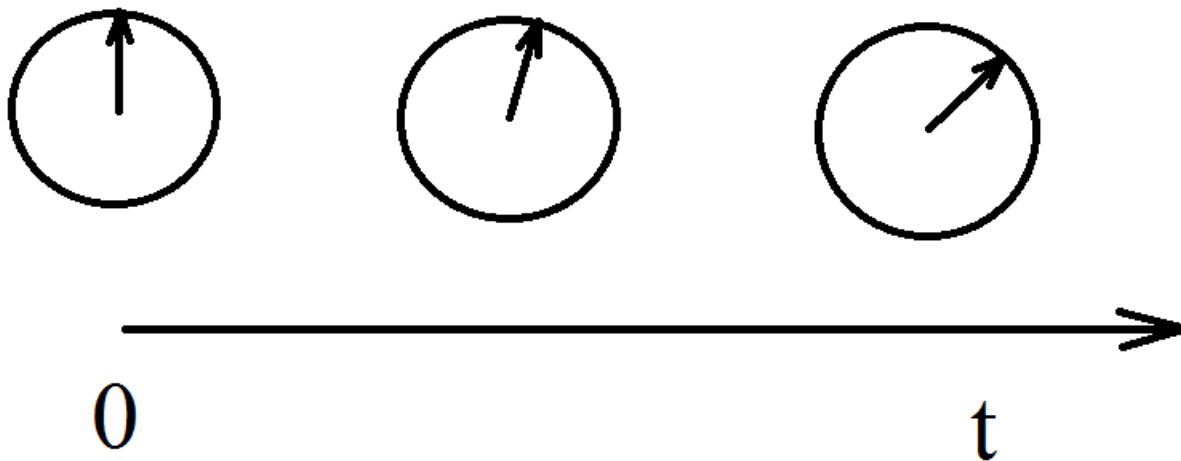
Один фотон: волна или частица?

- Фотон перемещается по многим траекториям одновременно!
- Один фотон = рой воображаемых точечных частиц. Каждая из них имеет свою собственную траекторию.

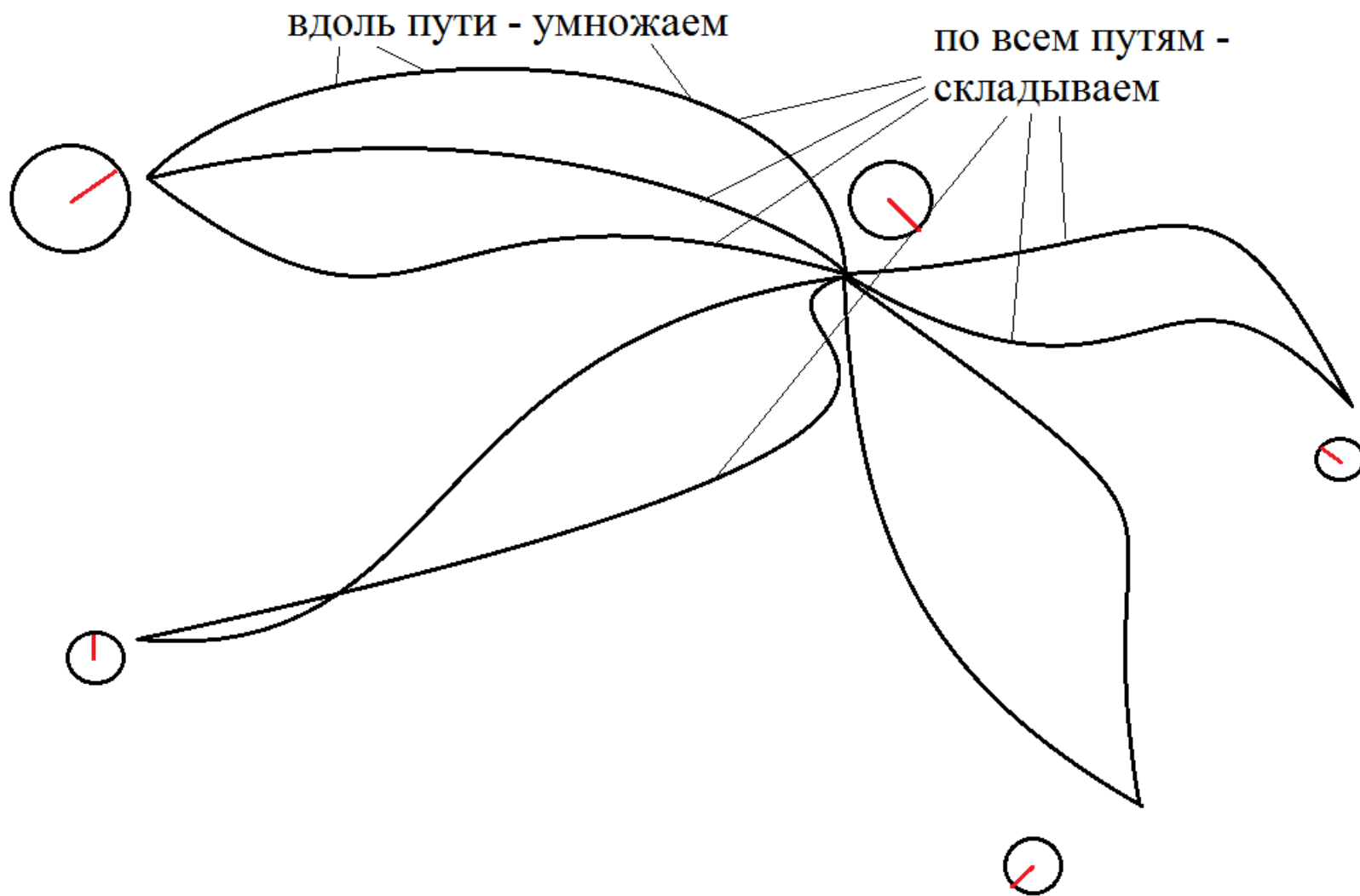


У каждого экземпляра фотона есть свои часы со стрелкой

- Стрелка поворачивается на определенный угол $d\phi$ после прохождения определенного пути ds



Принцип интерференции амплитуд



Квантовая механика — линейная теория

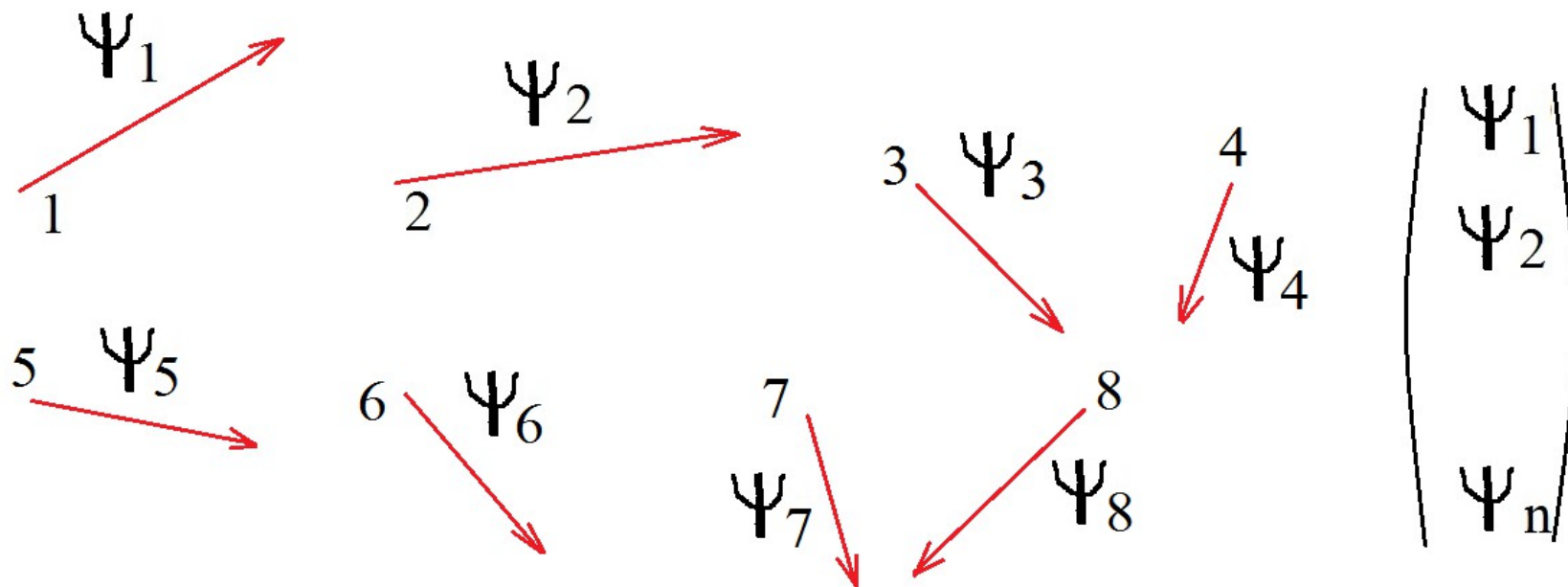


Давид Гильберт



Вернер Гейзенберг

**Состояние роя - столбец амплитуд.
Столбцы можно складывать почленно –
получится снова физически возможное
состояние**



Великий закон Природы в матричной форме

u_{ij} амплитуда перехода из j в i

положение
стрелки в клетке 1
в момент t

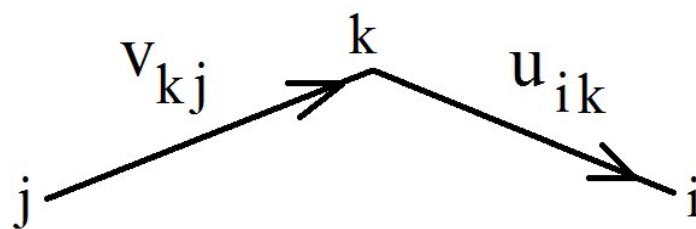
$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ u_{21} & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ & & \dots & \\ u_{n1} & u_{n2} & \dots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1(0) \\ \Psi_2(0) \\ \\ \Psi_n(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1(t) \\ \Psi_2(t) \\ \\ \Psi_n(t) \end{pmatrix}$$

$$\Psi_1(t) = \Psi_1(0) u_{11} + \Psi_2(0) u_{12} + \dots + \Psi_n(0) u_{1n}$$

Принцип интерференции в матричной форме

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ u_{21} & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{n1} & u_{n2} & \dots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{n1} & v_{n2} & \dots & v_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{n1} & w_{n2} & \dots & w_{nn} \end{pmatrix}$$

$$w_{ij} = \sum_k u_{ik} v_{kj}$$



Волна де Бройля

Частица с импульсом p

есть волна вида

$$\psi = c \exp(i/\hbar px - i/\hbar Et)$$



Принцип интерференции в непрерывной форме: уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle$$

Решение уравнения Шредингера:

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-iHt/\hbar) |\psi(0)\rangle$$

$H = E_{kin} + E_{pot}$ — оператор энергии.

Для одной частицы $E_{kin} = p^2/2m$, $p = -i\hbar \text{grad}$

$$\exp(A) = 1 + A + A^2/2! + A^3/3! + \dots$$



Принцип интерференции в непрерывной форме: интеграл Фейнмана по путям

$$|\psi(2)\rangle = \int K(2,1) |\psi(1)\rangle d1$$

$$K(2,1) = \int \exp(i S[\gamma] / \hbar) D\gamma$$

— интегрирование по всем путям γ , ведущим из 1 в 2.

Применив принцип Мопертьюи, получим классическое описание динамики при большом характерном действии

Действие вдоль пути γ :

$$S[\gamma] = \int L dt \text{ (вдоль } \gamma)$$

$$L = E_{kin} - E_{pot} \text{ — Лагранжиан системы.}$$

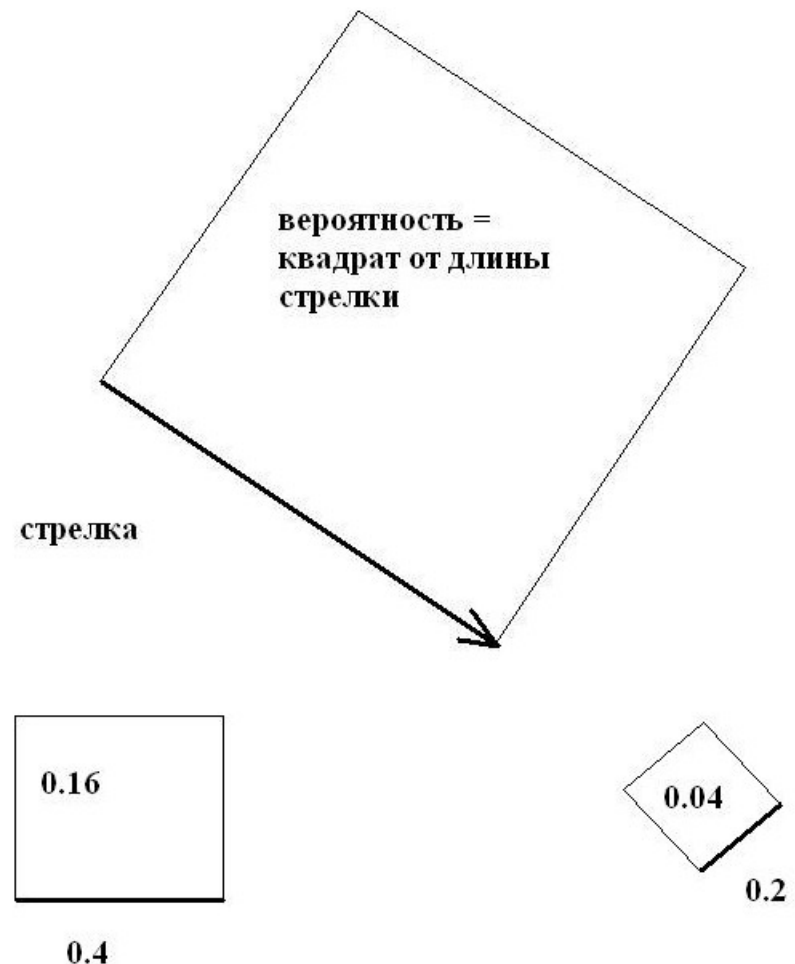
Мы можем вычислить только вероятности событий, но не предсказать конкретное!

- Пулям соответствуют стрелки
- Квадрат длины стрелки = вероятность

присутствия фотона

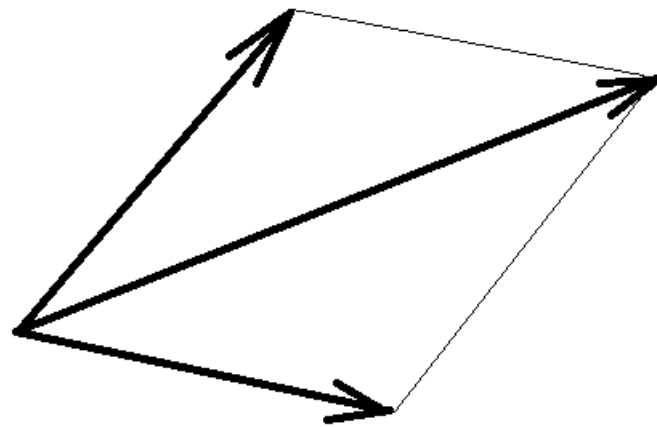
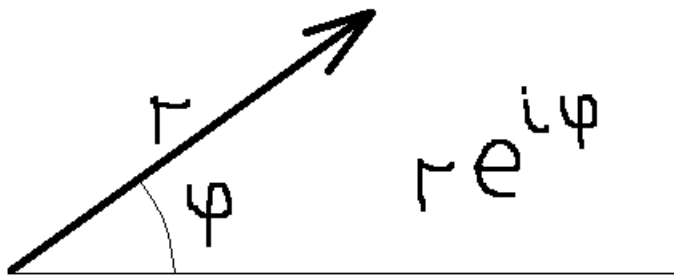
- Когда и как в точности происходит переход от стрелок к вероятностям, мы НЕ ЗНАЕМ

- Стрелки точно складываются, когда мы видим фотон



Стрелки как комплексные числа

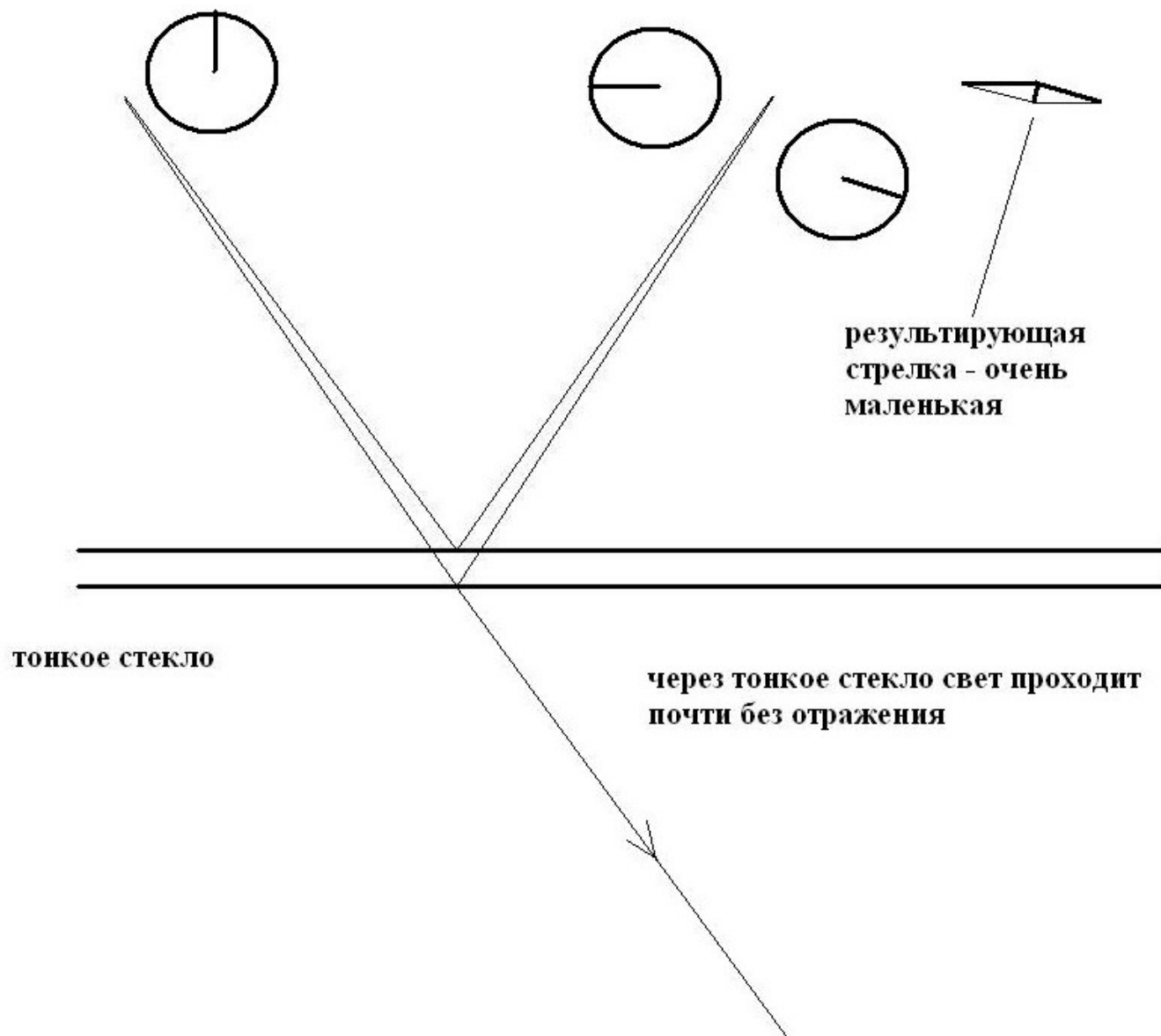
- Стрелка = комплексное число
- Поворот стрелки на угол φ и сжатие в r раз = умножение на комплексное число $r e^{i\varphi}$.
- Сложение стрелок = сложение комплексных чисел.
- Все алгебраические правила справедливы и для комплексных чисел (там нет только отношения порядка).



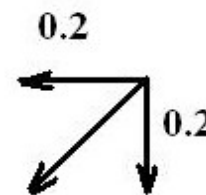
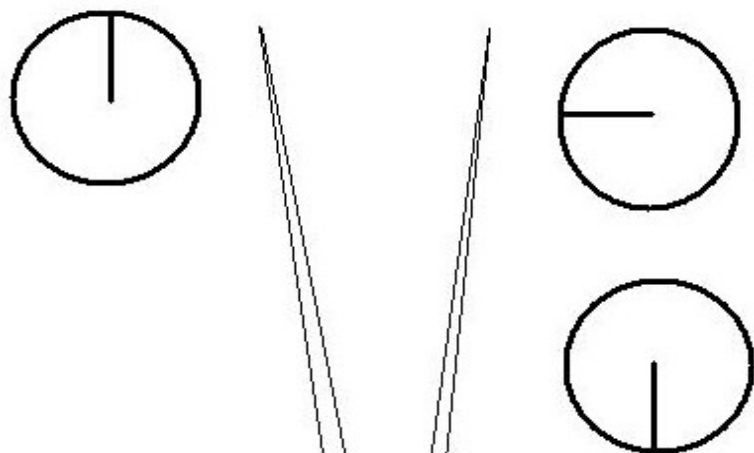
Стекло отражает часть света



Через тонкое стекло свет проходит почти без отражения



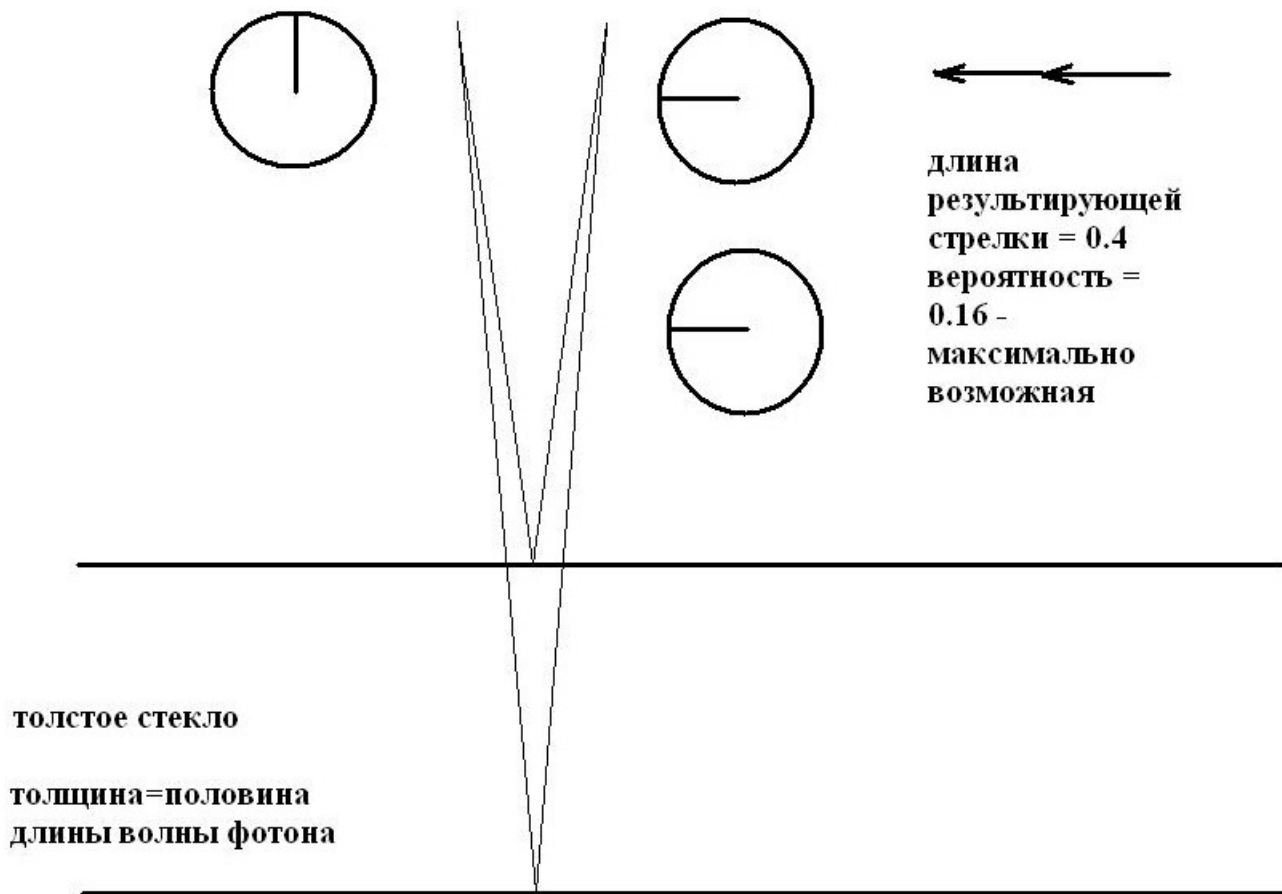
Стекло потолще – отражение растёт!



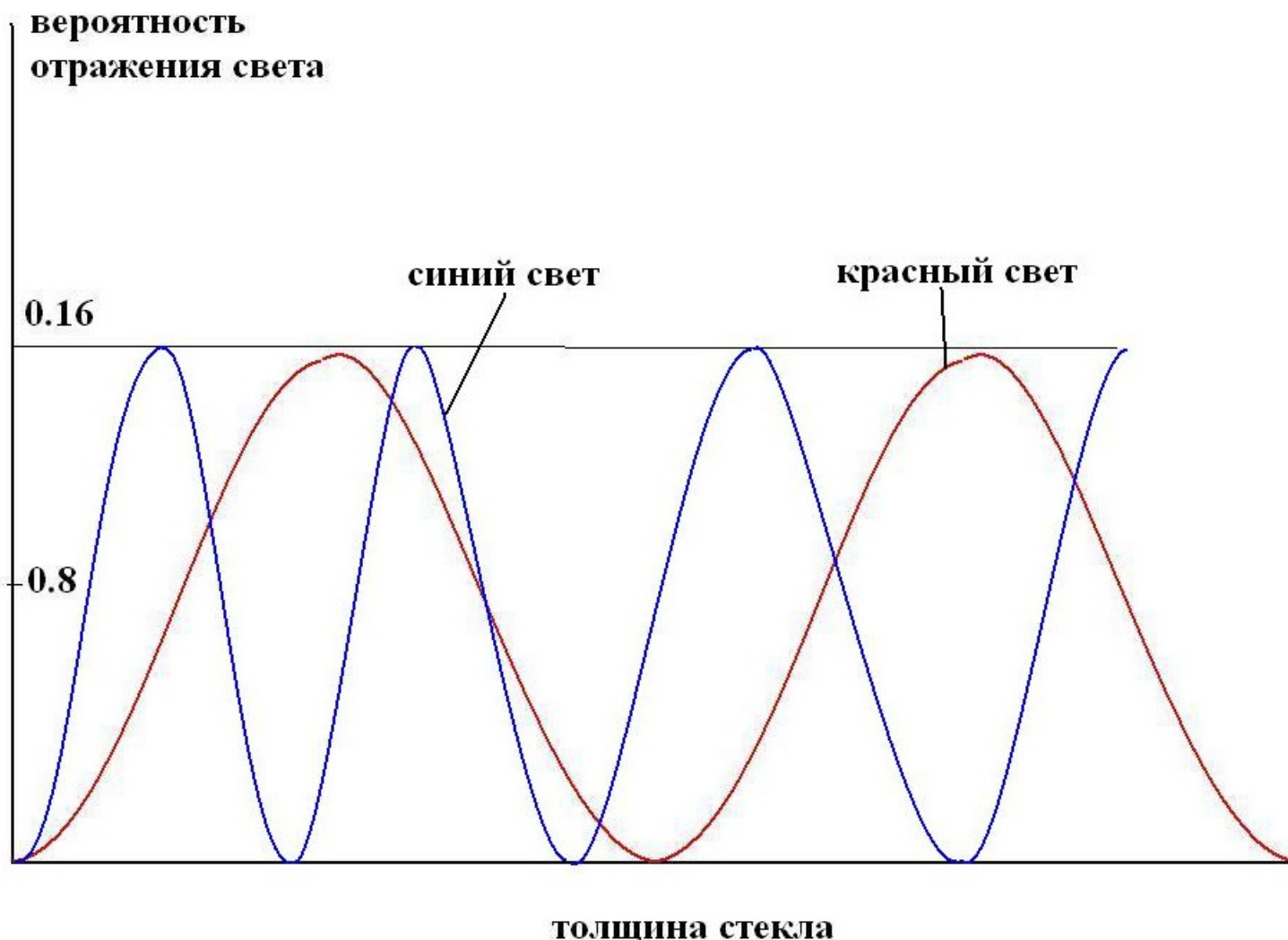
квадрат
результатирующей
стрелки = $0.04 + 0.04 = 0.08$

среднее стекло

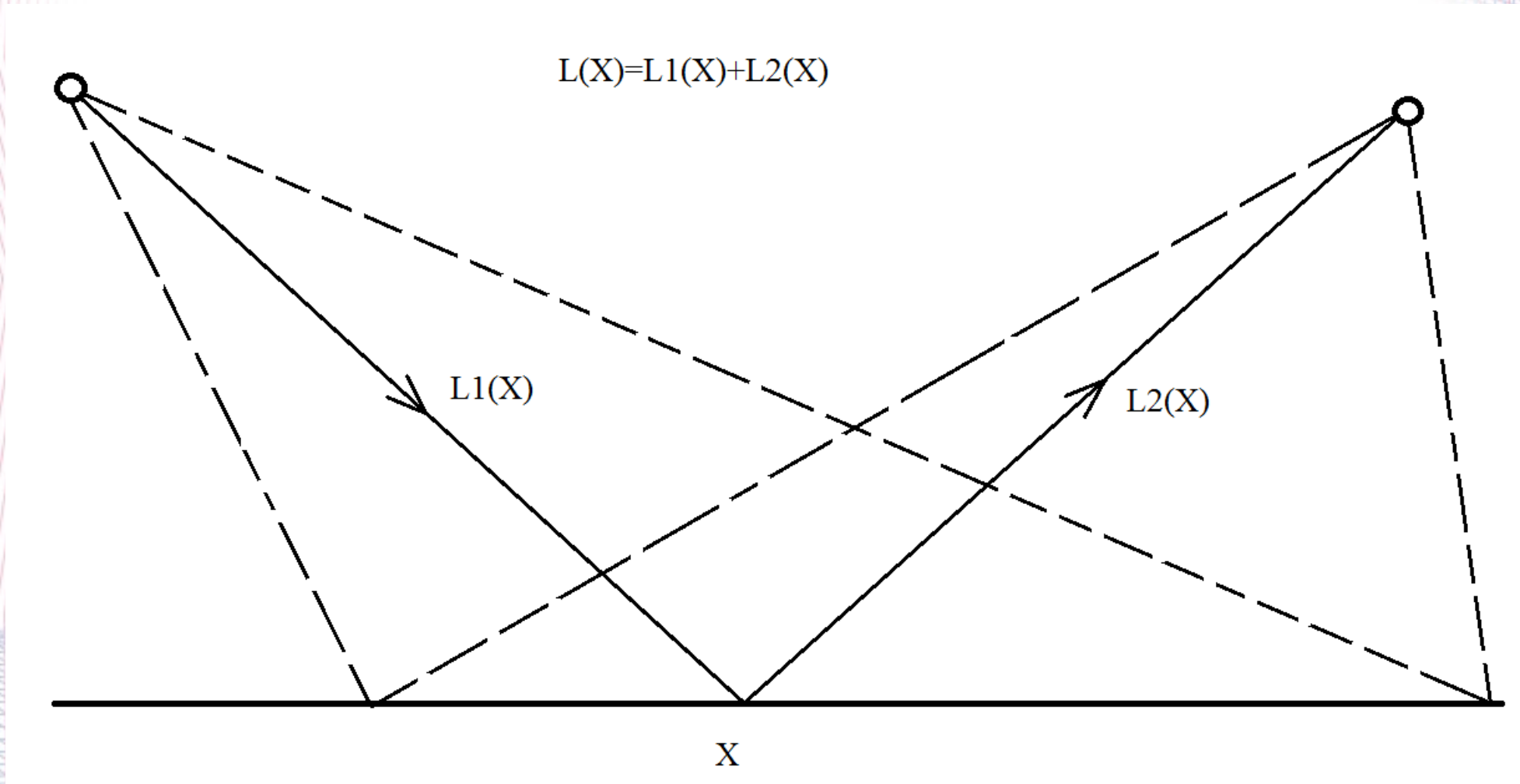
При толщине = одна четверть длины волны фотона отражение максимально



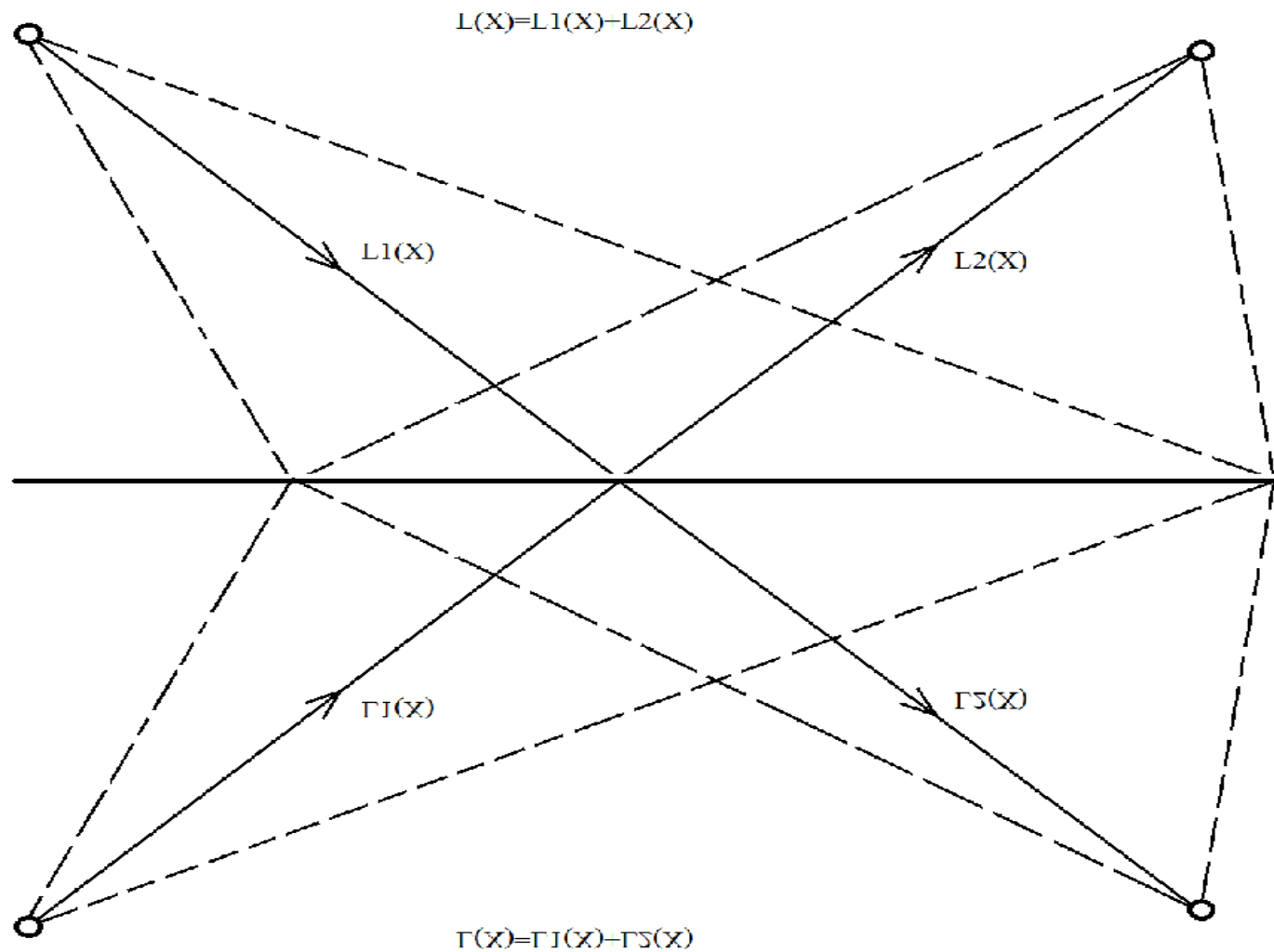
Зависимость вероятности отражения от толщины стекла



Почему угол падения равен углу отражения?

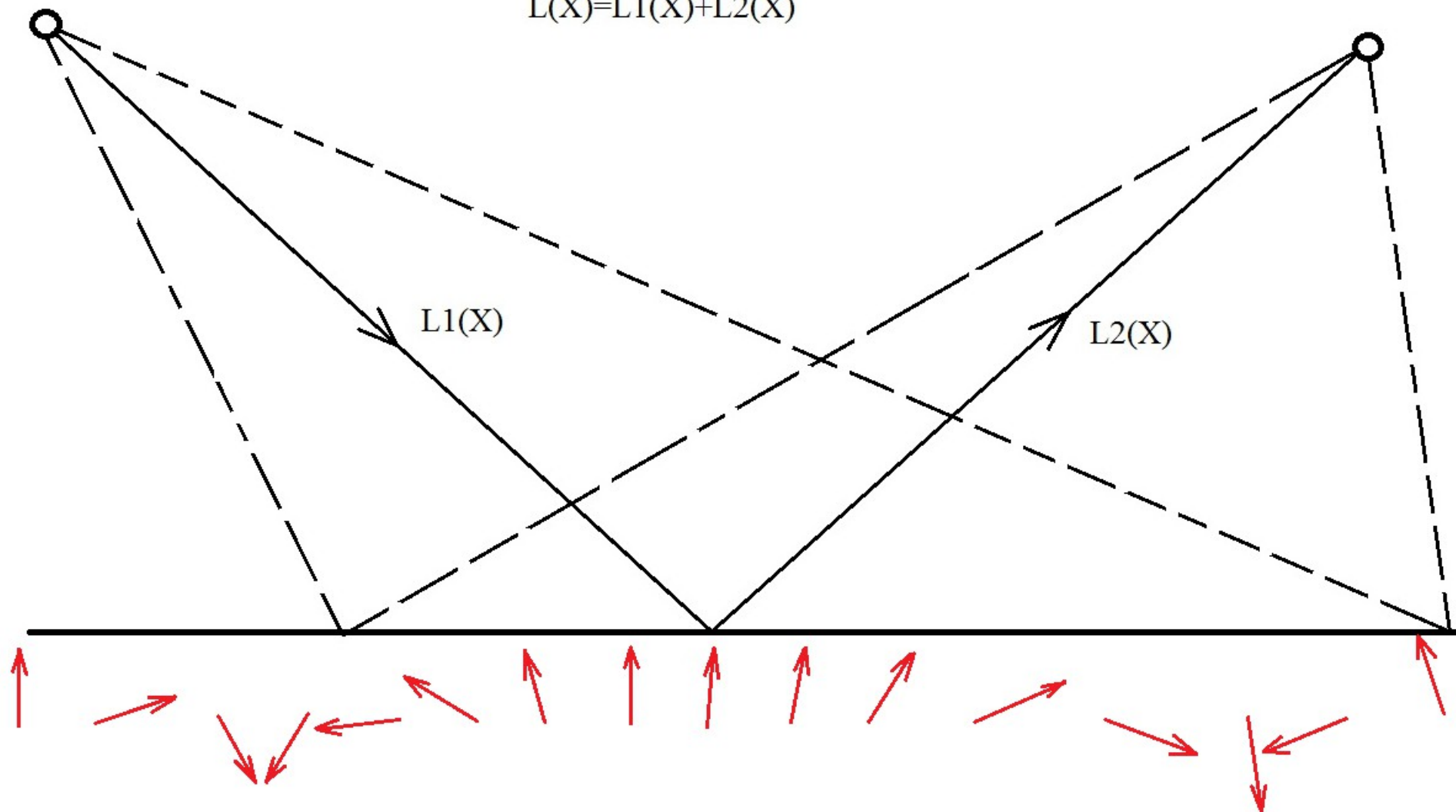


Канонический путь – кратчайший, но как свет об этом узнает?

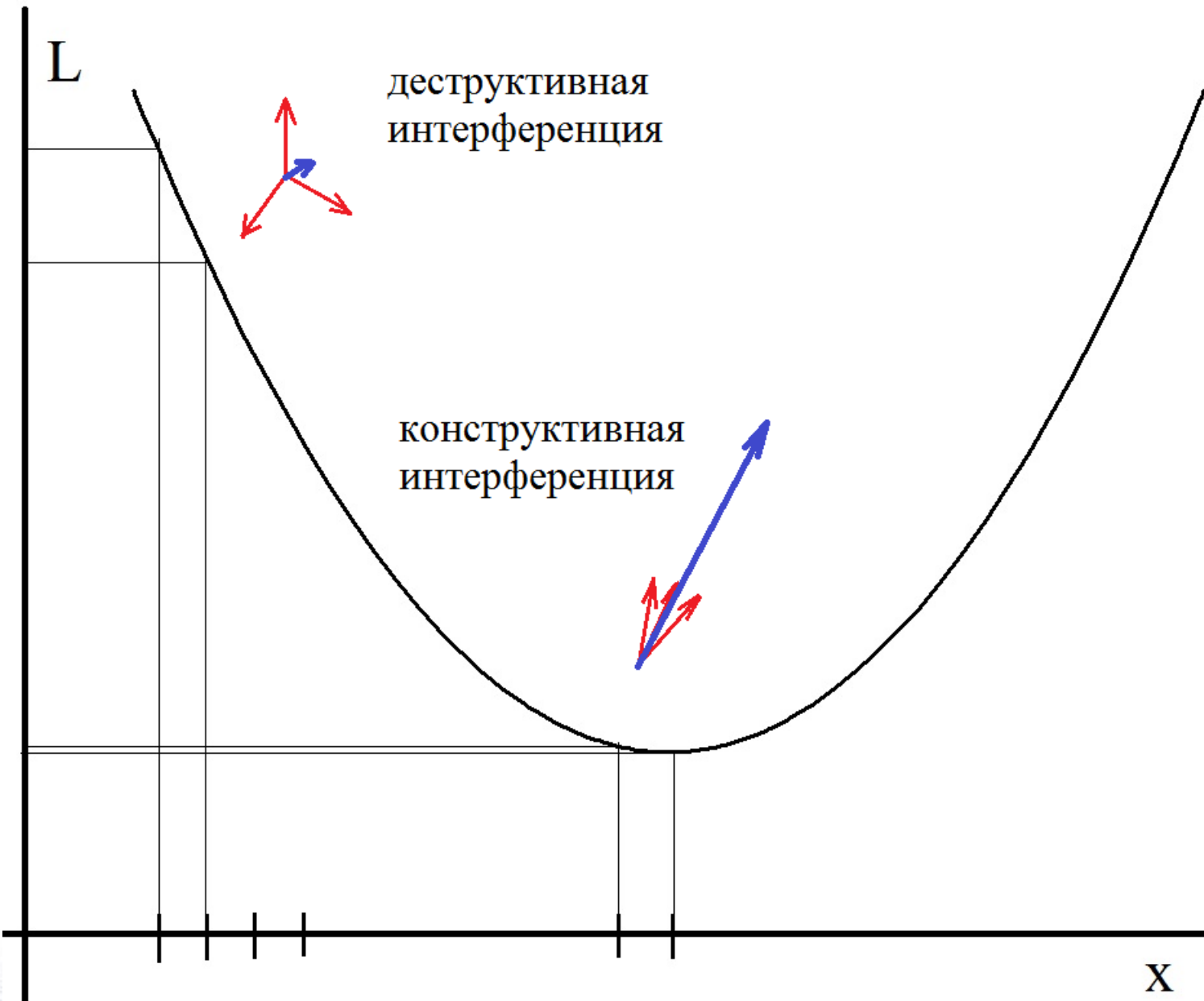


Как происходит отражение от разных частей зеркала?

$$L(X) = L1(X) + L2(X)$$

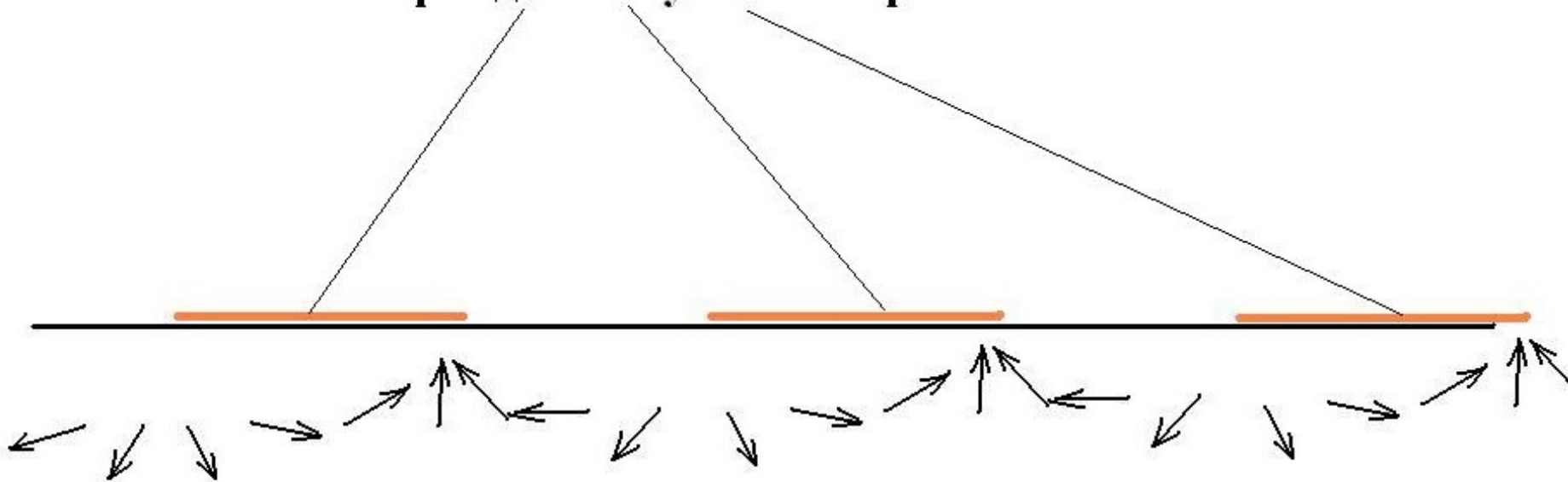


Разобьем рой на пучки



Можно добиться отражения от разных частей зеркала, процарапав его

поврежденные участки зеркала



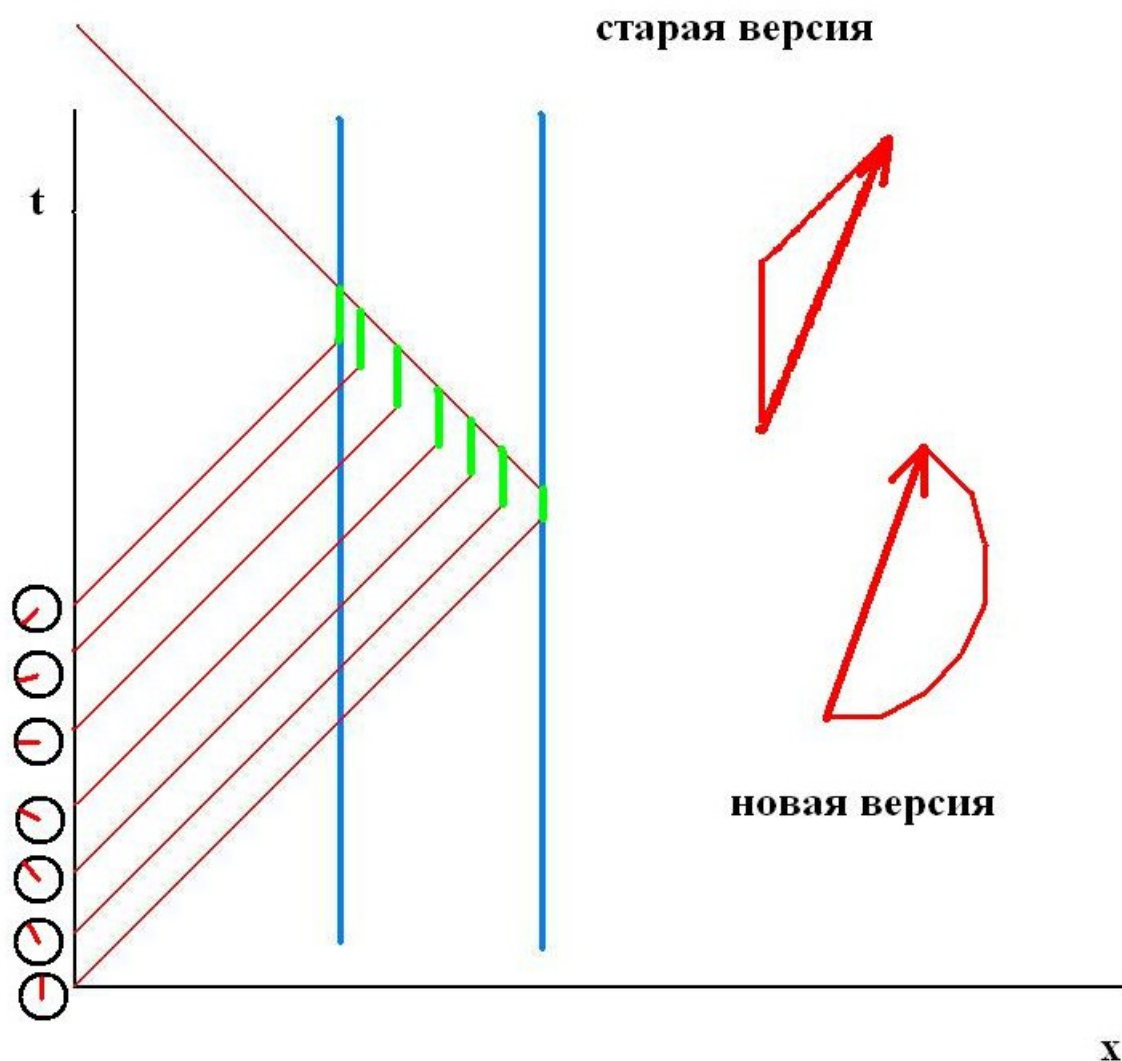
большая результирующая
стрелка



Монохроматический свет: длина волны фиксирована – время испускания из лазера неопределенное

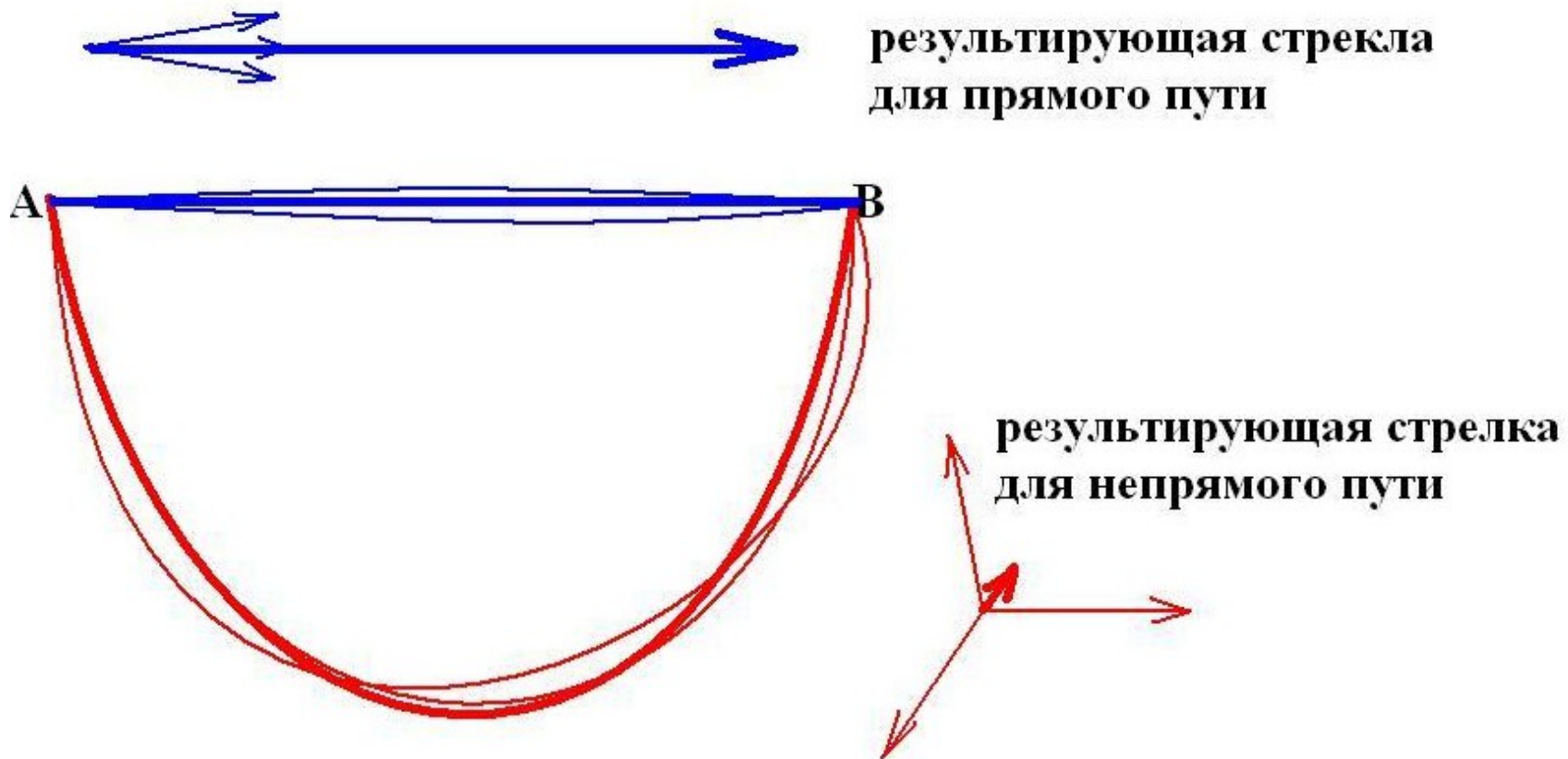
- Можно не вращать стрелку, а устанавливать ее фиксированное положение в зависимости от времени вылета фотона из источника: раньше вылет – большее время она показывает.
- Взаимодействие фотона с электронами стекла – поворот стрелки на 90 градусов.
- Эффект будет таким же, как и при старом методе, но мы избавляемся от искусственного приема: поворота стрелки на 180 градусов при отражении только от передней поверхности стекла.

Учет взаимодействия фотонов с электронами в стекле

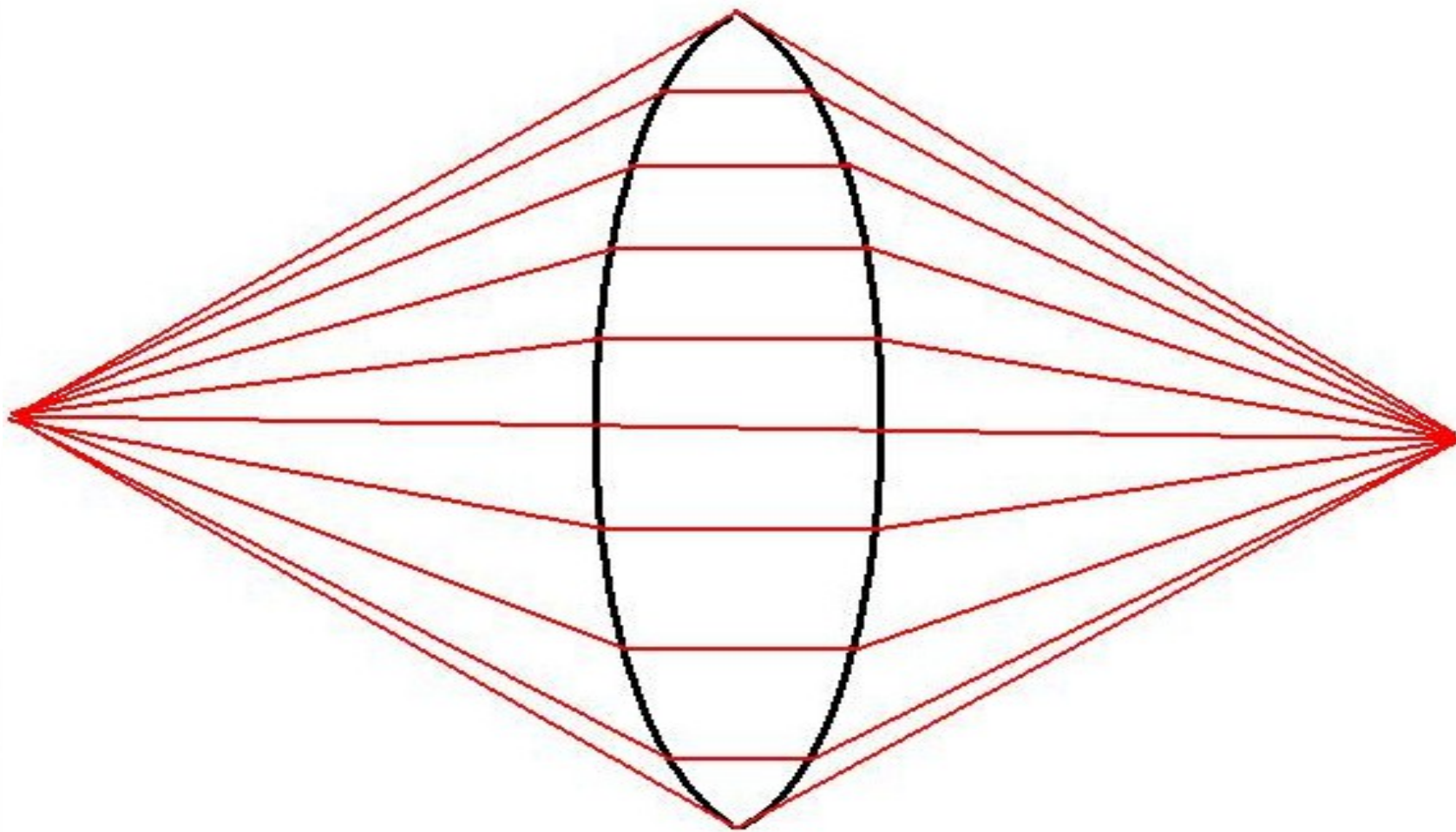


А почему фотон летит по прямой?

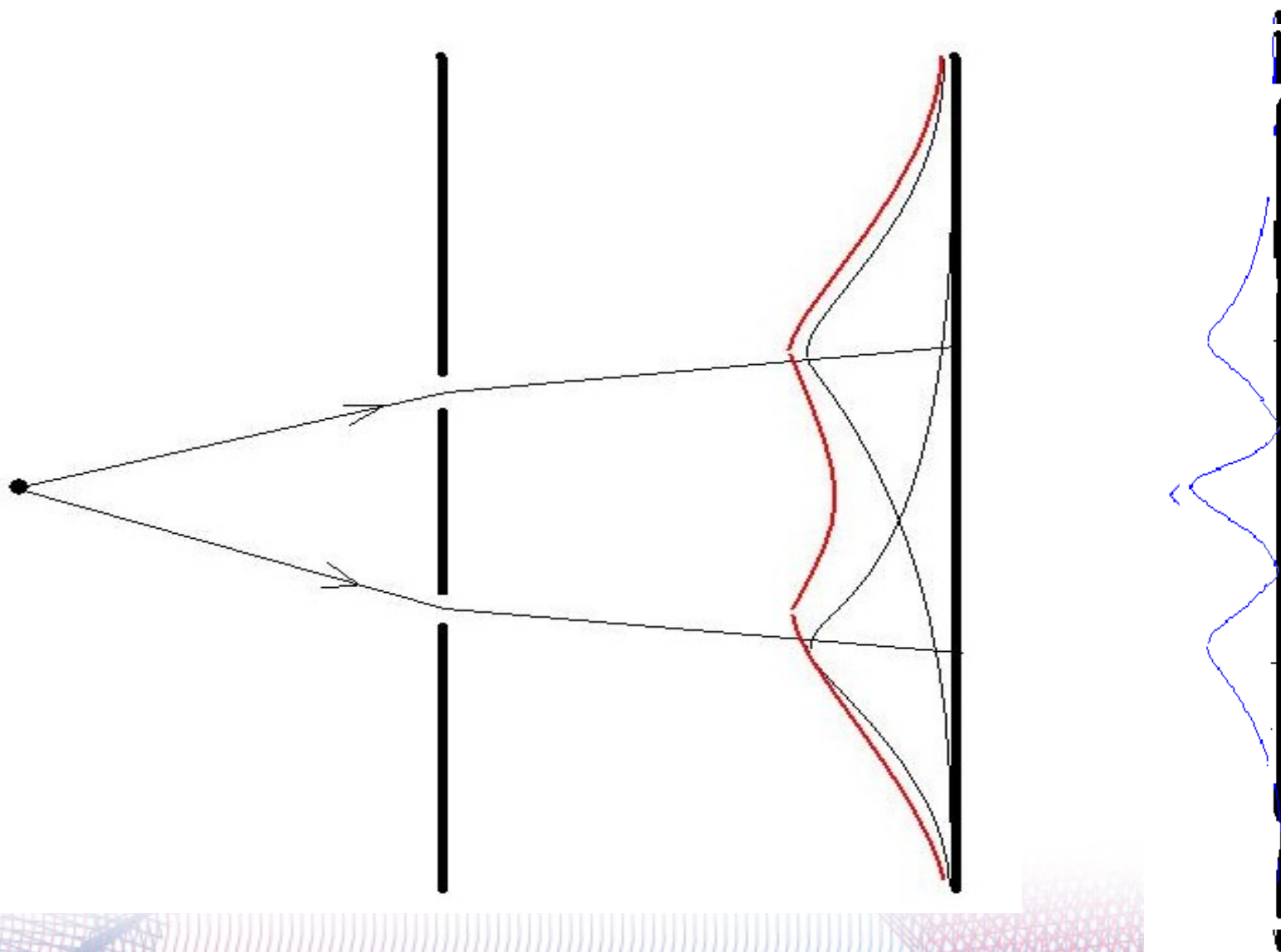
- Это – тоже следствие интерференции стрелок!



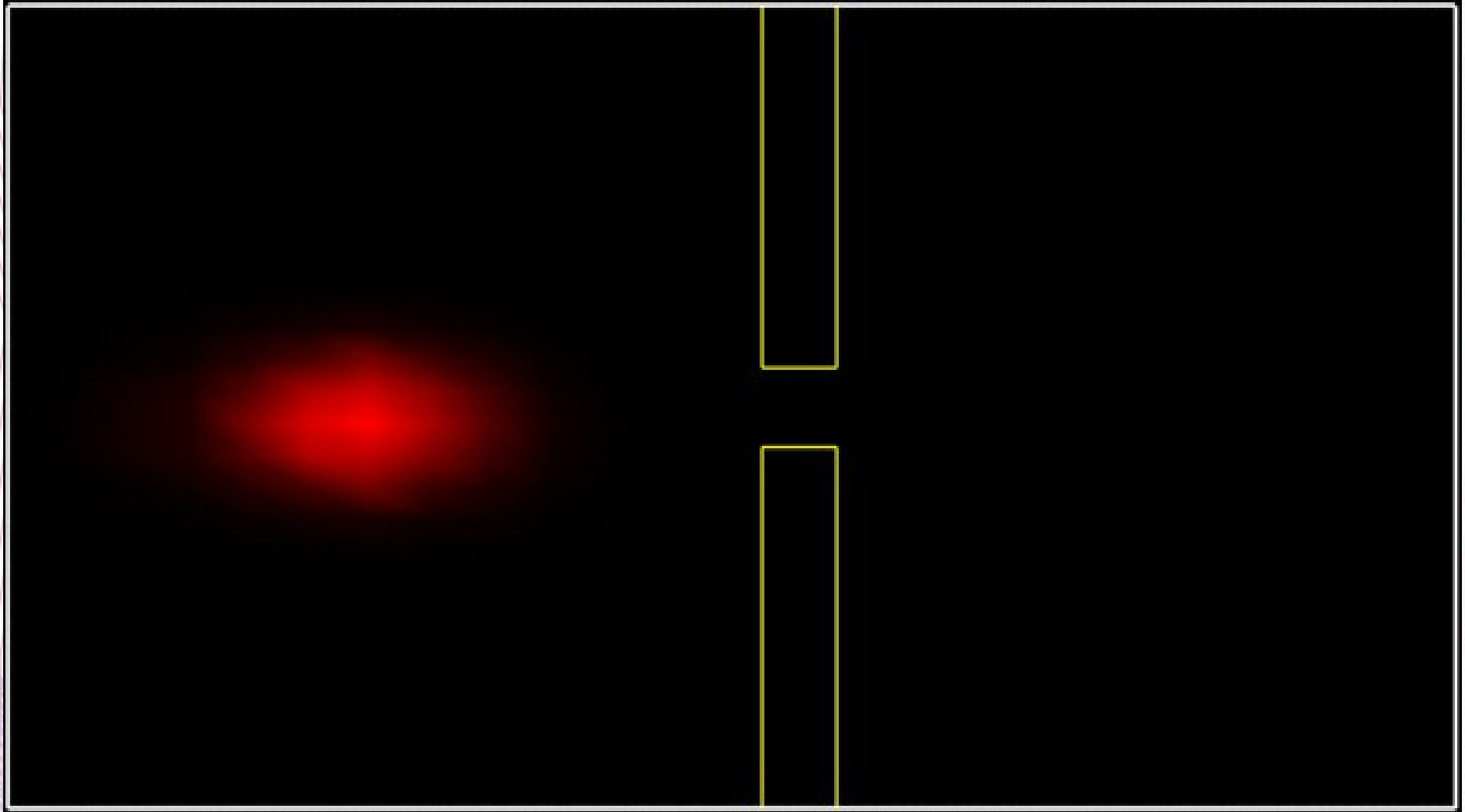
Можно ли 'обмануть' фотон?



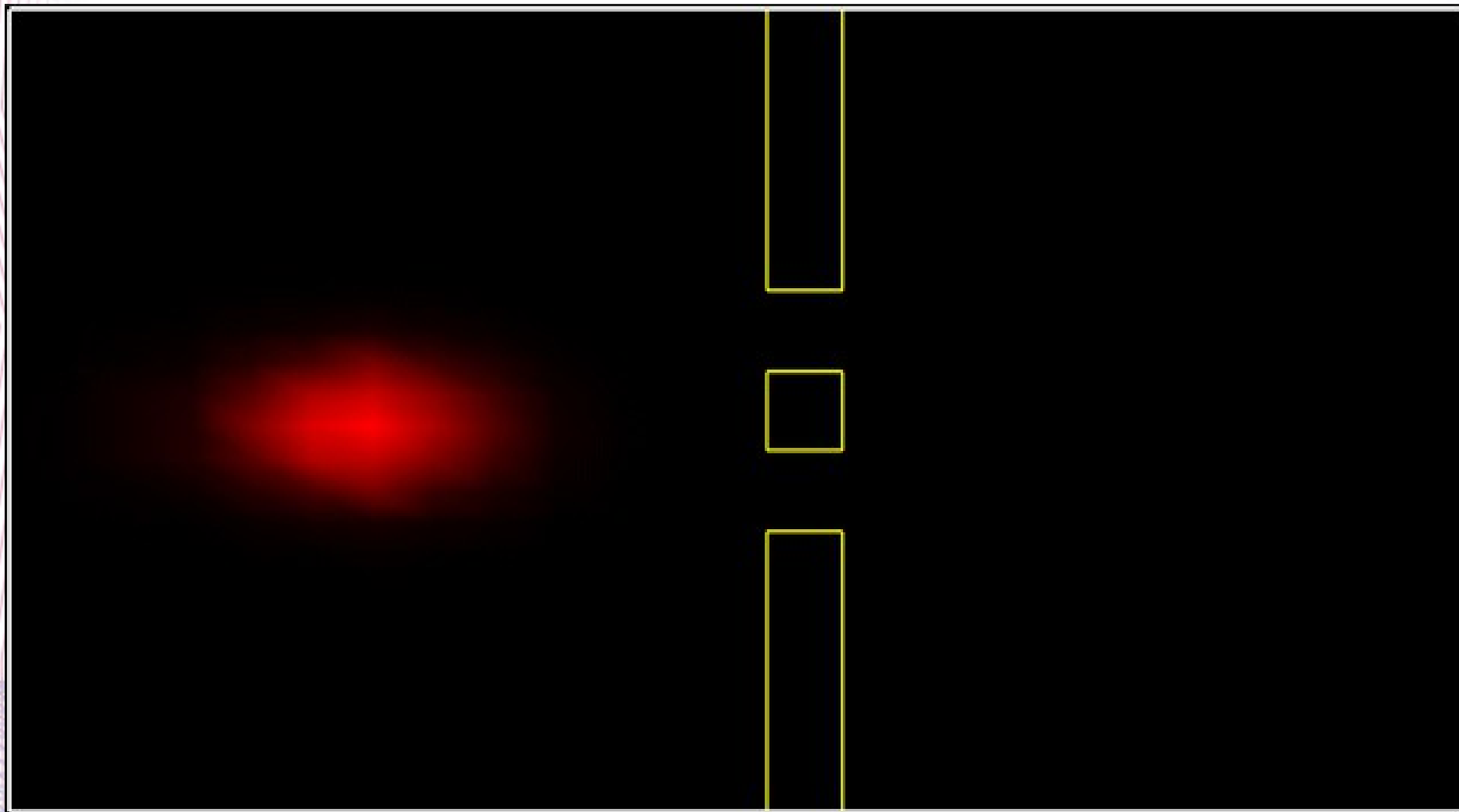
Прохождение частицы через 2 щели



Интерференция на одной щели (дифракция)

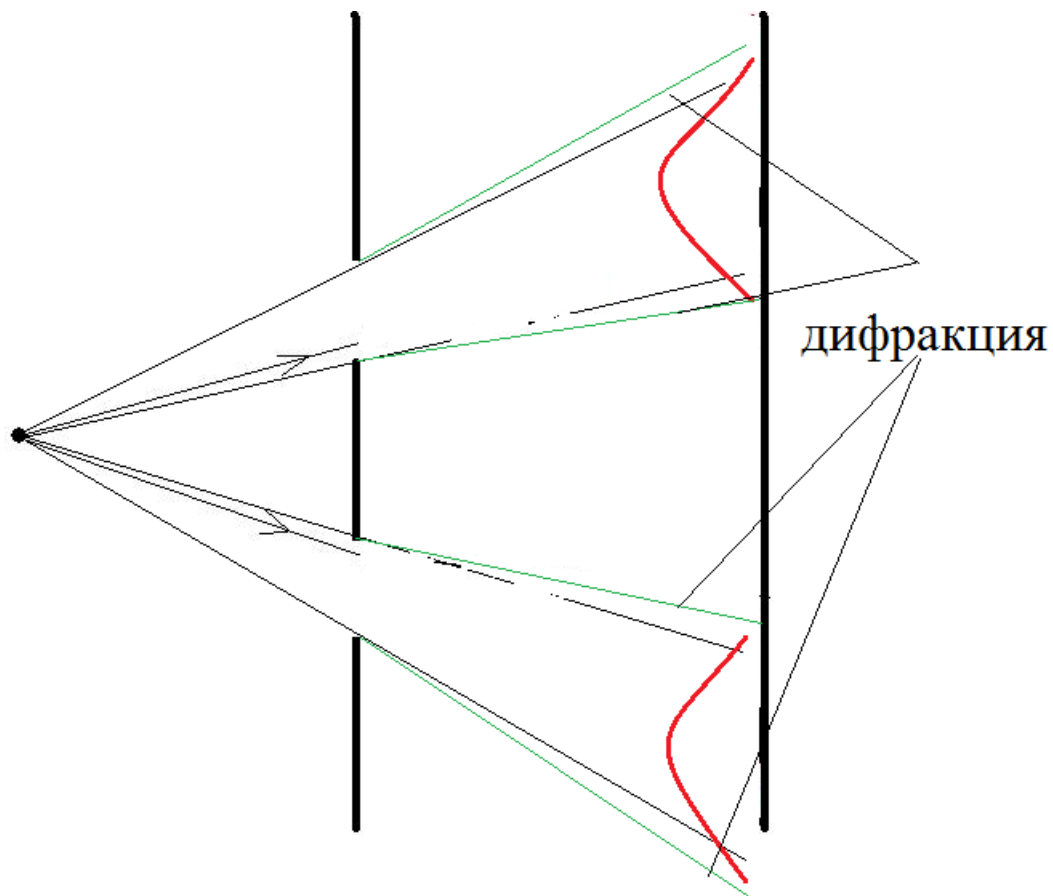


Интерференция на двух щелях



Зависимость от ширины щелей

- Щель широкая – интерференция мала



Зависимость от ширины щели



Квантовые соотношения неопределенностей

$$dx dp = \hbar \approx 10^{-27} \text{ эрг сек}$$

чем точнее известна координата, тем меньше мы знаем об импульсе (Бор, Гейзенберг).

- Аналогичное соотношение для энергии и времени:

$$dE dt = \hbar$$

чем точнее мы знаем частоту (энергию) фотона, вылетевшего из лазера, тем меньше мы знаем о том, когда он вылетит.

- Есть и другие соотношения неопределенностей

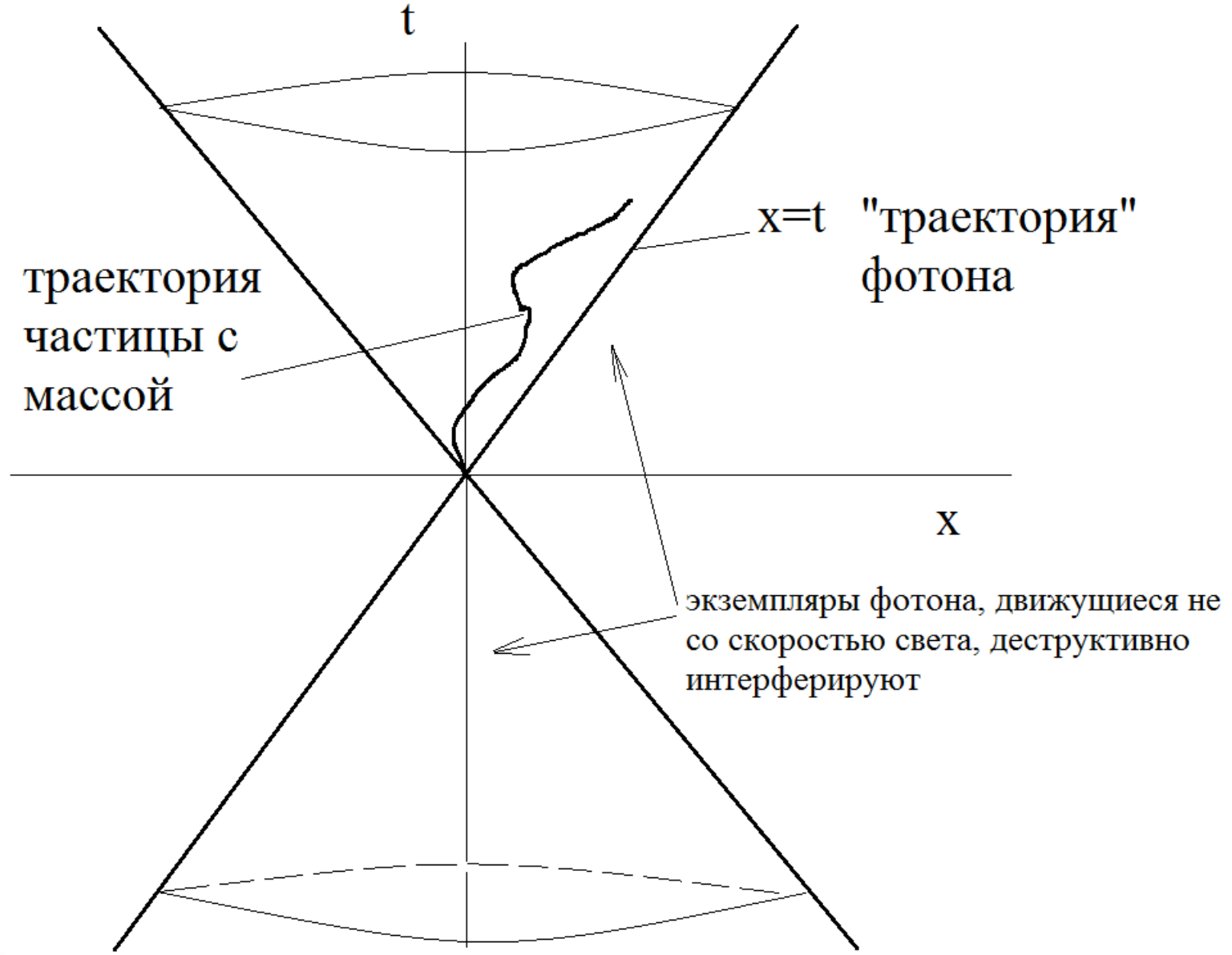
Дискретность мира

- Пространство и время не являются непрерывными; они дискретны.
- Зерно разрешения δx имеет физический смысл: от него зависят заряды (и массы!) элементарных частиц.
- Перенормировки – изменение заряда – в зависимости от δx могут быть сделаны корректно: на экспериментах это не скажется (теорема Боголюбова – Парасюка 1954 г)

Вероятностный характер квантовой теории

- У одной, отдельно взятой частицы **НЕТ НИКАКОЙ СТРЕЛКИ**.
- Стрелка (волновая функция) – это атрибут огромного числа одинаково приготовленных частиц
- Узнать стрелку можно только имея большое количество одинаковых реальных частиц, например, атомов водорода.

Световой конус



Переход фотона из точки в точку в пространстве-времени

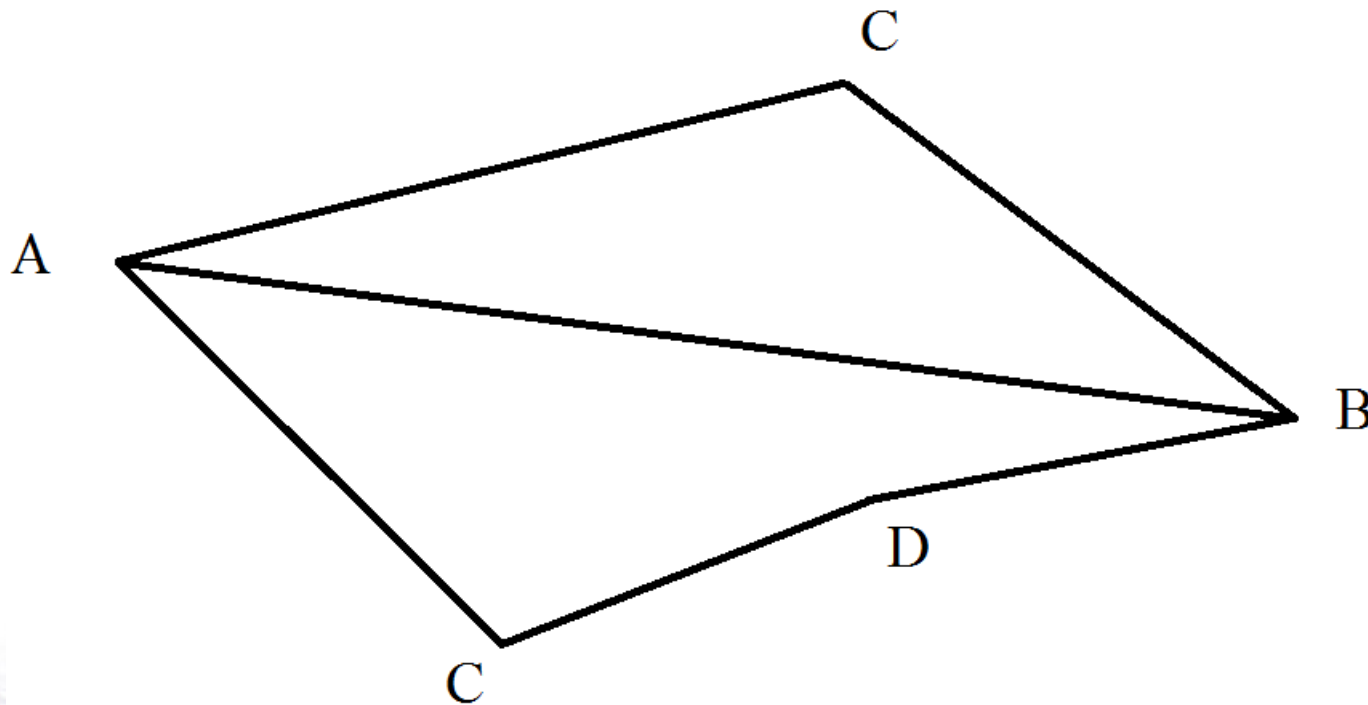
- $P(A \rightarrow B) = 1/I$, где
- $I = (x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2 + (z_A - z_B)^2 - (t_A - t_B)^2$ — квази-расстояние в пространстве-времени.

(скорость света $c=1$)

- $1/I$ обращается в бесконечность на поверхности светового конуса!
- Причина в том, что мы предполагаем пространство непрерывным.
- Надо ввести зерно разрешения dx по пространству, чтобы устранить особенность в нуле.
- Свет распространяется со скоростью света только на большие расстояния; на малых дистанциях он может иметь иные скорости.

Амплитуда перехода электрона

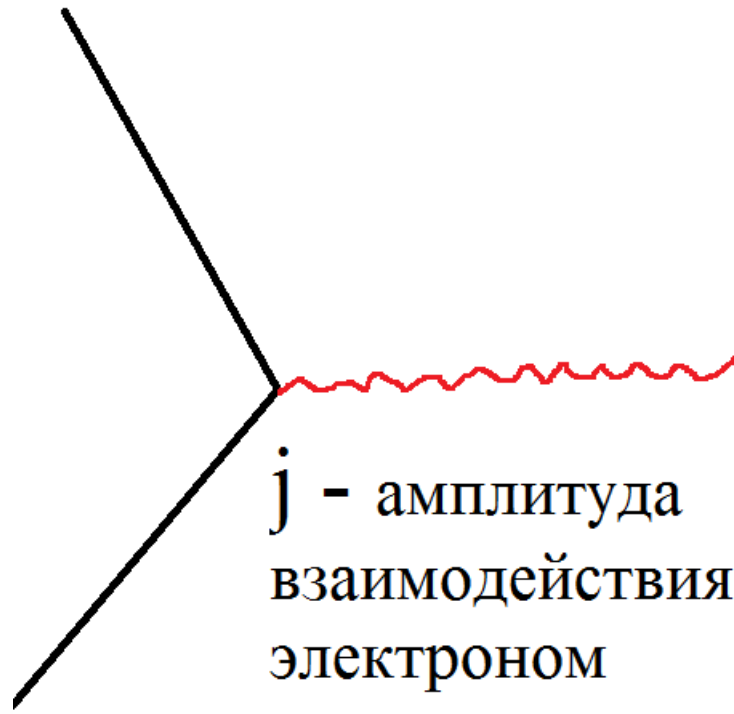
- $E(A \rightarrow B) = P(A \rightarrow B) + \sum_C P(A \rightarrow C)v^2P(C \rightarrow B) + \sum_{C,D} P(A \rightarrow C)v^2P(C \rightarrow D)v^2P(D \rightarrow B) + \dots$



Взаимодействие электрона с фотоном

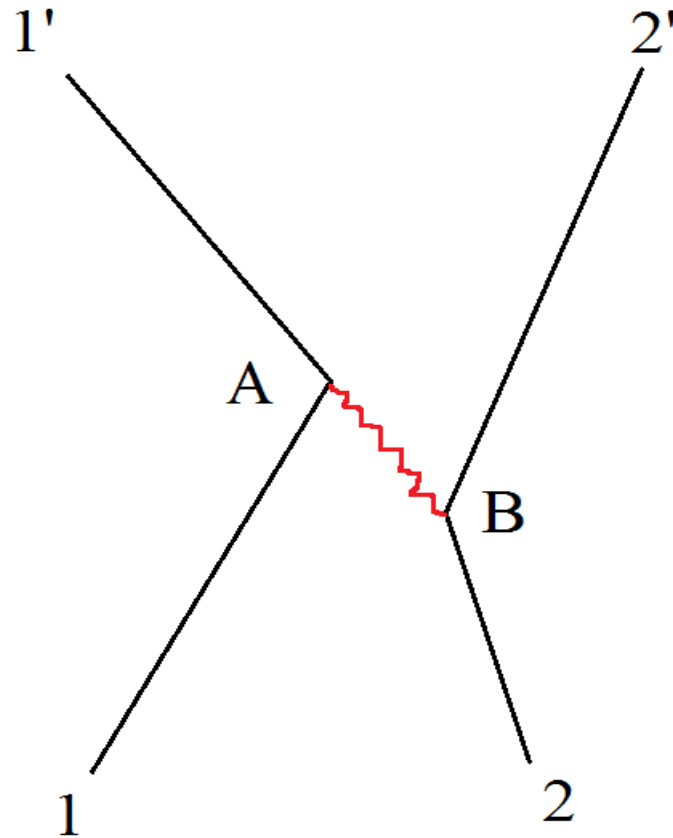
ν – масса “голого” электрона

j – заряд “голого” электрона



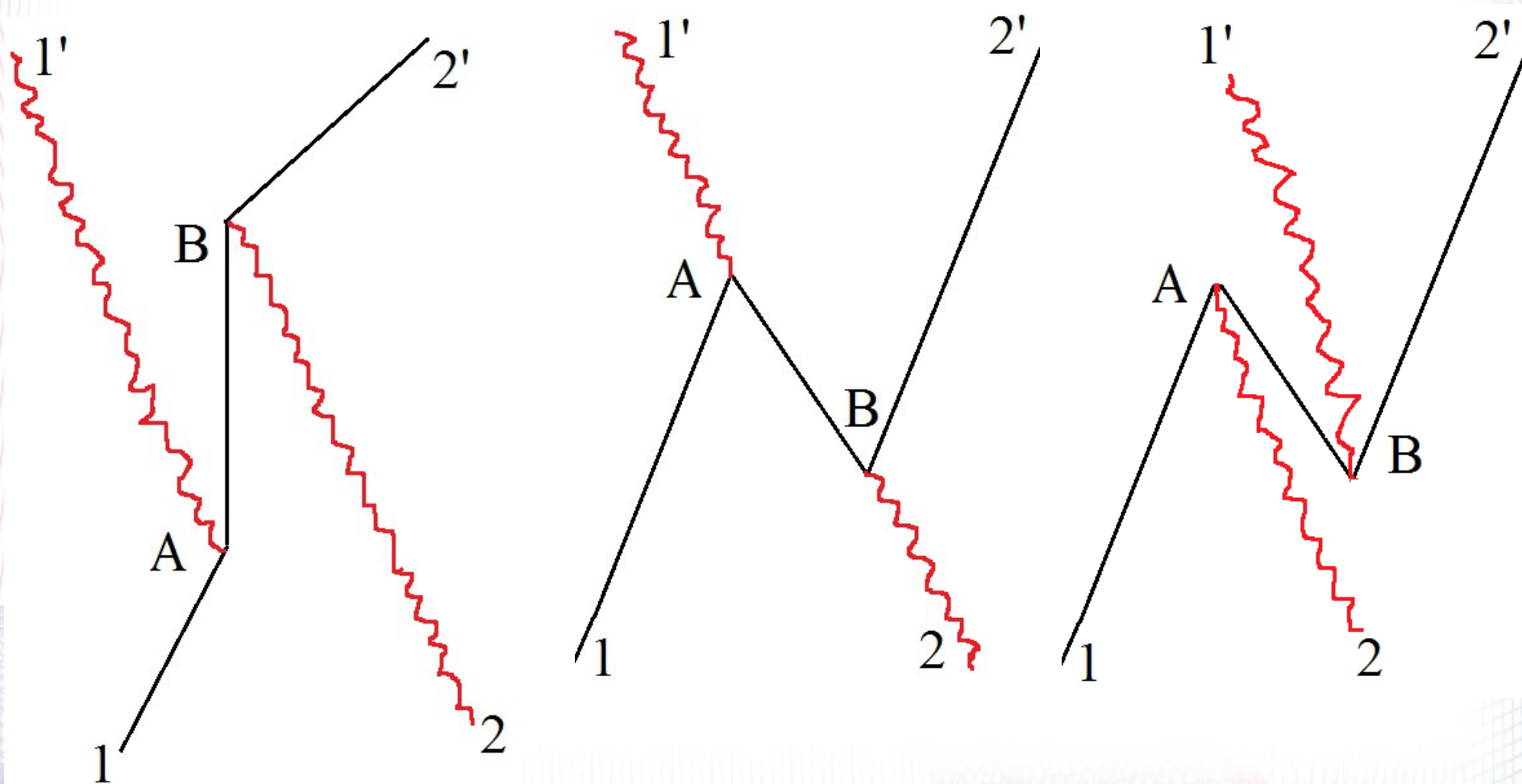
Диаграммы Фейнмана

- Амплитуда диаграммы есть произведение амплитуд всех ее частей:

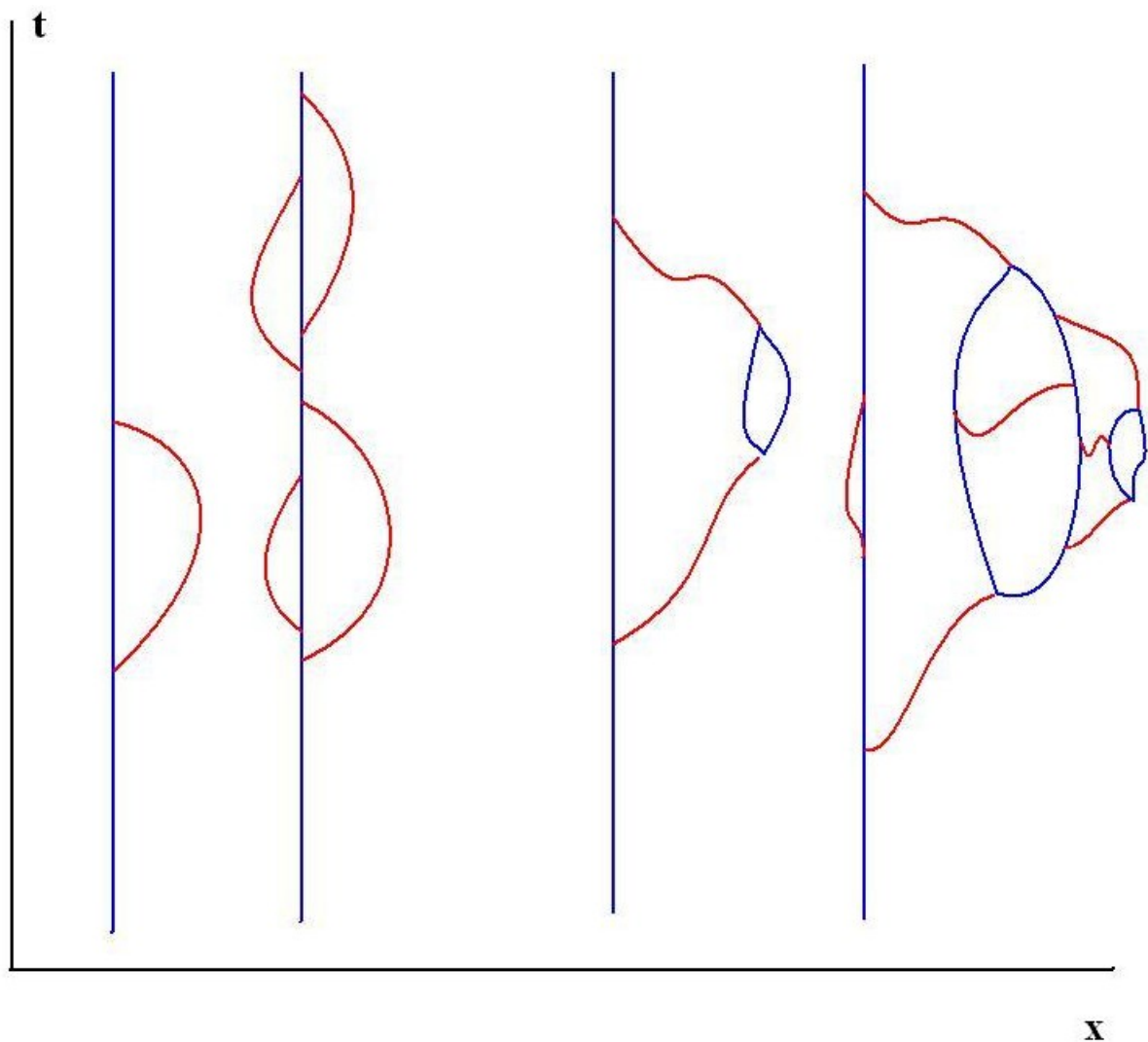


- $P(A \rightarrow B)E(1 \rightarrow A)E(A \rightarrow 1')E(2 \rightarrow B)E(B \rightarrow 2')jj$

В диаграммах время может течь вспять, а энергия должна сохраняться только во всей диаграмме, но не в каждой ее части.

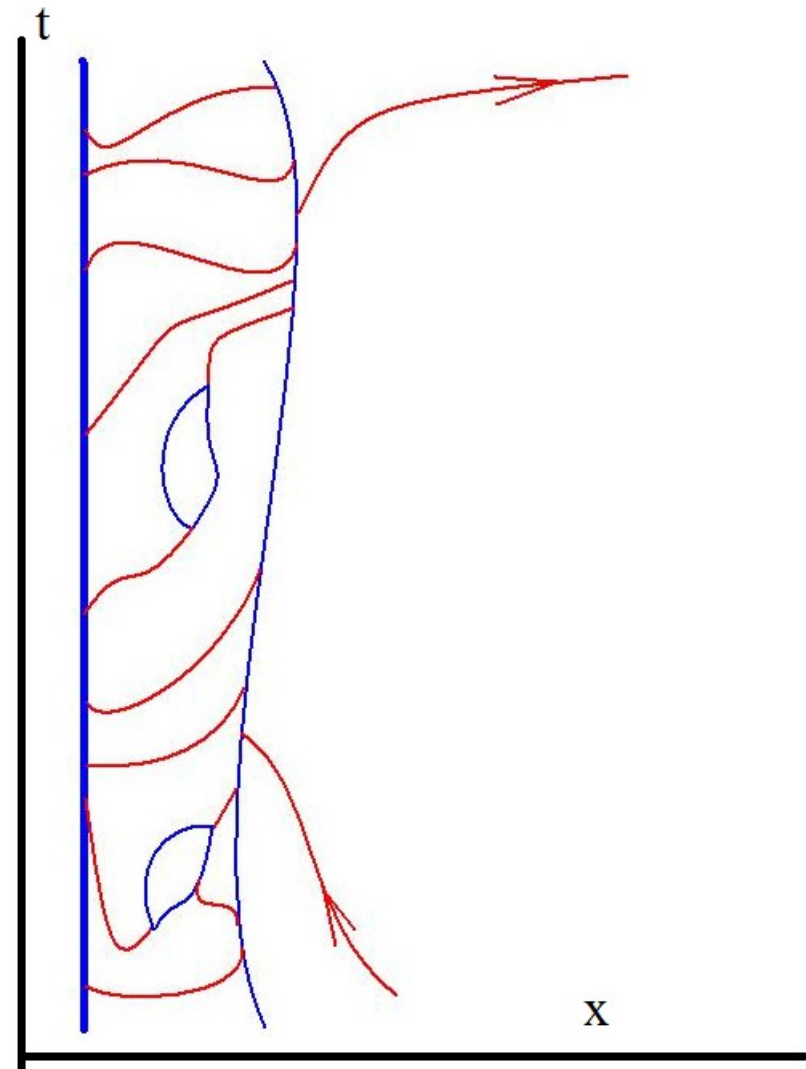


Реальный электрон – всегда "одет" в облако из виртуальных частиц



Каждый шаг в "пути" сложной системы – фейнмановская диаграмма

- Рассеяние фотона атомом водорода



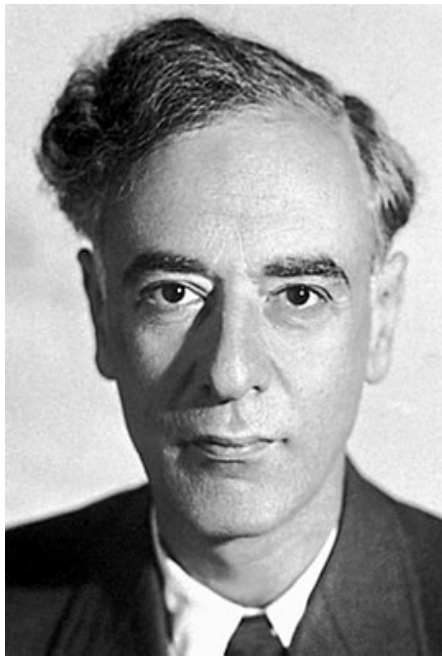
Квантовая электродинамика способна дать ответ с точностью около десяти знаков после запятой

- Задаем значение зерна d пространственного разрешения.
- Подбираем массу и заряд v и j "голового" электрона, вычисляем вероятности процесса и сравниваем с экспериментом.
- Бете, Вайскопф (1949): при уменьшении d параметры v и j изменятся, но амплитуды – только уточнятся!
- Фейнман, Швингер, Томонага: вычисления фундаментальных процессов и характеристик элементарных частиц с помощью КЭД.
- Боголюбов, Парасюк: перенормировки возможны, КЭД логически состоятельна.

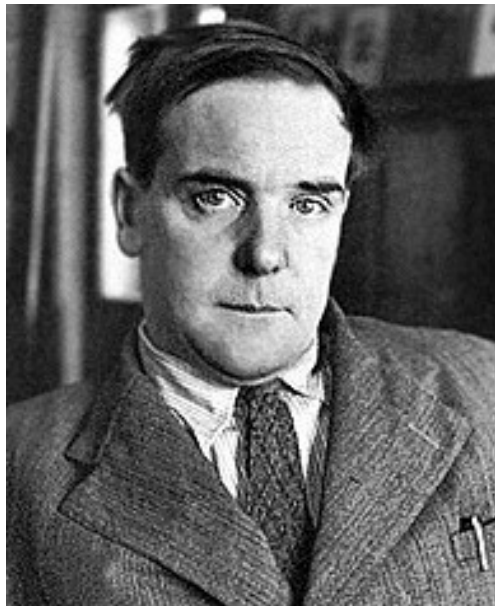
П.А.Дирак



Л.Д.Ландау



П.Л.Капица



Н.Н.Боголюбов

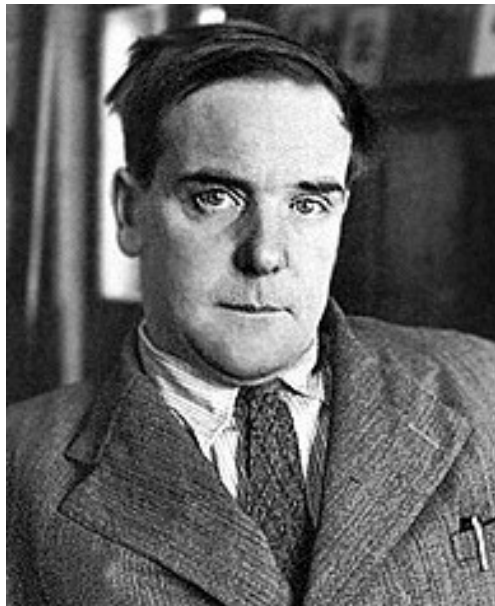
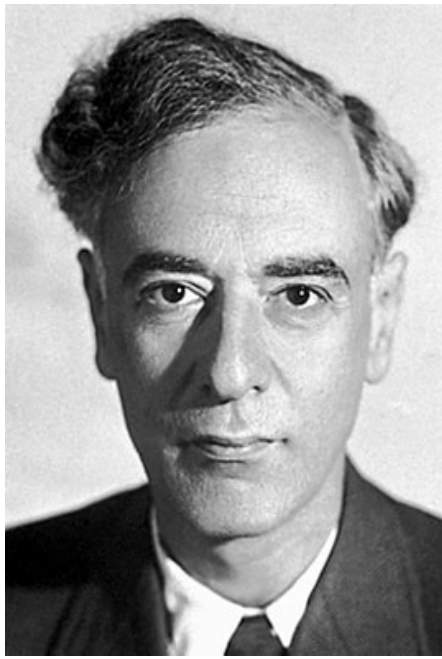


П.А.Дирак

Л.Д.Ландау

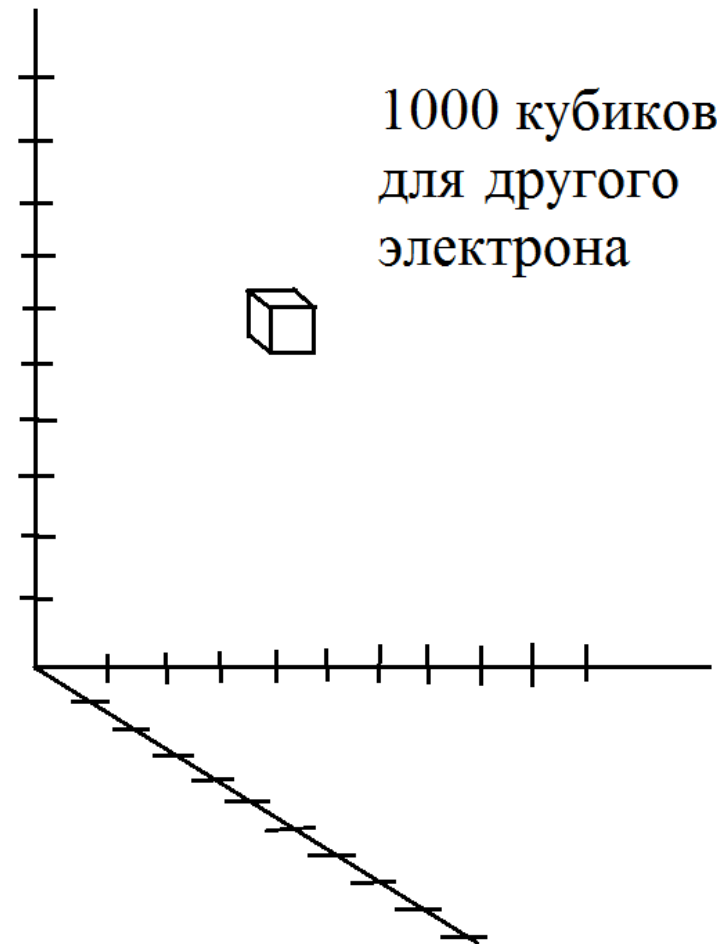
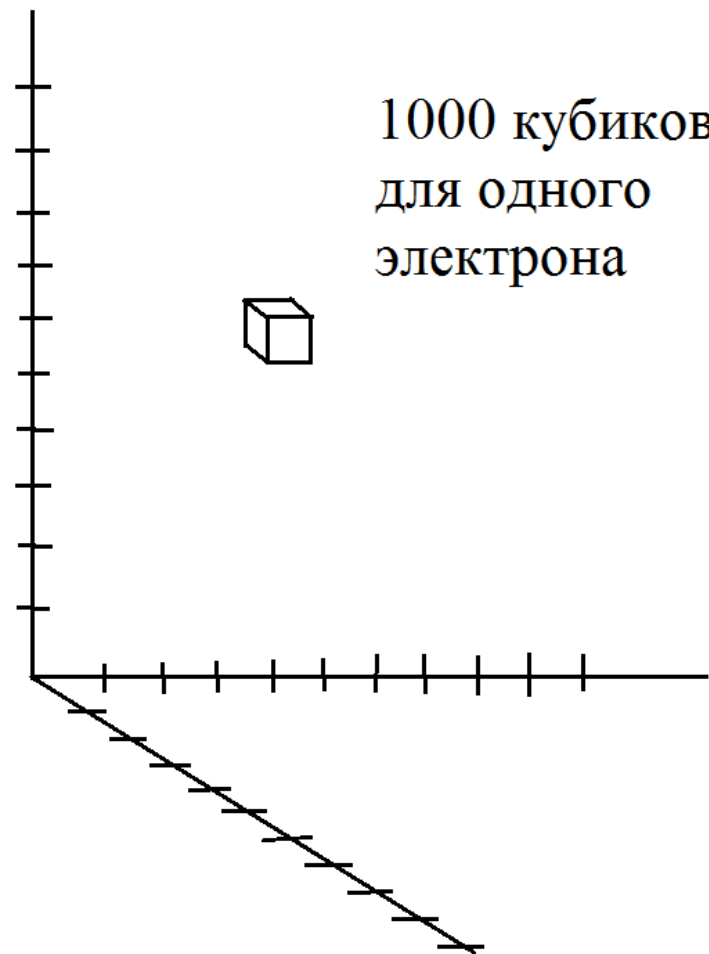
П.Л.Капица

Н.Н.Боголюбов



Что будет, если частиц много?

- Размерность пространства состояний будет расти как экспонента от числа частиц



всего 1000 000
состояний для
пары электронов

Кубиты — неделимые частицы материи

Квантовый бит — кубит, имеет два классических состояния:

$|0\rangle$ и $|1\rangle$.

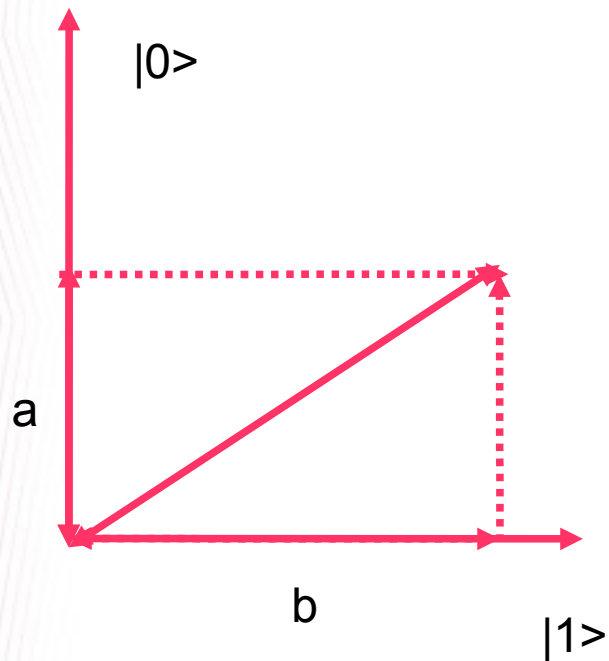
Они образуют ортонормированный базис двумерного пространства квантовых состояний кубита.

Типичное квантовое состояние имеет вид

$$|\psi\rangle = a |0\rangle + b |1\rangle,$$

Где a, b — комплексные числа, такие что $a^2 + b^2 = 1$.

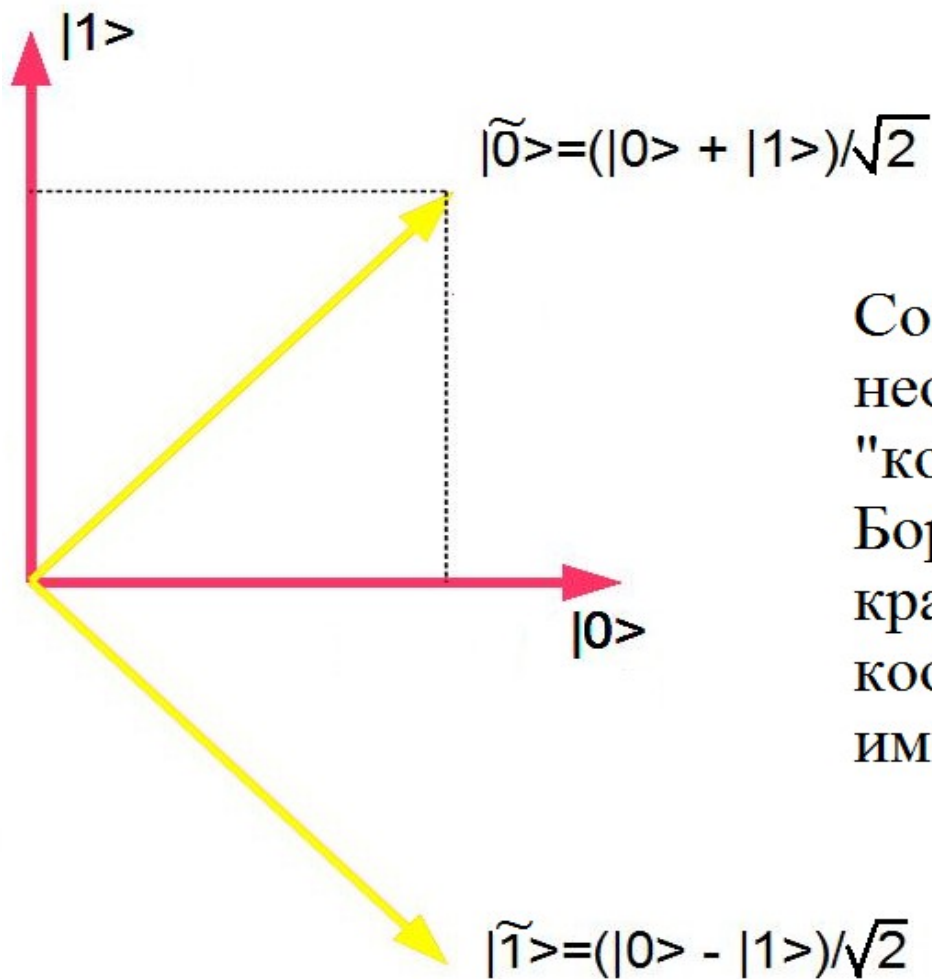
Измерение кубита



Измерение кубита, находящегося в состоянии $|\psi\rangle = a |0\rangle + b |1\rangle$ — это случайная величина.

Она принимает значение $|0\rangle$ с вероятностью a^2 и значение $|1\rangle$ с вероятностью b^2 .

Измерение кубита в разных базисах



Соотношение
неопределенностей
"координата-импульс"
Бора - Гейзенберга:
красный базис -
координатный, желтый -
импульсный

Феномен запутанности: два кубита

Базисные состояния: $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$.

Общий вид квантового состояния:

$$|\psi\rangle = a_{00}|00\rangle + a_{01}|01\rangle + a_{10}|10\rangle + a_{11}|11\rangle$$

Если $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle$, такое состояние — не запутанное.

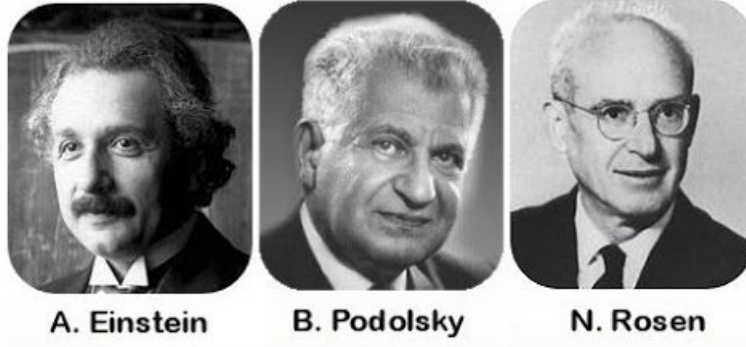
Базисные состояния, а также $(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)/2$ будут не запутанными, потому что они раскладываются в произведение одно-частичных (например, последнее есть

$$(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2} (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}).$$

Состояние ЭПР: $2^{-1/2}(|00\rangle + |11\rangle)$ - запутанное.

Большинство состояний — запутанные.

ЭПР - парадокс



В состоянии $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$

кубиты не обладают отдельными друг от друга состояниями: у них есть только одно – общее. Частицы каким-то образом «чувствуют» состояние друг друга, хотя могут находиться на расстоянии многих километров.

Квантовая запутанность – особый физический феномен

- Его регистрируют в экспериментах
- Запутанность означает корреляцию в поведении нескольких частиц, зависящую от их окружения.
- Частицы, находящиеся за сотни километров друг от друга, могут быть в запутанном состоянии.
- Запутанность невозможно воспроизвести, снабжая частицы внутренней памятью.
- Запутанность означает наличие внутренней связи между удаленными объектами, которая обладает практически мгновенным действием. Ее невозможно воспроизвести в рамках классической физики.
- Запутанность означает нелокальность мира.
- Мы не можем использовать запутанность для передачи задуманной нами информации со сверхсветовой скоростью. Природа удивительным образом согласована!

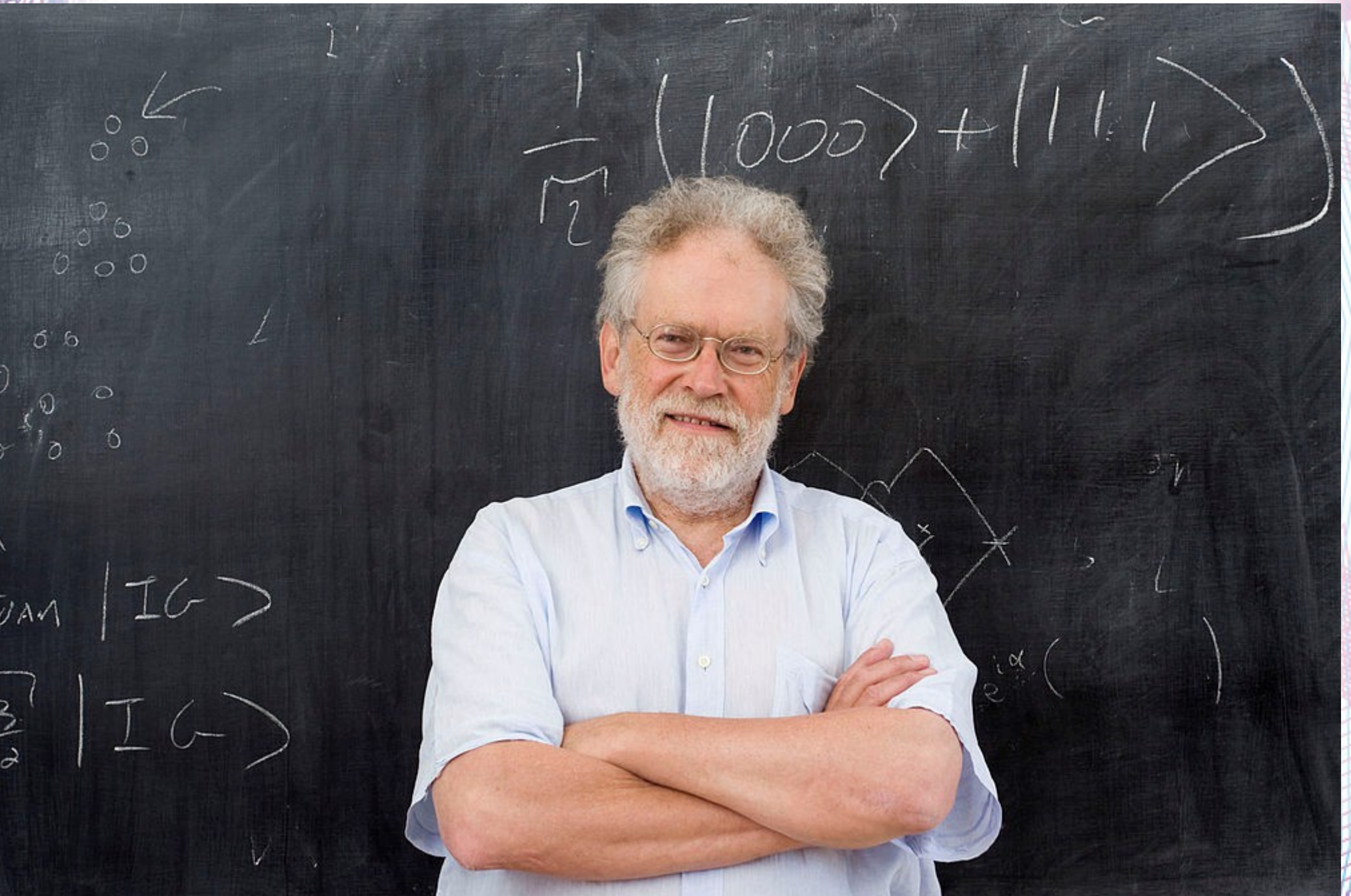
Эксперимент, устанавливающий квантовое дальноедействие



Джон Белл

Квантовое дальноедействие означает мгновенную коммуникацию, которую нельзя использовать для передачи информации. Фиксация этой коммуникации — нарушение неравенства Белла.

Anton Zeilinger



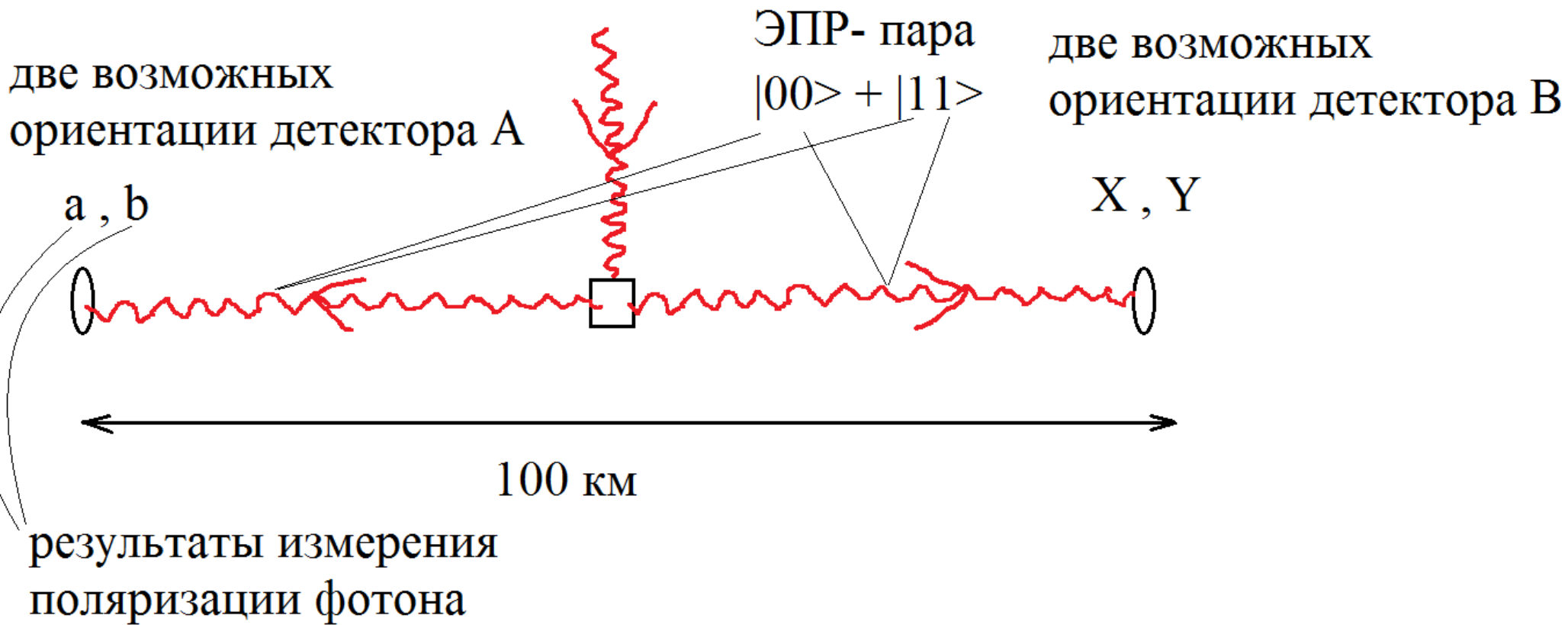
Alain Aspect



Alain Aspect



Квантовая нелокальность



- **Выбор Алисы**

- $\mathbf{a} = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

- $\mathbf{b} = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

- **Выбор Боба**

- $X = (\sigma_x + \sigma_z) / \sqrt{2}$

- $Y = (\sigma_x - \sigma_z) / \sqrt{2}$

Регистрация нелокальности

- Среднее значение величины

$aX + bX + aY - bY$ не может быть больше 2 (неравенство Белла), потому что эта величина есть

$X(a+b) + Y(a-b)$ и одна из скобок $=0$

$(X, Y, a \text{ и } b = \pm 1)$.

- Ее измерение дает $2\sqrt{2}$ в точном соответствии с квантовым расчетом!
- Вывод: величина в действительности есть

$$aX + bX + a'Y - b'Y$$

детектор А (или фотон ?) как-то "узнает" об ориентации детектора В!

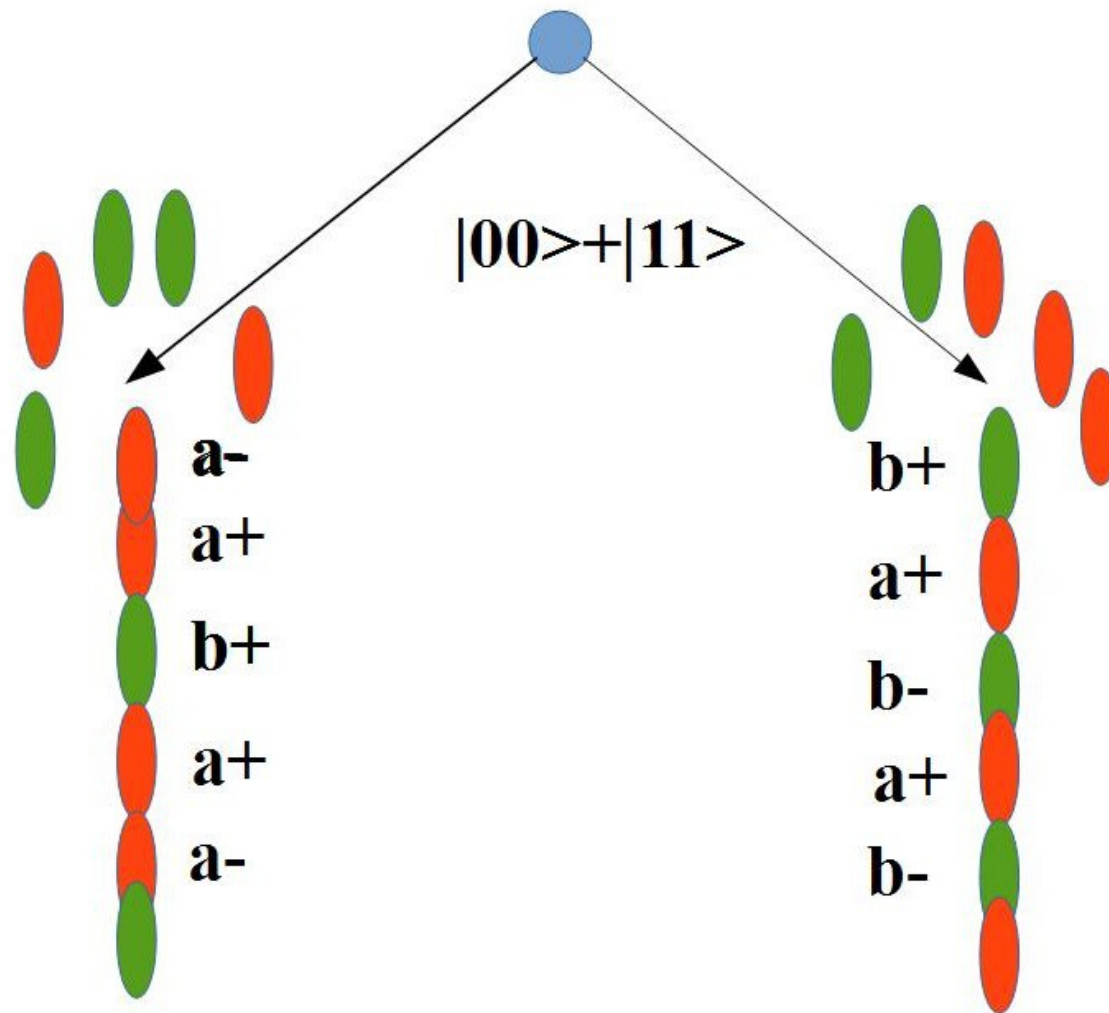
- Это "узнавание" происходит мгновенно, а не распространяется со скоростью света, как фотон!

Инструкция: расчет среднего значения физической величины через матрицу плотности $\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ данного состояния

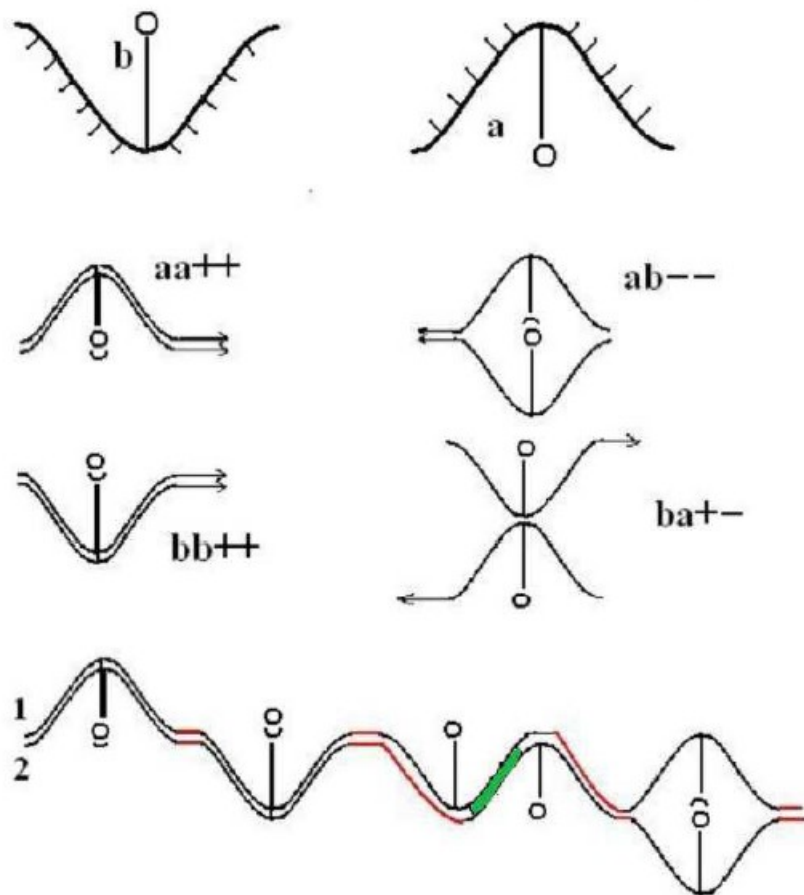
Среднее значение величины A , заданной как самосопряженный оператор (матрица) в состоянии $|\psi\rangle$ есть

$$\mathbf{tr}(A |\psi\rangle\langle\psi|)$$

Одностороннее управление синтезом цепочек



Использование квантовой нелокальности в распределенных вычислениях: одновременный синтез полимерных цепочек в удаленных точках. Эффект дальнего действия — качество склейки возрастает более чем на 12%



Y.I.Ozhigov DISTRIBUTED SYNTHESIS OF CHAINS WITH ONE-WAY BIPHOTONIC CONTROL

Quantum Information and Computation, Vol. 18, No. 7&8 (2018) 0592{0598

Смешанные состояния как мера нашего незнания

$\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ - матрица плотности чистого состояния.

А если мы его не знаем? Тогда мы должны считать, что у нас есть смесь:

$$\rho_\Phi = p_1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \dots + p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

Смесь Φ — это часть чистого состояния, от которого нам доступна только половина всего физического вещества

Квантовая энтропия ведет себя парадоксально вследствие запутанности

Классическая энтропия Шеннона для вероятностного распределения

$$P_1, P_2, \dots, P_k$$

$S(p) = - \sum_i p_i \log p_i$ — это мера хаоса данного распределения.

Квантовая энтропия фон Неймана матрицы плотности смешанного состояния ρ_Φ

$N(\rho_\Phi) = - \text{tr}(\rho_\Phi \log \rho_\Phi)$ - может возрасти при расширении системы, что невозможно в классическом случае.

Порядок квантовых систем может увеличиваться при их расширении

Пример: если в состоянии $|\Phi\rangle = |00\rangle + |11\rangle$ взять только первый кубит, энтропия будет максимальной: 1, а энтропия всего $|\Phi\rangle$ равна 0.

Проект квантового компьютера

Юрий Манин



Поль Беньоф



Проект квантового компьютера

Ричард Фейнман Дэвид Дейч Чарльз Беннет Жиль Браззар



© Фото с сайта www.research.ibm.com

Квантовое вычисление

Квантовое вычисление — манипуляции с квантовым состоянием массива кубитов для получения желаемого результата.

Манипуляции — это унитарные операции (гейты) или измерения.

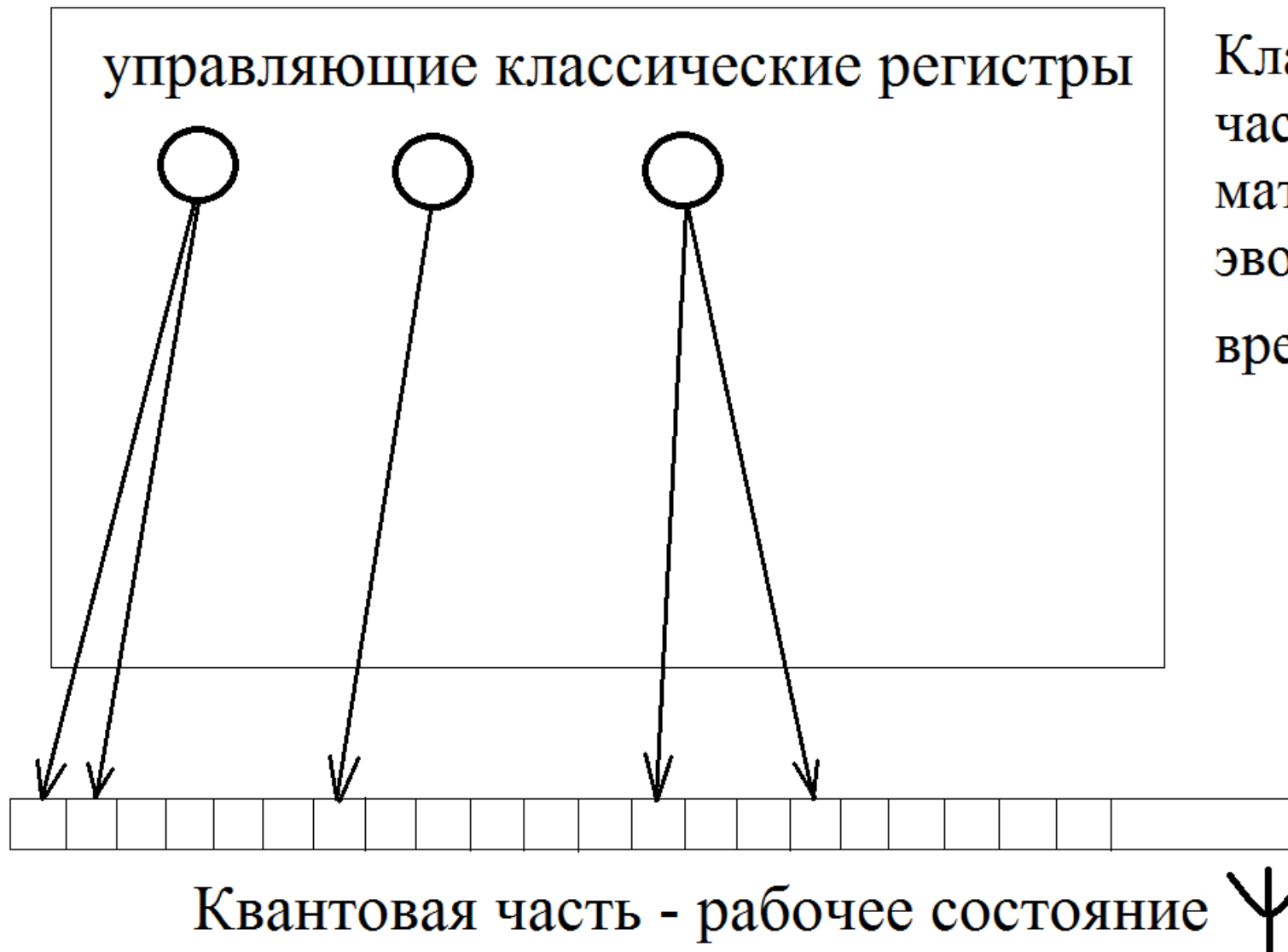
Например, гейт NOT (или σ_x): $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$,

гейт σ_z : $|0\rangle \rightarrow |0\rangle$, $|1\rangle \rightarrow -|1\rangle$,

гейт CNOT: $|x,y\rangle \rightarrow |x, x+y \pmod{2}\rangle$,

гейт Адамара: $|0\rangle \rightarrow (|0\rangle+|1\rangle)2^{-1/2}$, $|1\rangle \rightarrow (|0\rangle-|1\rangle)2^{-1/2}$

Абстрактная схема квантового компьютера



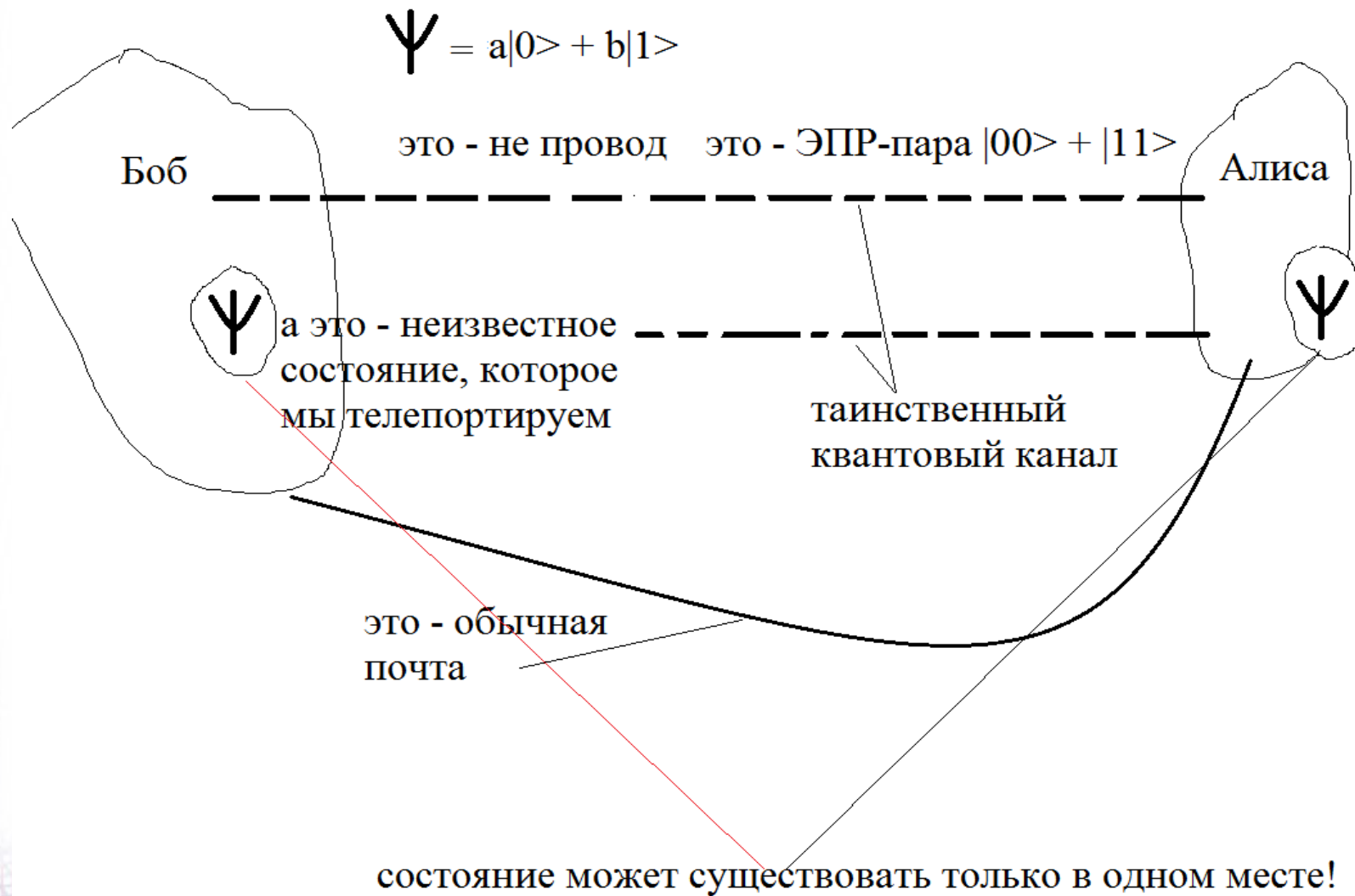
Классическая часть (задает матрицу эволюции во времени U_{ij})

Квантовое состояние нельзя клонировать

Клонирование — это операция, которая из состояния $|\Psi\rangle|0\rangle$ делает состояние $|\Psi\rangle|\Psi\rangle$.

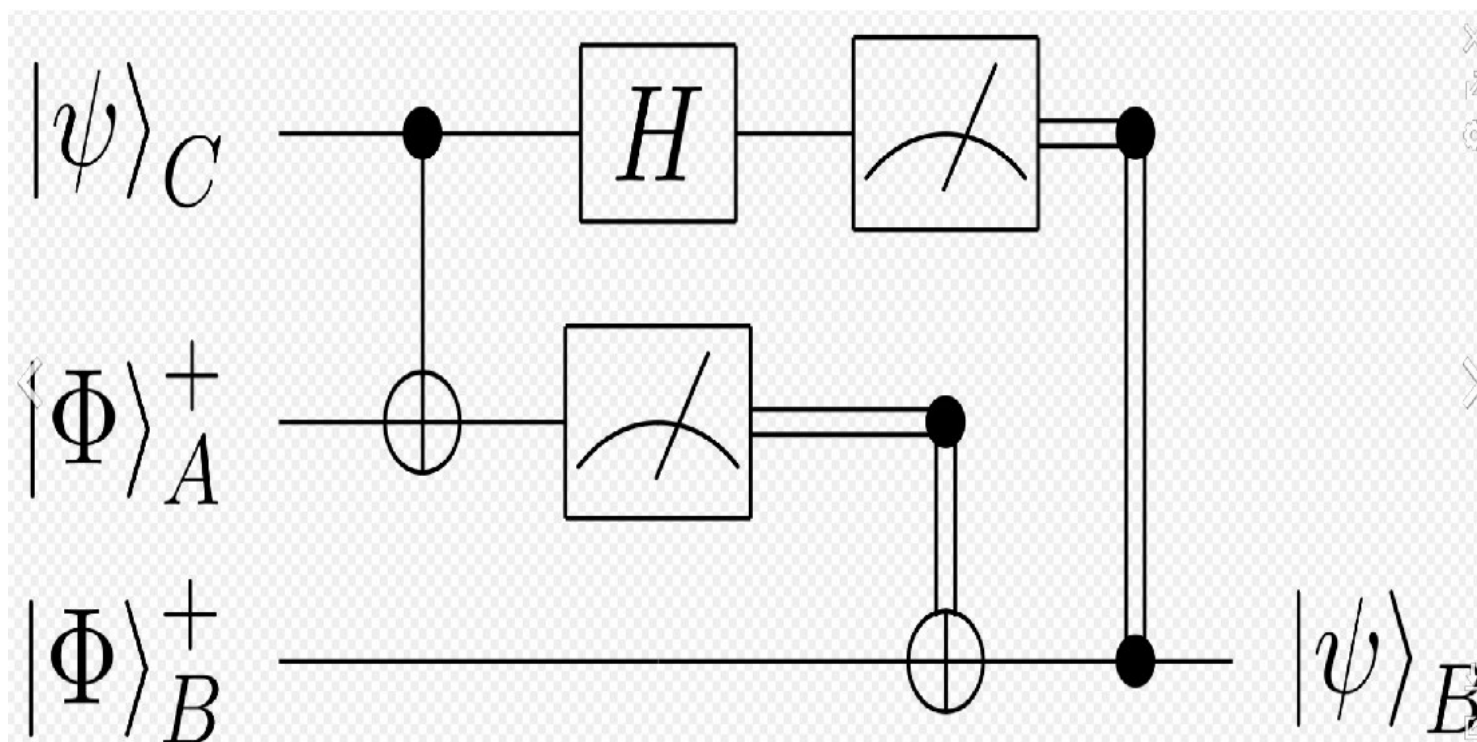
Такая операция не может быть унитарной, поэтому она **ФИЗИЧЕСКИ НЕ ОСУЩЕСТВИМА**.

Телепортация как простейшее квантовое вычисление



Общая схема телепортации одного кубита

C.Bennett, G.Brassard, C.Crepeau, R.Jozsa, A.Peres and W.Wootters, "Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein{Podolsky{Rosen channels", Physical Review Letters 70:13 (1993), pp. 1895-1899



Динамика состояния

$$|\Psi_c\rangle = \lambda|0\rangle + \mu|1\rangle$$

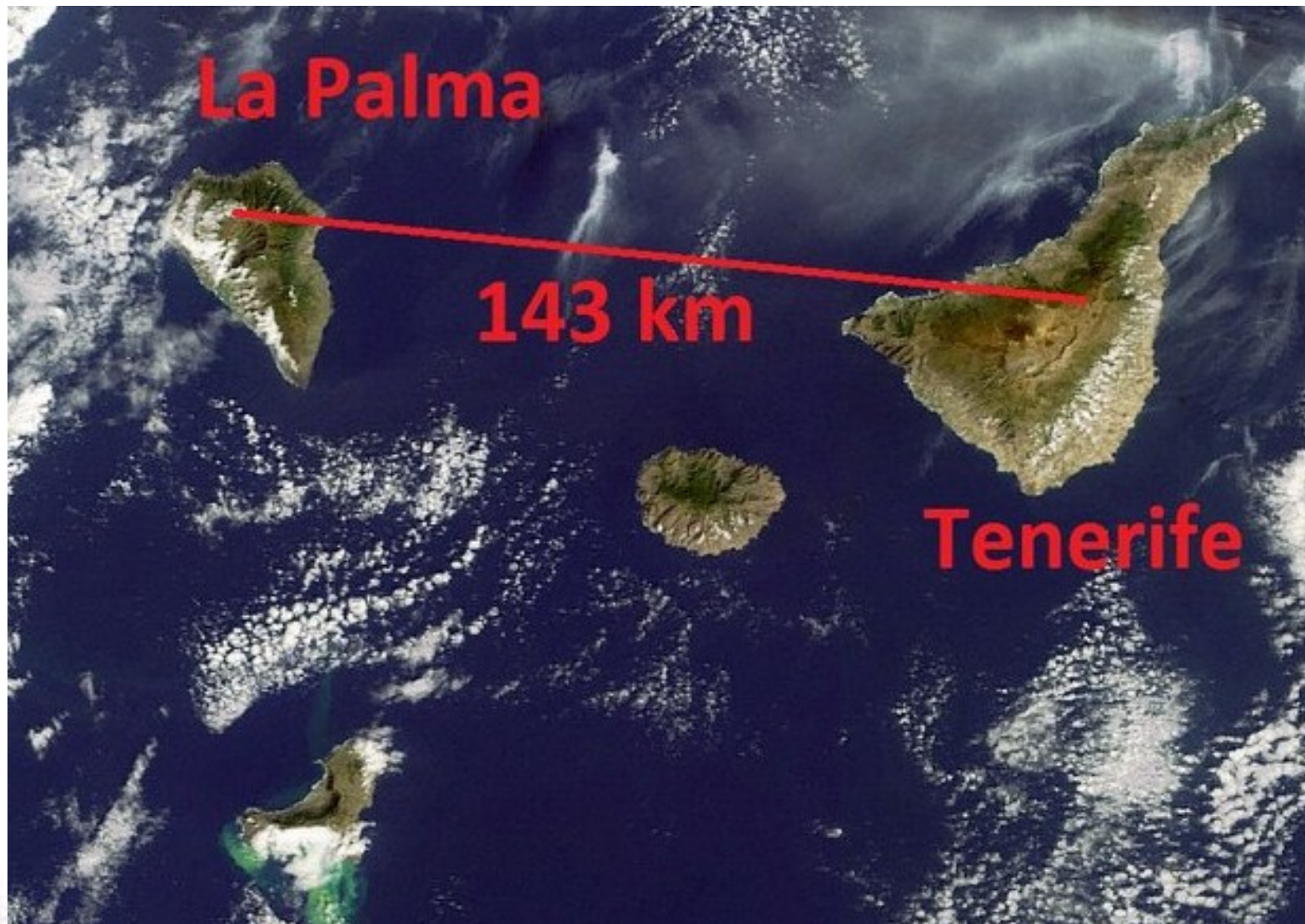
при телепортации

$$\begin{aligned} & (|0\rangle_A |0\rangle_B + |1\rangle_A |1\rangle_B) (\lambda |0\rangle_C + \mu |1\rangle_C) = \\ & = \lambda |000\rangle + \lambda |110\rangle + \mu |001\rangle + \mu |111\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} \\ & \rightarrow \lambda |000\rangle + \lambda |110\rangle + \mu |101\rangle + \mu |011\rangle \xrightarrow{H_c} \\ & \rightarrow \lambda |00\rangle(0+1) + \lambda |11\rangle(0+1) + \mu |10\rangle(0-1) + \mu |01\rangle(0-1) \\ & = \underbrace{\lambda |000\rangle}_{|0\rangle_A |0\rangle_C} + \underbrace{\lambda |001\rangle + \lambda |110\rangle + \lambda |111\rangle}_{|0\rangle_A |1\rangle_C} - \underbrace{\mu |011\rangle}_{|0\rangle_A |1\rangle_C} + \underbrace{\mu |010\rangle}_{|0\rangle_A |0\rangle_C} \end{aligned}$$

Квантовое состояние удивительно напоминает живое существо

- Не существует способа клонирования произвольного квантового состояния Ψ
- Есть схема, позволяющая передавать на расстояние состояние Ψ , не узнавая его. Это – телепортация.
- Чтобы у Алисы возникло состояние Ψ , оно должно быть уничтожено Бобом в результате измерения.

Телепортация между островами в Атлантике



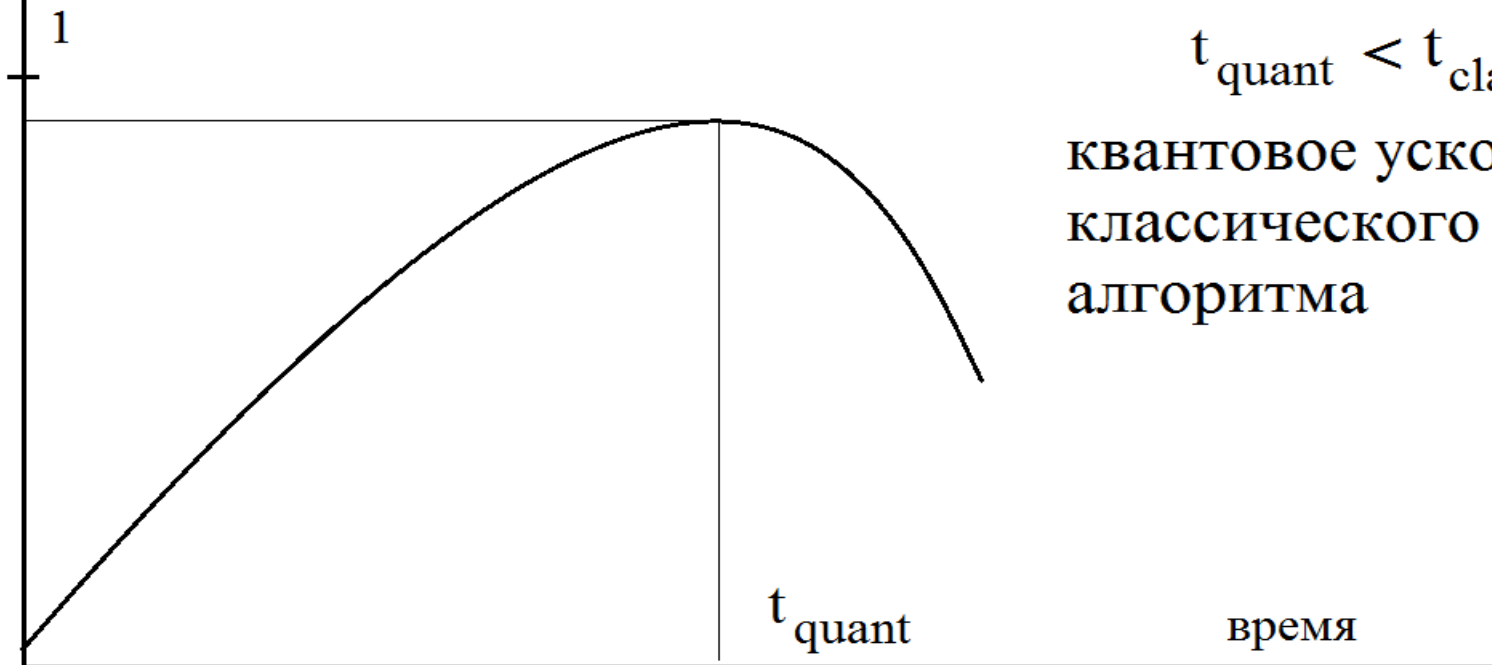
Квантовый компьютер работает в голове каждого из нас, надо только понять, как! (К.А.Валиев)



Что такое быстрый квантовый алгоритм

вероятность получить нужное базисное состояние после измерения пси-функции

$\Psi(t)$ - состояние квантовой части компьютера



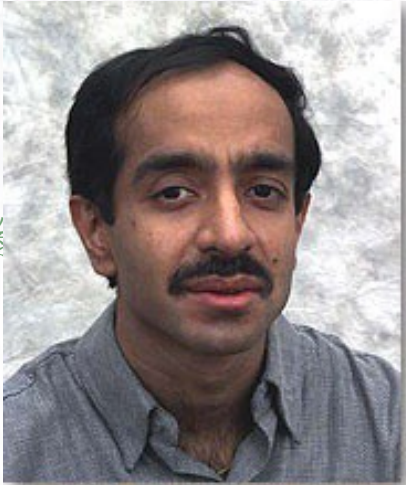
$$t_{\text{quant}} < t_{\text{class}}$$

квантовое ускорение
классического
алгоритма

**Петер Шор: квантовый компьютер позволяет
раскладывать натуральные числа на
множители почти со скоростью их умножения**



Алгоритм Гровера



GSA (Grover search algorithm) предназначен для поиска корней уравнения $f(x)=1$ булевой функции f от n переменных. Он имеет сложность - корень из классического

времени — около $\frac{\pi}{4} 2^{n/2}$

Функция f может быть задана в виде схемы классических вентилей.

Из них можно создать квантовый гейт

$Q_{u_f} : |x,y\rangle \rightarrow |x,f(x)+y \pmod{2}\rangle$

Реализация GSA

Отражение вдоль вектора a : I_a – унитарный оператор, который можно реализовать для $a = \tilde{|0\rangle}$

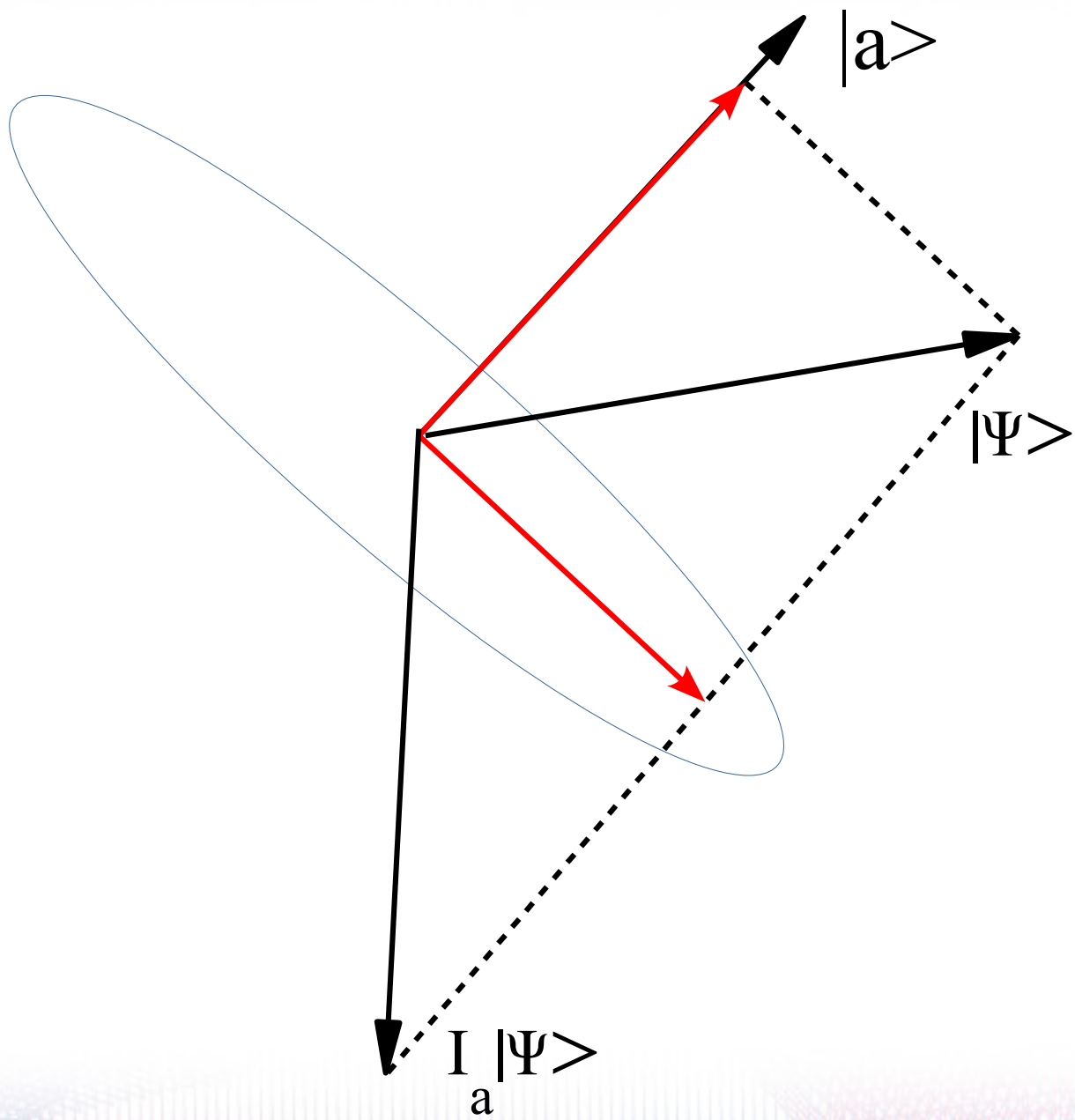
и для $a = |x_{\text{tar}}\rangle$:

Для $\tilde{|0\rangle}$ это делается через $|0\rangle$: $I_{\tilde{|0\rangle}} = H I_{|0\rangle} H$ (H – оператор Адамара).

Для $|x_{\text{tar}}\rangle$ это делается с помощью анциллы:

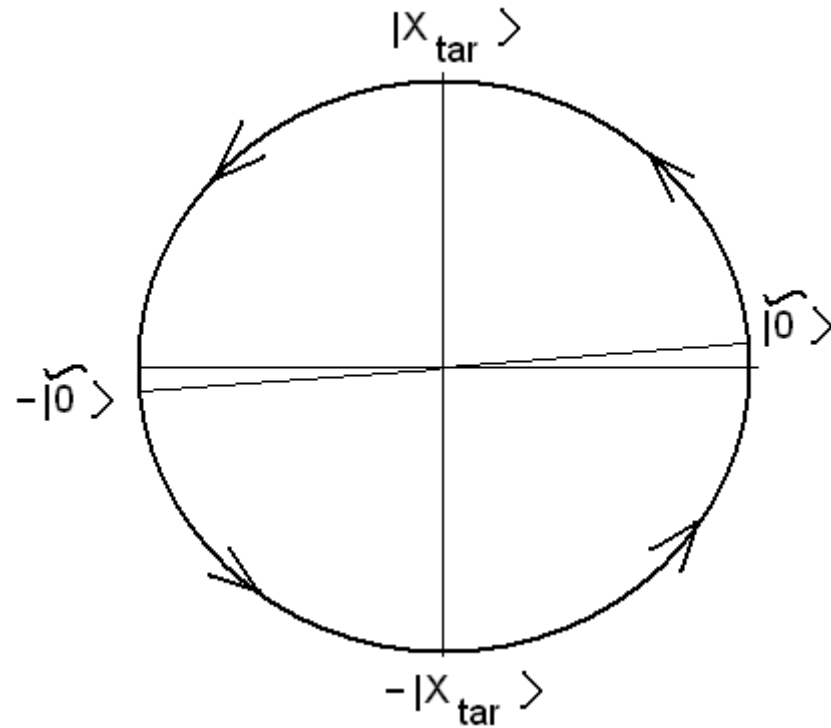
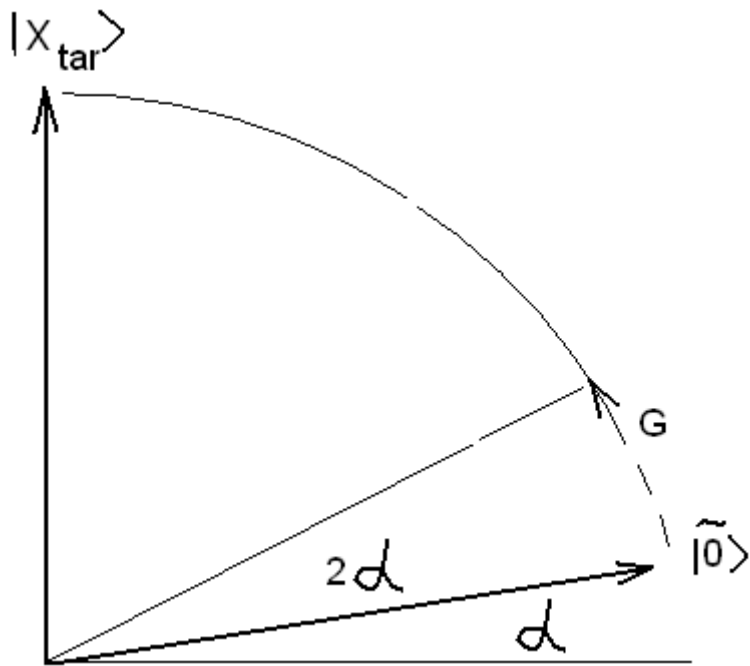
$Q_{u_f} |\Psi\rangle (|0\rangle - |1\rangle) = I_{|x_{\text{tar}}\rangle}$. Теперь оператор $G = - I_{\tilde{|0\rangle}} I_{|x_{\text{tar}}\rangle}$

Будет поворотом плоскости, образованной $I_{|x_{\text{tar}}\rangle}$ и $I_{\tilde{|0\rangle}}$ на угол, примерно равный $2 N^{-1/2}$.

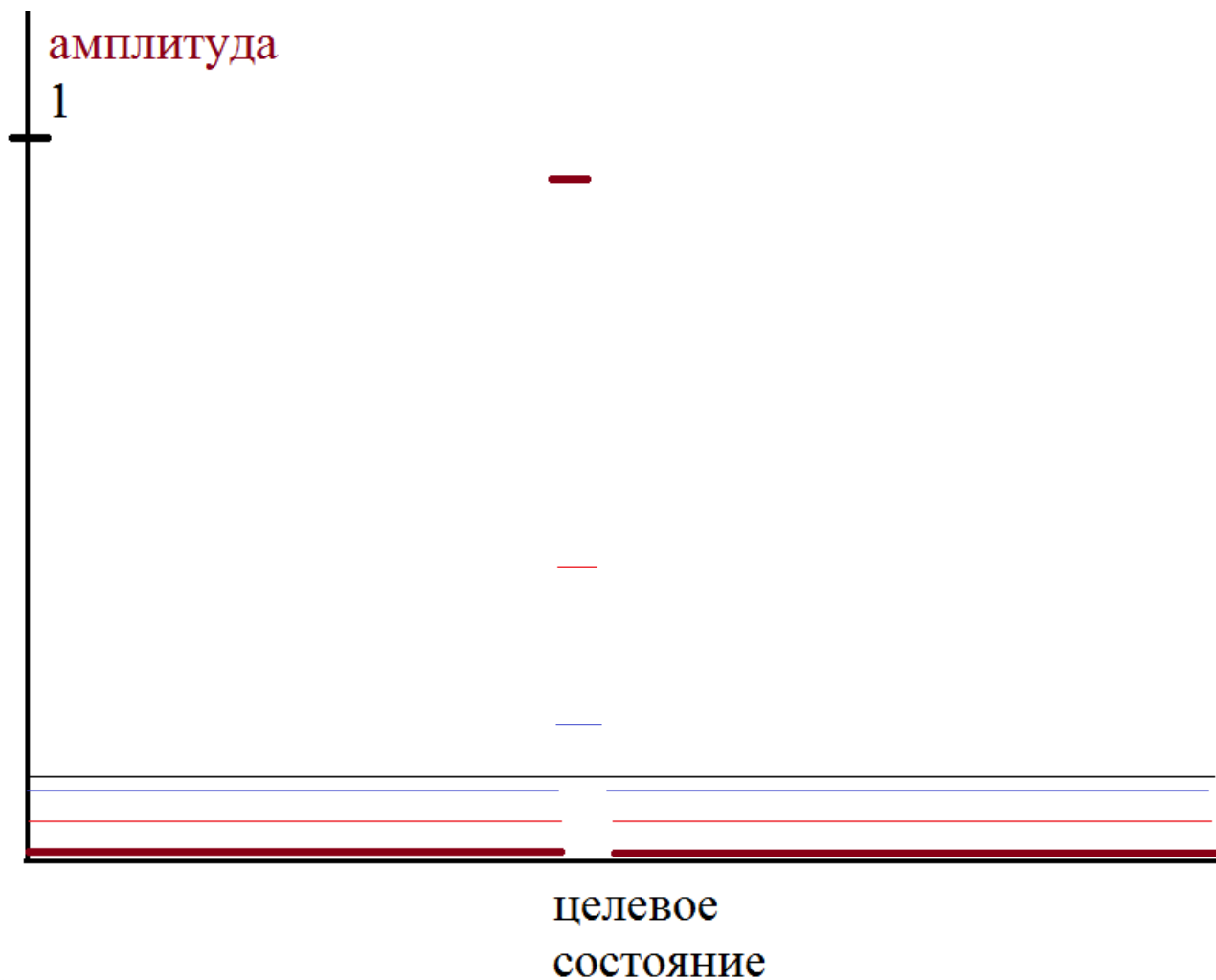


GSA (схема)

- $|\tilde{0}\rangle$ - состояние, у которого амплитуда распределена равномерно по всем базисным состояниям



Рост амплитуды целевого состояния за счет всех других



Квантовое вычисление — принципиально новый процесс

Квантовое вычисление фактически выходит за пределы физики, благодаря феномену быстрых квантовых вычислений.

Известная физика основана на классических вычислениях, поэтому быстрое квантовое вычисление есть процесс, который невозможно воспроизвести в режиме реального времени классическими средствами.

В квантовой теории нет никаких запретов на быстрые квантовые алгоритмы.

Декогерентность

Декогерентность - спонтанное отклонение эволюции вектора состояния от унитарного закона в отсутствие наблюдателя.

Декогерентность может происходить от контакта с окружением — это спонтанное измерение. Борьба с такой декогерентностью - изоляция системы или использование специальных приемов: decoherence free subspace, например, топологические вычисления.

В сложных системах возможна фундаментальная декогерентность, возникающая из-за ограничения на квантовый формализм как таковой.

Гейты — всего лишь интерфейс пользователя квантового компьютера; нужна полноценная операционная система

Ситуация сегодня

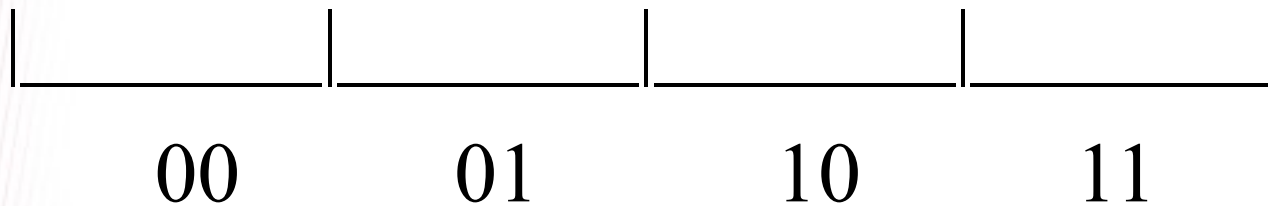
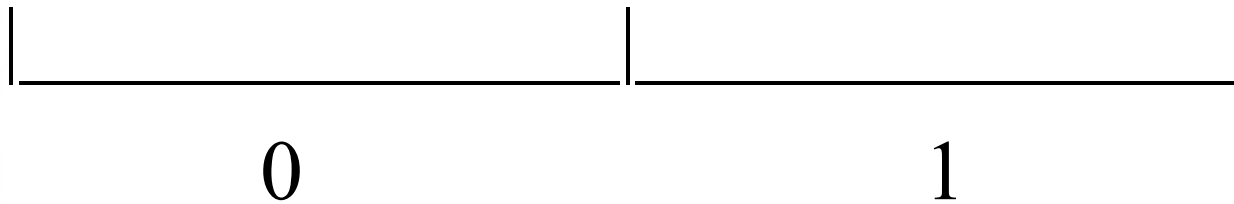
- *Hardware для квантового компьютера будет создан в течение 3 – 5 лет (Квантовый центр МГУ). Он уже почти создан на основе мощного задела в квантовой физике. Может быть, он уже сделан. Но математического обеспечения НЕТ. Мы не умеем управлять этим прибором! **Нужна операционная система для квантового компьютера.***
- *Есть только пользовательский интерфейс: квантовые гейты, предложенные Фейнманом.*
- *Нужны а) драйверы квантовых устройств и б) общая программа, управляющая квантовым вычислением.*
- *Это – программы для суперкомпьютера, которые должны работать достаточно быстро, чтобы управлять квантовым вычислением.*

Сложные системы требуют иной математики

- Мы не сможем набрать статистики для квантовых состояний многих тел в общем случае. Как ставить эксперименты?
- Из того, что сейчас известно, лучше всего подходят алгоритмы, но не формулы
- Алгоритмизм предполагает индивидуальное написание кода программы; могу ли я считать чужой код своим, так же, как математическую формулу?

Квантовая физика кубитов

Базисные (классические) состояния представляются в кубитовой форме — как координата в двоичной системе счисления:



n битов позволяют записывать натуральные числа от 0 до $N=2^n$ включительно.

Квант амплитуды возникает при компьютерном моделировании

Копенгагенская (стандартная) квантовая механика:

$$|\Psi\rangle = \lambda_0|0\rangle + \lambda_1|1\rangle + \dots + \lambda_{N-1}|N-1\rangle,$$

базисное состояние кубитов $|j\rangle = |a_1 a_2 \dots a_n\rangle$, $a_i = 0, 1$.

Компьютерное представление квантовых состояний:

Любое $\lambda_j = \epsilon n_j + i \epsilon m_j$, n_j, m_j - целые, $\epsilon > 0$ — квант амплитуды.

Величина ϵ^2 и сложность квантового состояния должны находиться в соотношении неопределенностей, то есть быть обратно пропорциональными.

Внешняя сложность квантового состояния есть размерность его максимального запутанного делителя

$\{1,2,\dots,n\}=M_1 + M_2$, $M_1 \cap M_2 = \emptyset$ — разбиение множества кубитов на два подмножества, так что

$$|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle |\Psi_2\rangle$$

и множество M_1 с этим свойством содержит максимальное число кубитов R . Тогда внешняя сложность $S(|\Psi\rangle)$ равна 2^R .

Абсолютная сложность $|\Psi\rangle$ есть минимум внешних сложностей по всем перестановкам базисных состояний τ из S_N :

$$C(|\Psi\rangle) = \min S(\tau|\Psi\rangle)$$

τ называется квазичастичным представлением. Оно может редуцировать сложность.

Абсолютная сложность — память процессора в суперкомпьютере, моделирующем эволюцию вектора состояния $|\Psi\rangle$.

Сложность квантового состояния

$$|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle |\Psi_2\rangle$$

R = число кубитов

в максимальном

делителе $|\Psi\rangle$.

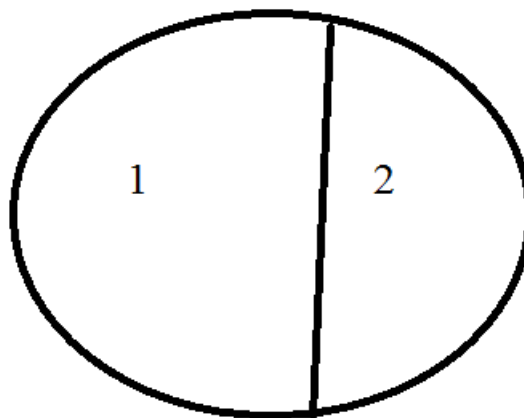
$$S(|\Psi\rangle) = 2^R$$

Надо взять минимум $S(|\Psi\rangle)$ по всем перестановкам базисных векторов τ :

$C(|\Psi\rangle) = \min_{\tau} S(\tau |\Psi\rangle)$ - это абсолютная сложность квантового состояния – размер процессора в суперкомпьютере, способном разместить $|\Psi\rangle$.

τ называется квазичастичным представлением. Оно может редуцировать сложность: $|00\dots 0\rangle + |11\dots 1\rangle$ имеет сложность 2.

Все кубиты разбиваем на 2 множества, так чтобы в состоянии $|\Psi\rangle$ они были бы независимы



Соотношение неопределенностей «СЛОЖНОСТЬ - ТОЧНОСТЬ»

Ограниченность памяти классического компьютера влечет соотношение точности и сложности вида

$$N/\epsilon^2 = Q$$

где Q — константа, не зависящая от состояния $|\Psi\rangle$.

В стандартной квантовой теории Q считается бесконечностью.

Константу Q можно определить из алгоритма Гровера: он работает только при $\epsilon^2 = 1/N$, поэтому Q будет квадратом максимального числа состояний, для которых алгоритм Гровера работает.

<https://arxiv.org/abs/1902.05426>

О физическом смысле константы Q

Константа Q соотношения неопределенностей «сложность — точность» связывает квантовое представление сложных процессов разной природы с одним — вычислением по алгоритму Гровера.

Пример 1. Осцилляции Раби: испускание и поглощение фотона атомом рубидия R^{85} , помещенным в резонатор длины 0.7 см.

For one period of Rabi oscillations of the Rubidium-85 atom in the cavity occurring with the emission of a photon with a wavelength of about 1.4 *cm* we have: $\omega \approx 10^{10} \text{ sek}^{-1}$, $E_{QED} = \hbar\omega \approx 10^{-17}$, $dt \approx \hbar/E_{QED} = 10^{-10}$. Given the time of Rabi oscillation $t \approx 10^{-6} \text{ sek}$, we get $\epsilon \approx 10^{-4}$. If a good drawing of the electron wave function requires $N = 10^2$, we end up with $Q \approx 10^{10}$. Thus, if this process can be well drawn on the basis of quantum theory, then $Q \geq 10^{10} \approx 2^{33}$ and Grover's algorithm should work on about 16 qubits.

О физическом смысле константы Q

Пример 2. Распад нестабильного изотопа гелия 6:

Now we consider the decay of the nucleus of a Helium isotope: $He^6 \rightarrow He^5 + n \rightarrow He^4 + 2n$ (in this rough approximation we take into account only nucleons). The characteristic energy value will be about $10 \text{ Mev} \approx 10^{-5} \text{ erg}$, and the energy-time uncertainty relation will give $dt \approx 10^{-22} \text{ sec}$. The whole process takes about 1.6 sec , from $\epsilon \approx dt/t \approx 10^{-22}$, and we have an estimate for $Q \approx 10^{46} \approx 2^{217}$. Thus, if quantum mechanics can be continued to nuclear processes such as the decay of the isotope Helium - 6 to a stable isotope Helium-4, Grover algorithm should work well already with at least 100 qubits.

Для короткой стадии этого процесса — распада изотопа He^5 , длительностью 10^{-13} сек, аналогичный расчет даст значение Q примерно 10^{20} , что означает работу GSA на 33 кубитах.

Алгоритм Гровера как универсальный измеритель сложности процессов

Константа Q позволяет сравнивать процессы различной природы по числу кубитов, на которых GSA уверенно работает.

Главная задача экспериментов по квантовым компьютерам — определение константы Q .

Величина Q определяет границы применимости квантовой физики в сложных процессах.

Recent result

- Entanglement at room temperature



Science 2 December 2011:
Vol. 334 no. 6060 pp. 1253-1256
DOI: 10.1126/science.1211914

[< Prev](#) | [Table of Contents](#) | [Next >](#)

 [Read Full Text to Comment \(0\)](#)

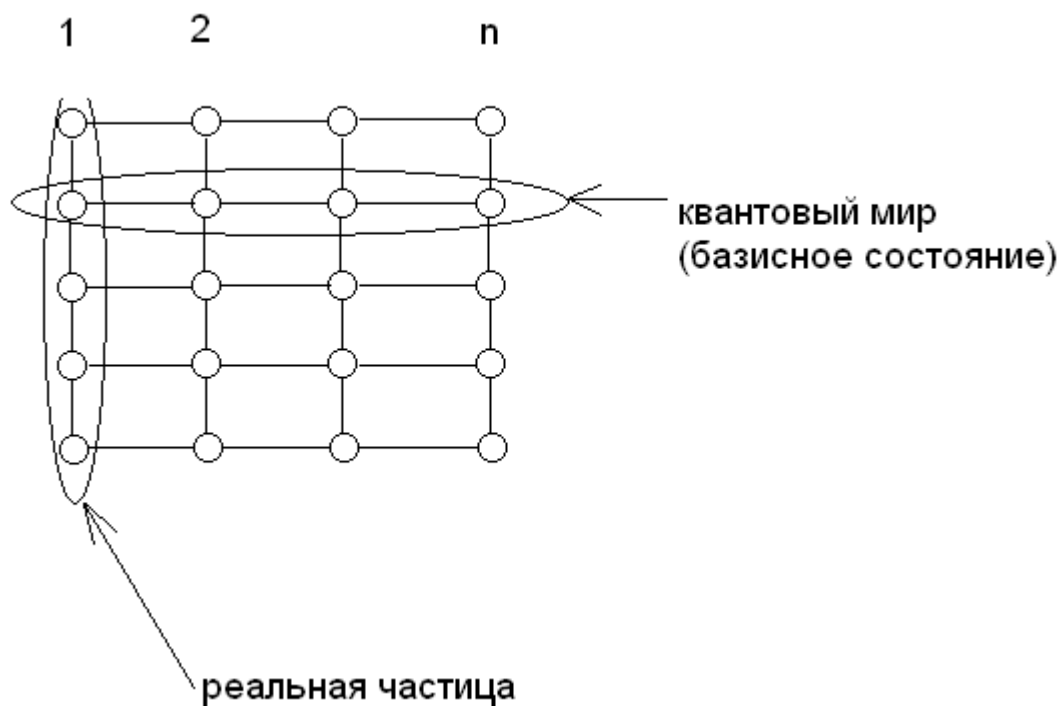
REPORT

Entangling Macroscopic Diamonds at Room Temperature

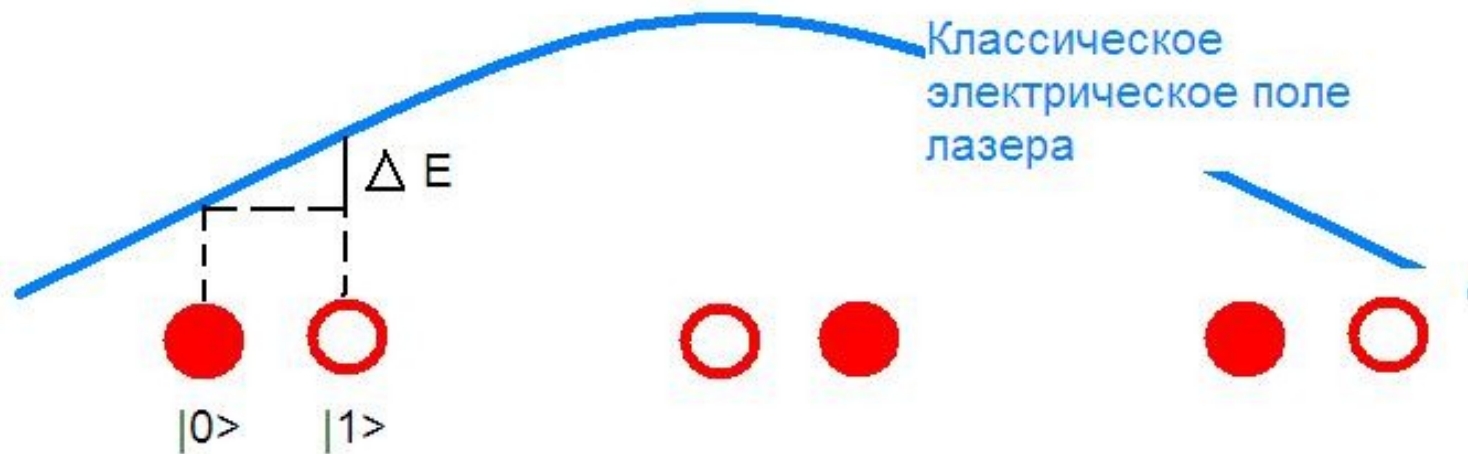
K. C. Lee^{1,*}, M. R. Sprague^{1,†}, B. J. Sussman², J. Nunn¹, N. K. Langford¹, X.-M. Jin^{1,3}, T. Champion¹, P. Michelberger¹,
K. F. Reim¹, D. England¹, D. Jaksch^{1,3}, I. A. Walmsley^{1,†}

Великий закон Природы для сложных систем: как его применять?

- Реальная частица = система многих частиц
- Рой экземпляров = всевозможные пространственные расположения системы



- **Квантовые состояния в тороидальных квантовых точках**

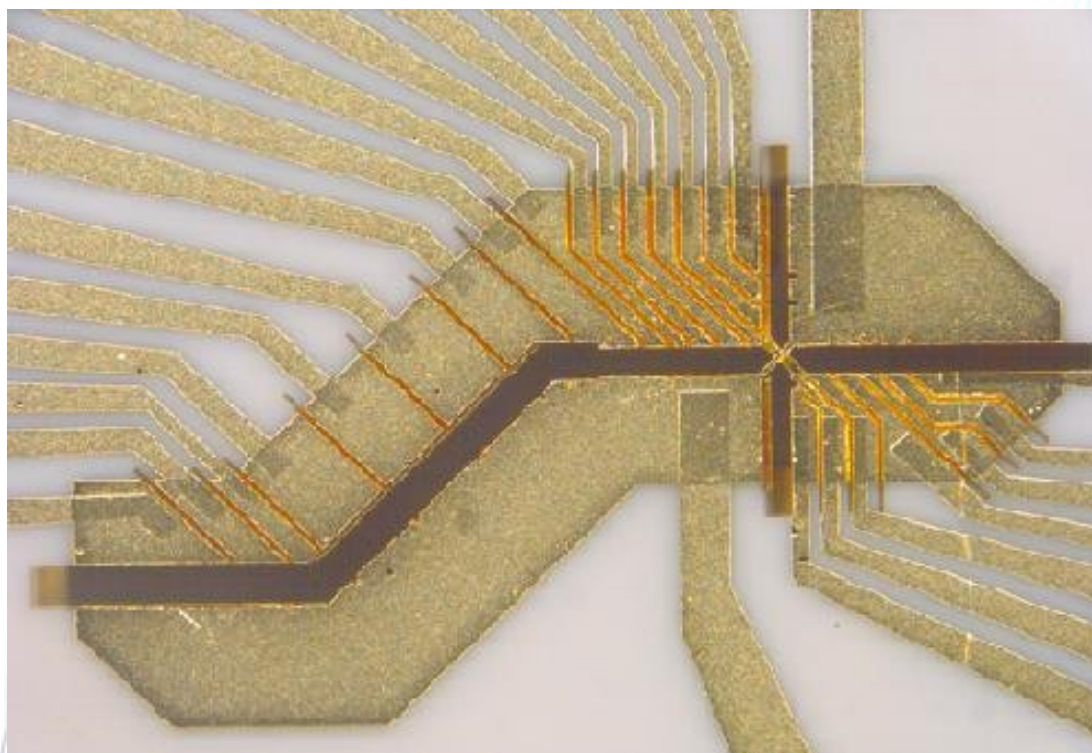
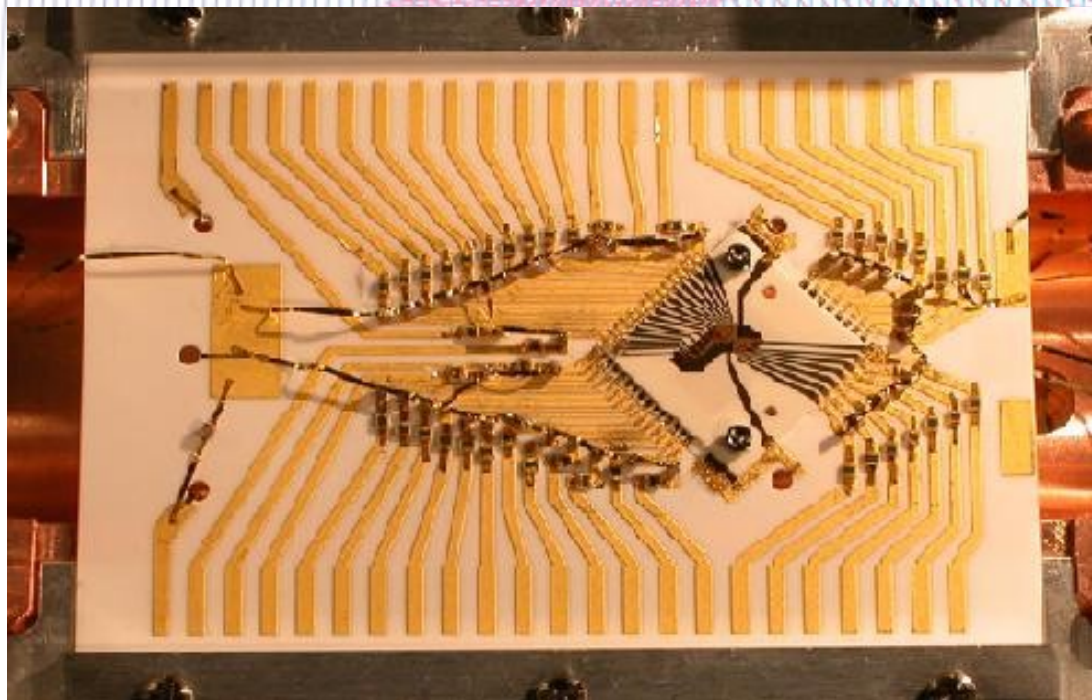


время перехода между основным и возбужденным состояниями зависит от ΔE - получается

запутанное состояние возбужденного состояния и колебательной моды: состояние в пространстве

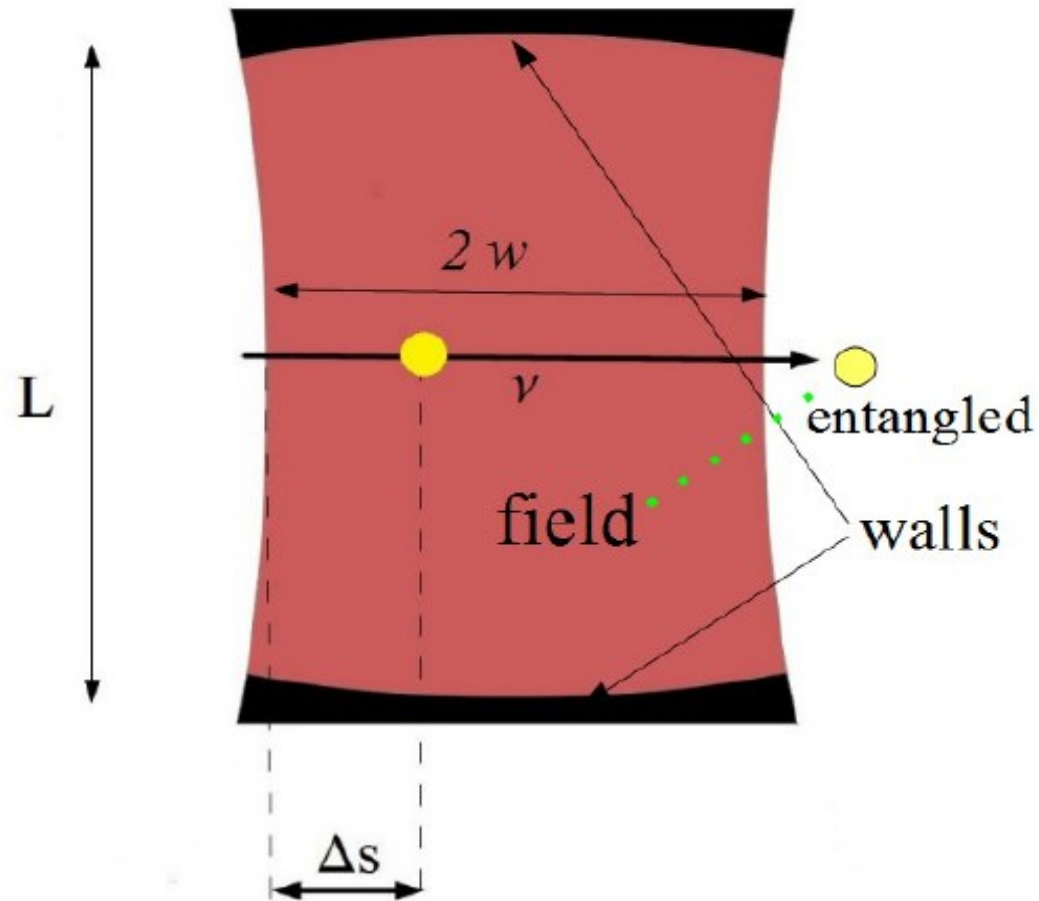
$$H_{\{osc\}} \otimes H_{\{exc\}}$$

Вычисление происходит в $H_{\{exc\}}$



Нелинейный фазовый сдвиг фотонных состояний в оптической полости:

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle, |1\rangle \rightarrow |1\rangle, |2\rangle \rightarrow -|2\rangle$$



$$H_{JC} = \omega_c a^\dagger a + \omega_a \sigma_z / 2 + \gamma (\sigma^+ a + \sigma a^+)$$

C-Sign гейт на фотонных состояниях:

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

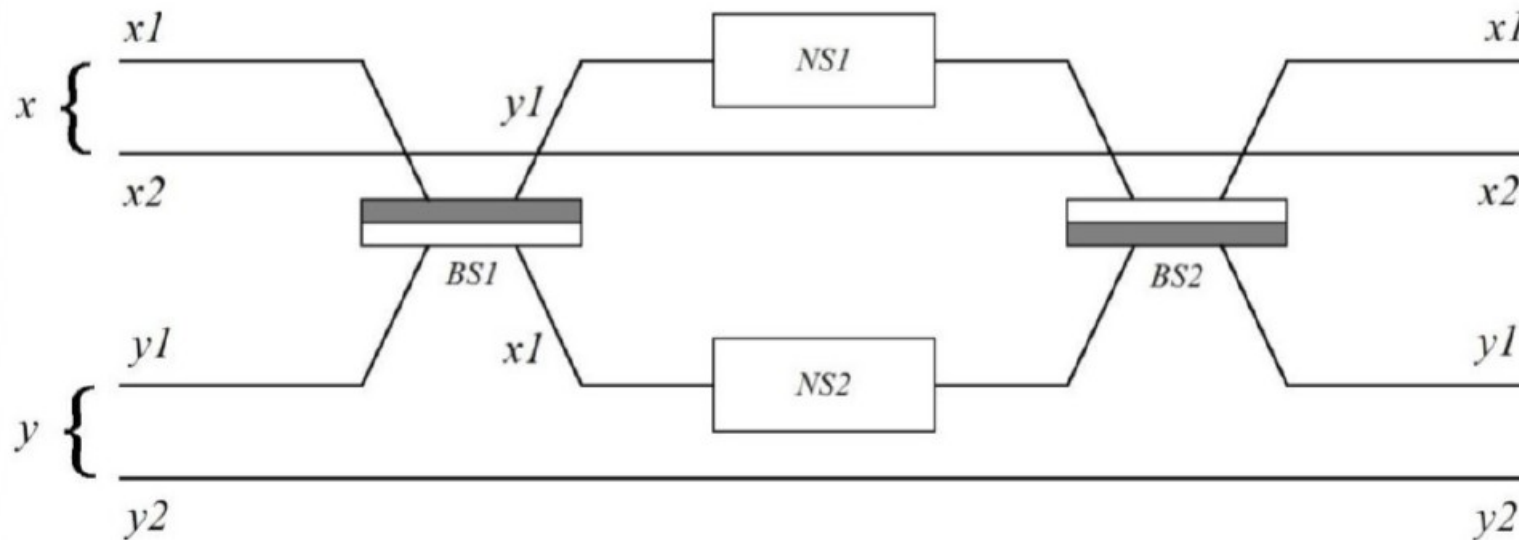


Figure 2: C-Sign gate array

$$\begin{aligned} |n\rangle_{a_1} |m\rangle_{a_2} &= \frac{1}{\sqrt{n!m!}} (a_1^+)^n (a_2^+)^m |0\rangle_{a_1} |0\rangle_{a_2} \longrightarrow \\ &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ + a_2^+) \right]^n \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ - a_2^+) \right]^m |0\rangle_{a_1} |0\rangle_{a_2} \end{aligned}$$

Квантовые алгоритмы

Быстрые квантовые алгоритмы

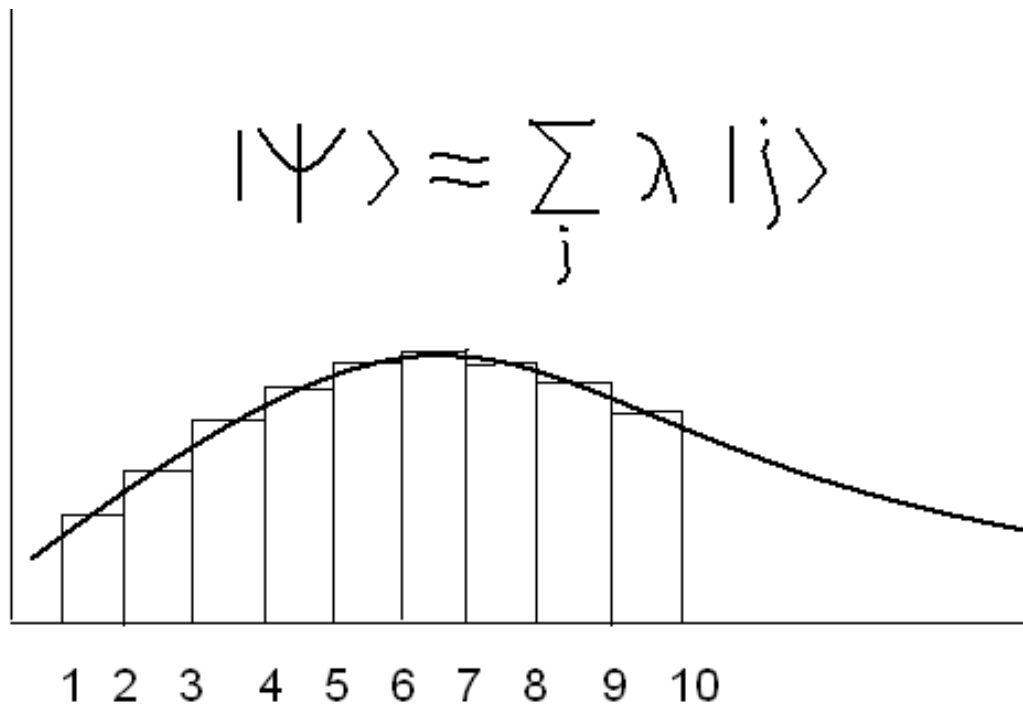
- Разложение чисел на простые множители (Peter Shor, 1994)
- Общая задача перебора (Lov Grover, 1996)

Квантовое моделирование реальных процессов

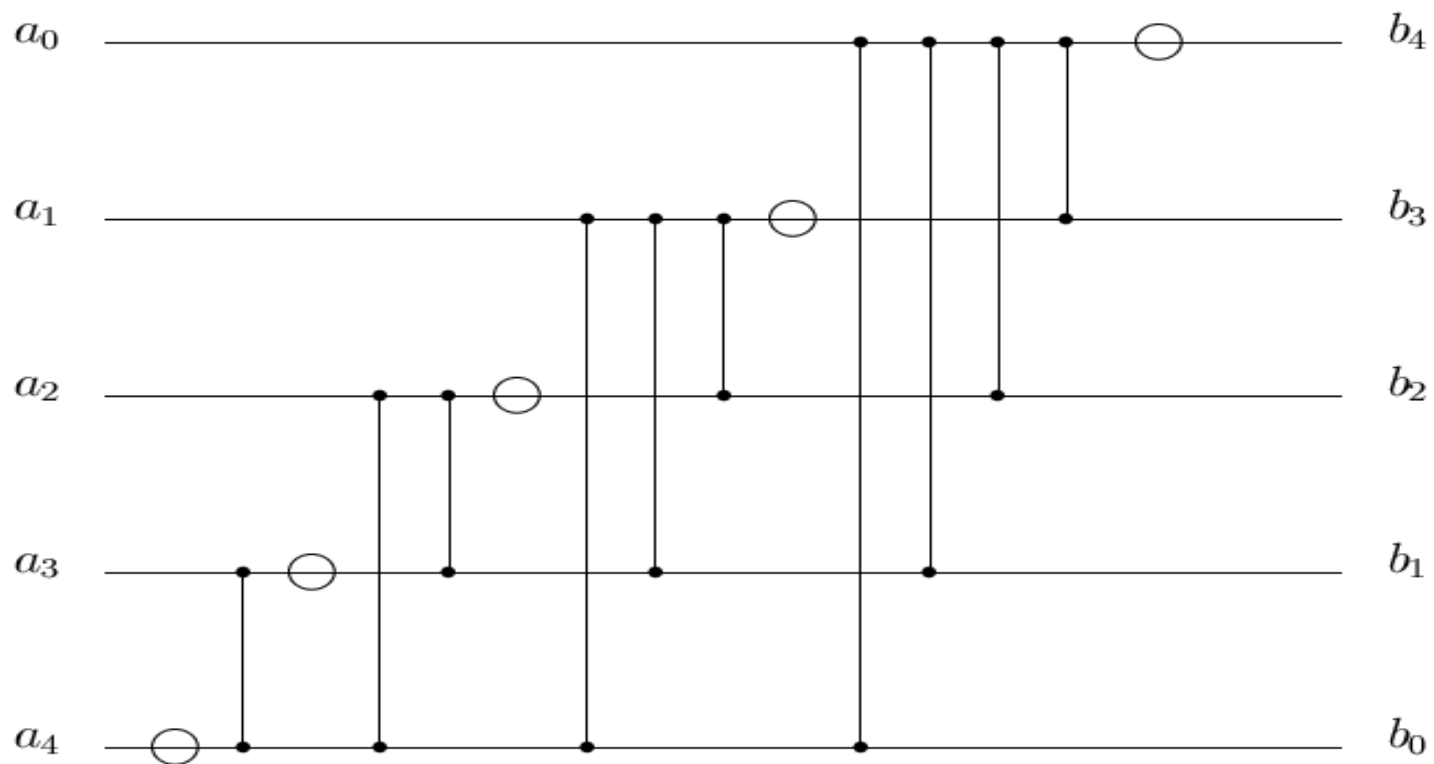
- Решение уравнения Шредингера для квантовых версий задач классической механики (Cristof Zalka, Steven Wiesner, 1999)
- Интерпретации реальных процессов в КЭД

Квантовое преобразование Фурье

$$\text{QFT} : |a\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{b=0}^{N-1} e^{-\frac{2\pi i}{N} ab} |b\rangle, \quad \text{QFT}^{-1} : |a\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{b=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i}{N} ab} |b\rangle$$



Реализация QFT⁻¹



$$U_{k,j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi/2^{k-j}} \end{pmatrix}, \quad k > j.$$

Do we understand the Life?

- Enormous complexity of living matter:

Genetically scaled computer model of living cell (GEM), by [1] illustrate the modern level in computer modelling of living; though

<C:\Users\Юрий\Desktop\Documents\biology\mmc5.mp4>

[1] J.

*Genome-Scale Reconstruction of the *Saccharomyces cerevisiae* Metabolic*

Network,

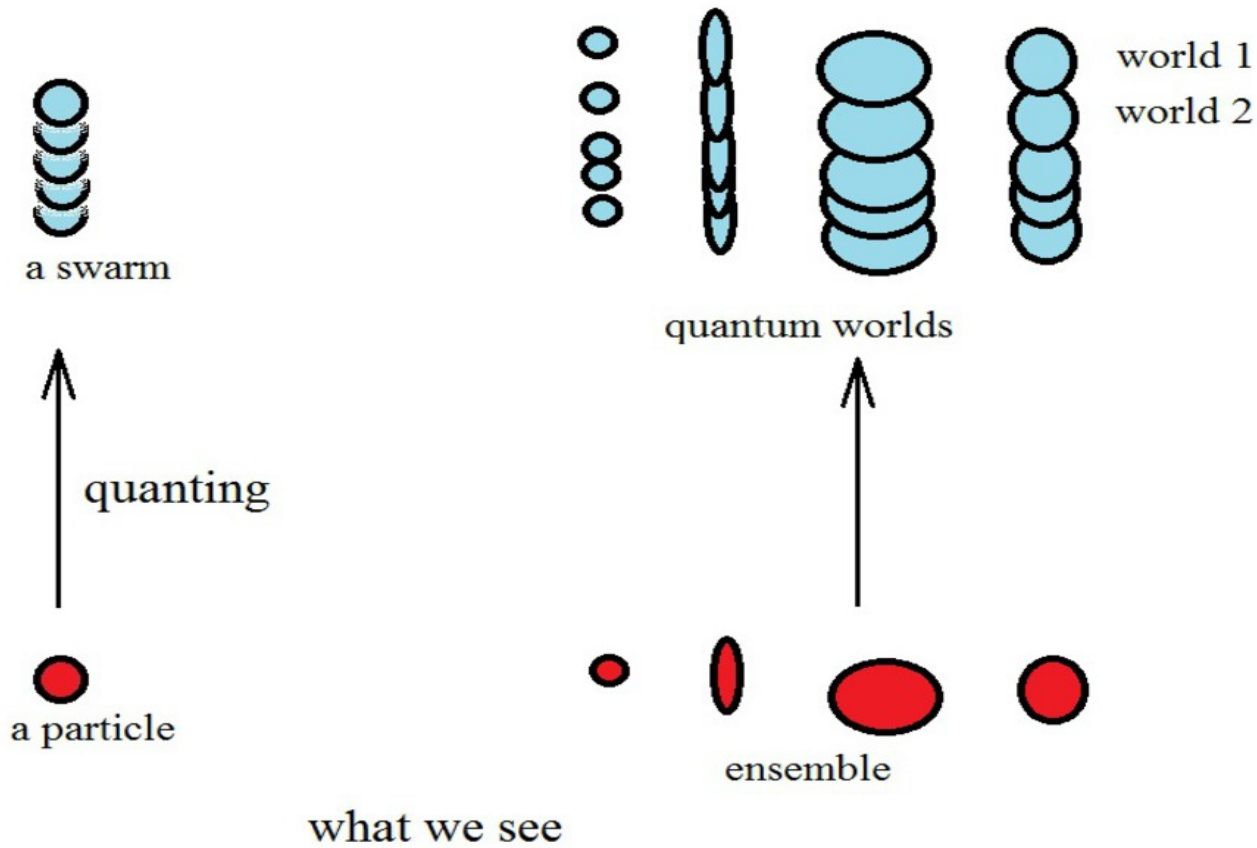
Do we understand the quantum computer?



What I cannot create, I do not understand.
(Richard Feynman)

Quantum worlds can meet in living because the Life can be realized by huge number of ways

what is



Трудности развития квантовой биологии

«Квантовые эффекты слишком хрупки и подавляются декогерентностью в живом»

H.M. Wiseman, J. Eisert, Nontrivial quantum effects in biology: A skeptical physicists' view, in "Quantum Aspects of Life", D. Abbott Ed. (World Scientific, Singapore, 2007)

Объекты биологии принципиально отличаются от физических приборов, и потому квантовая физика не может применяться в биологии так, как она применяется в химии.

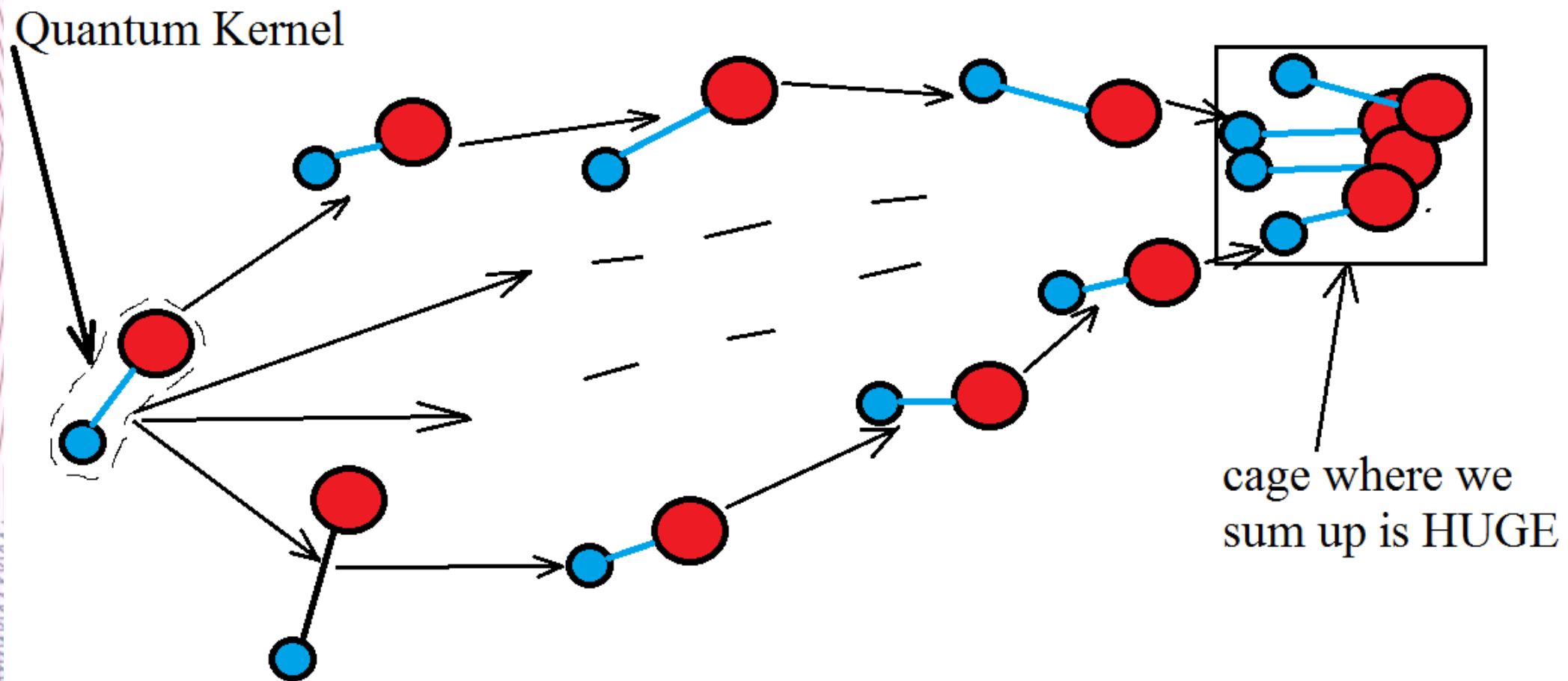
Основной проблемой является сложность

Ситуация сегодня

- *У нас нет и не будет суперкомпьютера, способного работать с массивами из 10^{30} чисел, что в современных представлениях необходимо для моделирования химических реакций из не более чем 10 частиц.*
- *Мы не знаем, необходимы ли такие требования вообще. Потому что мы не знаем, как квантовая теория работает в области сложных систем (несколько десятков кубитов).*
- *Мы должны рассматривать компьютер как физический прибор, потому что сложные системы нельзя описать одними формулами*

Quantum worlds can meet in living because the Life can be realized by huge number of ways

we have to sum amplitudes over all paths



Квантовый «эгоистический» ген

- Геном ξ должен быть аргументом био-волновой функции

$$\Psi = |\Psi| \exp(i\phi(\Psi))$$

$|\Psi(\xi)|^2$ есть относительное число существ с геномом ξ , $\nabla\phi$ - «намерение к изменению» генома

Квантовая основа жизни: возможности стандартной квантовой механики в приложении к живому

1. **Эффект DAT** (транспорт энергии, поддержанный теплом, dephasing assisted transport) — FMO светособирательный FMO-комплекс в зеленых серных бактериях

Fenna, R. E.; Matthews, B. W. (1975). "Chlorophyll arrangement in a bacteriochlorophyll protein from Chlorobium limicola". Nature 258 (5536): 573–7. Bibcode:1975Natur.258..573F. doi:10.1038/258573a0

Plenio, M., et al., "Dephasing assisted transport: Quantum networks and biomolecules", New J. Phys. 10, 113019 (2008).

2. **Магнето-рецепция птиц и насекомых**

Wajnberg, E., Acosta-Avalos, D., Alves, O.C., de Oliveira, J.F., Srygley, R.B. and Esquivel, D.M., "Magnetoreception in eusocial insects: an update". Journal of the Royal Society Interface. , 2010, 7 (Suppl 2): S207–S225.

3. **Квантовый механизм обоняния**

Horsfield, A. P.; Haase, A.; Turin, L. (2017). "Molecular recognition in olfaction". Advances in Physics: X. 2 (3): 937–977. doi:10.1080/23746149.2017.1378594

Конечномерные модели КЭД

Finite dimensional models of QED



Edwin Thompson Jaynes



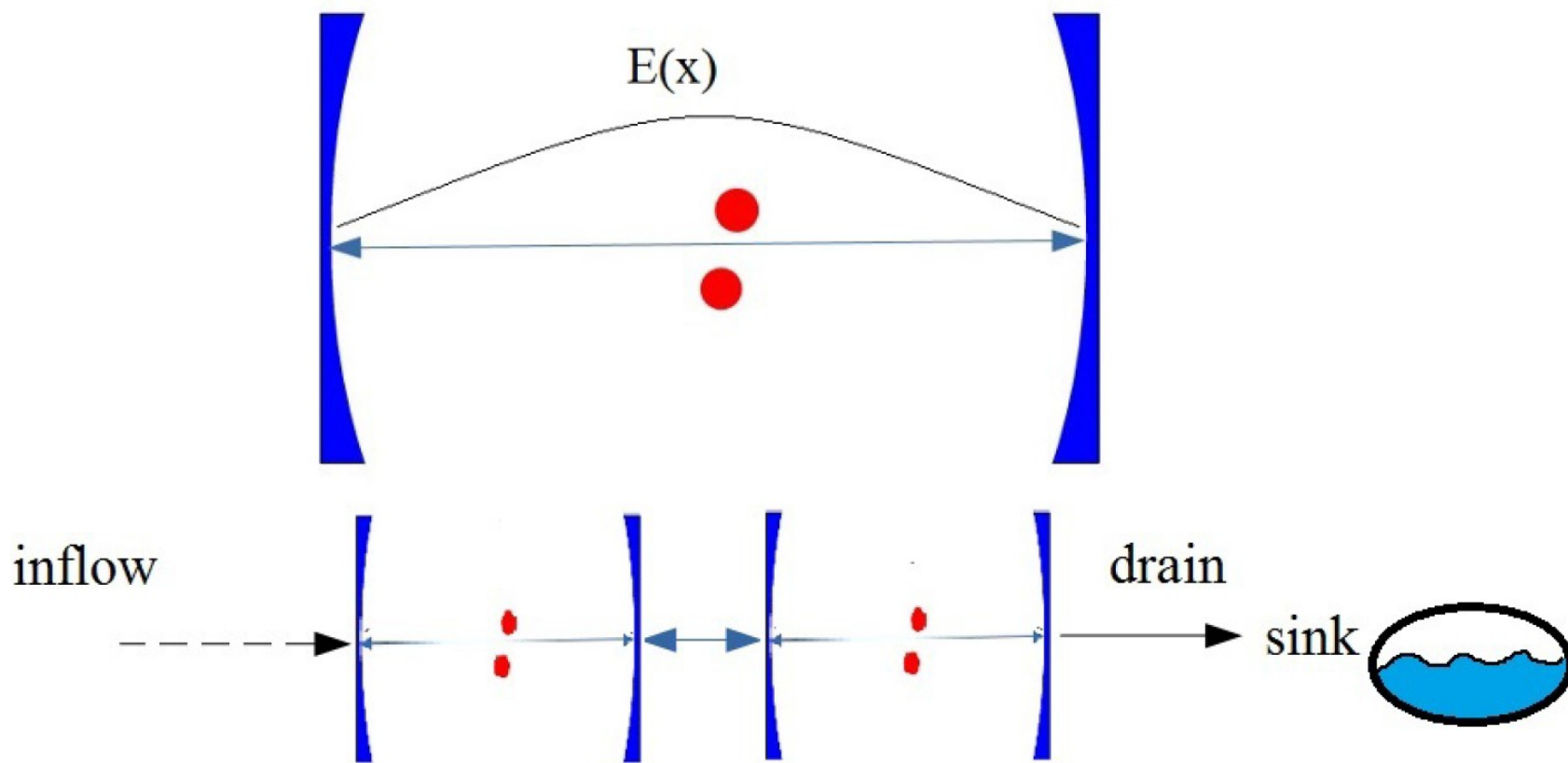
Frederick W. Cummings



Michael Tavis

Физическая реализация: оптические резонаторы, соединенные оптоволоконном

Jaynes-Tavis-Cummings-Hubbard-Dick model



One cavity with atom: Jaynes-Cummings model

Basic state: $|photon\ number\rangle|atom\ excitation\rangle$, photon number can be $0, 1, \dots, n, \dots$; atom excitation can be $0, 1$ (two level atom).

Photonic operators a^+ , a - creation and annihilation of a photon - act on the first component, atomic operators σ^+ , σ - act on the second component.

Definition:

$$\begin{aligned} a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \sigma^+|m\rangle &= (m \oplus 1)|m \oplus 1\rangle, \quad \sigma|m\rangle = m|m \oplus 1\rangle : \\ \sigma^+|0\rangle &= |1\rangle, \quad \sigma^+|1\rangle = 0, \quad \sigma|0\rangle = 0, \quad \sigma|1\rangle = |0\rangle \end{aligned}$$

Basic atomic states representation:

$$|0\rangle_a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle_a = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

One cavity with atom: Jaynes-Cummings model

Basic photonic states representation:

$$|0\rangle_p = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |1\rangle_p = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots$$

Representation of atomic operators:

$$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, a^+a = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Commutative relations:

$$a^+a = aa^+ - 1, \sigma^+\sigma = 1 - \sigma\sigma^+$$

One cavity with atom: Jaynes-Cummings model

Representation of photonic operators:

$$a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix},$$

$$a^+ a = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, a^+ a |n\rangle_p = n |n\rangle_n.$$

One cavity with atom: Jaynes-Cummings model

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

$g = \sqrt{\omega\hbar/V} E(x)|d|$, V - effective volume of the cavity, d - dipole momentum of transition $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$. It coincides with experiments if

- 1) $\omega_{a,c} \ll 1/d$, where d is the size of atom (the necessary condition of dipole approximation, which allows the representation of interaction in the form $X_{field} X_{atomic\ excitation}$) and
- 2) $\omega_a \approx \omega_c$ - the condition of long retention of a photon in the cavity. Factually, the half of the wavelength of the photon emitted by the atom must be a divisor of the cavity length.

In electrodynamics the field is divided to modes. A mode is a couple $(\vec{p}, \vec{\epsilon})$ - two orthogonal vectors: the vector of impulse and the vector of polarization. One mode is the harmonic oscillator of electric field directed along the polarization; here one mode operators of creation annihilation look as $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$, $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip)$, $\hbar = 1$, and the "field coordinate" $X_{field} = q = (a^+ + a)/\sqrt{2}$. Analogously, "atom excitation coordinate" looks as $X_{atomic\ excitation} = \sigma^+ + \sigma$. Because every interaction between systems with coordinates x, y can be expended to the power series, its first summand xy (dipole approximation) gives H_{JC} .

Rotating wave approximation

H_{JC} Hamiltonian is infinite and its investigation is hard.

If $g \ll \hbar\omega$ we can omit the summands $a^+\sigma^+$ and $a\sigma$ in Hamiltonian, which do not conserve energy themselves and obtain the rotating wave approximation (RWA):

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

The space of states then splits into mutually orthogonal and invariant with respect to H_{JC}^{RWA} two dimensional subspaces \mathcal{H}_k , each spanned by the pair of states:

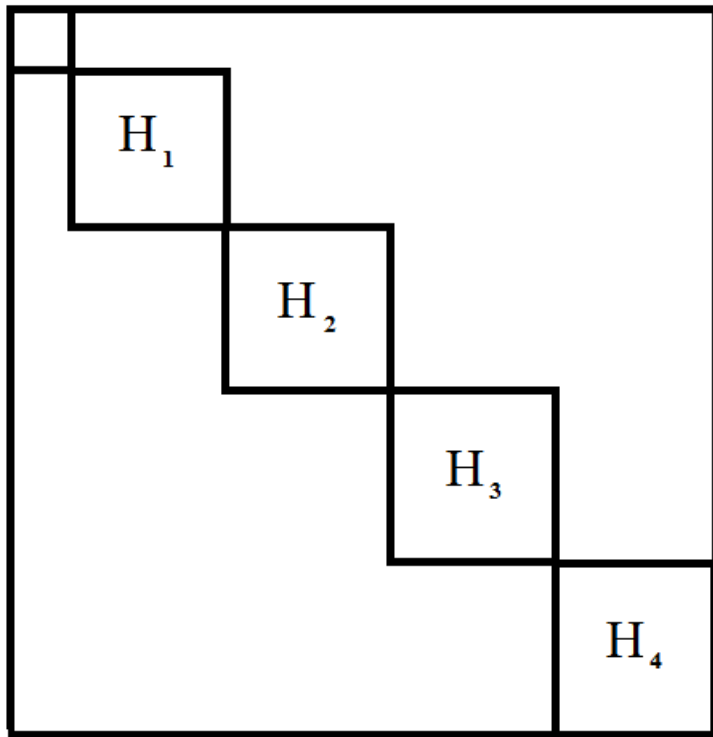
$|\psi_0^k\rangle = |0\rangle_p |k\rangle_a$, $|\psi_1^k\rangle = |1\rangle_p |k-1\rangle_a$. The reduction of H_{JC}^{RWA} to \mathcal{H}_k will be

$$H_k = \begin{pmatrix} k\hbar\omega_c & g\sqrt{k} \\ g\sqrt{k} & \hbar(\omega_a + (k-1)\omega_c) \end{pmatrix}.$$

Quantum evolution in \mathcal{H}_k induced by H_k is the harmonic oscillations between $|\psi_0^k\rangle$ and $|\psi_1^k\rangle$ with frequency $\Omega_k = \sqrt{\delta^2 + 4g^2 k}/\hbar$, $\delta = \omega_a - \omega_c$ is detuning between frequencies of atom and cavity.

Важность приближения вращающейся волны

RWA — важнейший прием, позволяющий радикально редуцировать размерность пространства состояний:



здесь оно распадается в прямую сумму пространств малой размерности, инвариантных относительно RWA: приближения оператора энергии:

$$H = H_0 + H_1 + \dots + H_n + \dots$$

Для точного гамильтониана такого разложения нет, и работать надо с пространством а-приори не ограниченной размерности.

Open quantum systems: quantum master equation

An open quantum system is described by the quantum master equation (Lindblad, Kossakowsky, Glauber, Sudarshan):

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] + i \sum_{i=1}^{N^2-1} \gamma_i (A_i \rho A_i^* - \frac{1}{2} (A_i^* A_i \rho + \rho A_i^* A_i)) \quad (1)$$

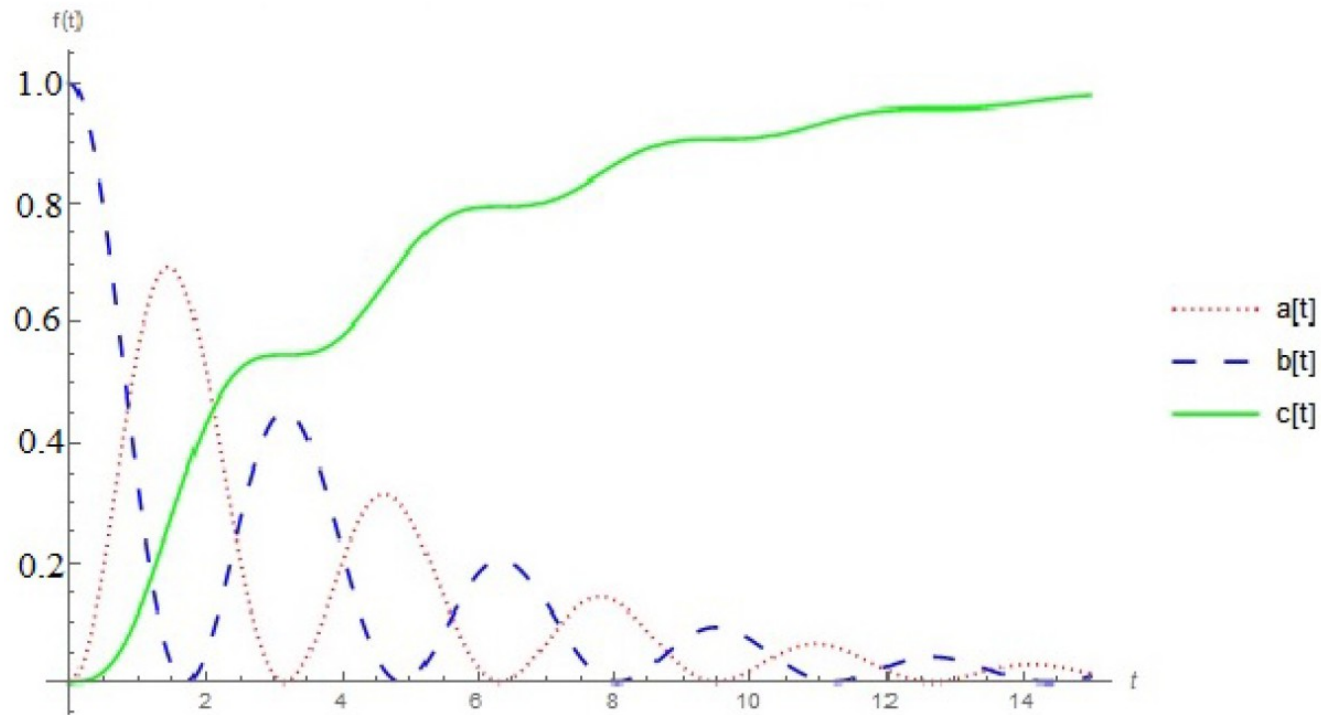
Liouville operator space \mathcal{L}_N of matrices $N \times N$ - Euclidean space with dot product $\langle A|B \rangle = \text{tr}(A^* B)$.

$I, A_1, A_2, \dots, A_{N^2-1}$ must form the orthonormal basis in \mathcal{L}_N , $g_i \geq 0$ are their intensities. Each A_i is the factor of decoherence.

Relaxation of one atom in cavity

$\gamma = 4g$ is the border of oscillations.

Figure: Density matrix dynamics for $\gamma = 0.5, g = 1$.



Transfer of atomic excitation along the chain of cavities

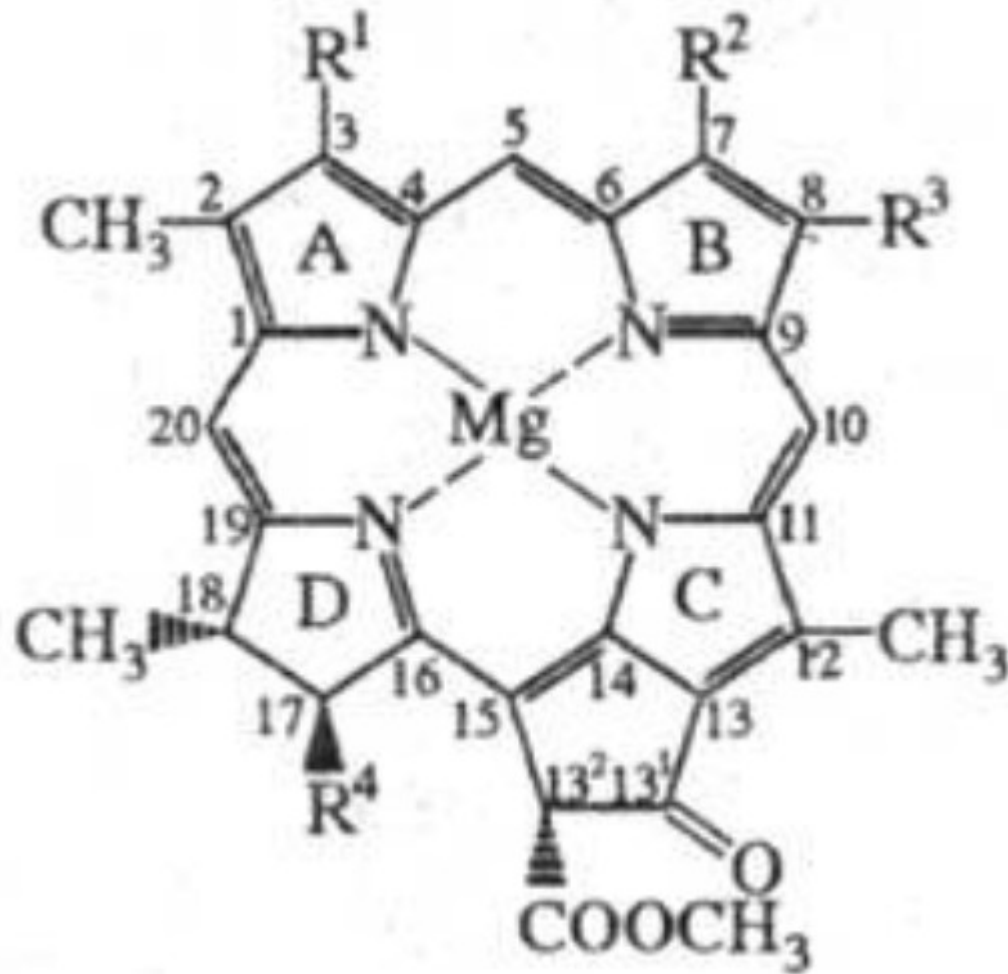
Hamiltonian of TCH model:

$$H_{TCH} = \sum_i \hbar\omega_c a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j} \hbar\omega_a^{ij} \sigma_{ij}^+ \sigma_{ij}^- + k \sum_i (a_{i+1}^\dagger a_i + a_i^\dagger a_{i+1}) + \sum_{i,j} \mu_{ij} (a_i + a_i^\dagger) (\sigma_{ij}^+ + \sigma_{ij}^-) \quad (2)$$

Effect of thermal phonons:

$$H = H_{TCH} + H_B + H_I, \quad H_B = \sum_{m,k} E_{mk} b_{mk}^\dagger b_{mk},$$
$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{i,k,j} \sqrt{S_{ikj}} \omega_k (b_{ik}^\dagger + b_{ik}) \sigma_{ij}^+ \sigma_{ij}^- + h.c. \quad (3)$$

Example of quantum effect: conductivity of excitations by a chain of bacteriochlorophyll molecules



Fenna-Matthews-Olson complex in bacterial cell (from S.F.Huelga, M.B.Plenio, arXiv1307.3530)

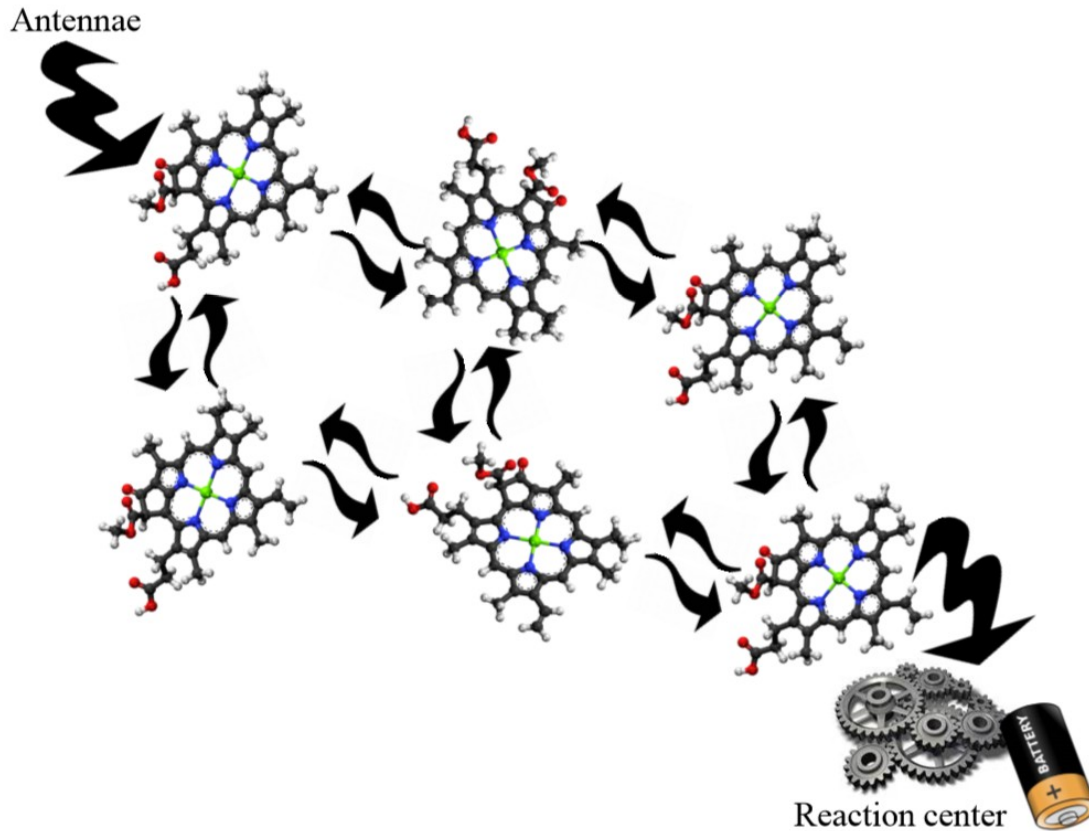


FIG. 3. A schematic picture of the transport network such as the one realized in the Fenna-Matthews-Olson complex. Molecules, such as Bacteriochlorophyll a (BChla), are arranged in space giving rise to specific distances and relative orientations between individual BChla thereby adjusting the strength of the dipolar interaction (indicated by black arrows)

Conductivity in FMO complex of bacteriochlorophyll molecules

(Fenna, R. E.; Matthews, B. W. (1975). "Chlorophyll arrangement in a bacteriochlorophyll protein from *Chlorobium limicola*". *Nature* 258 (5536): 573–7. Bibcode:1975Natur.258..573F. doi:10.1038/258573a0)

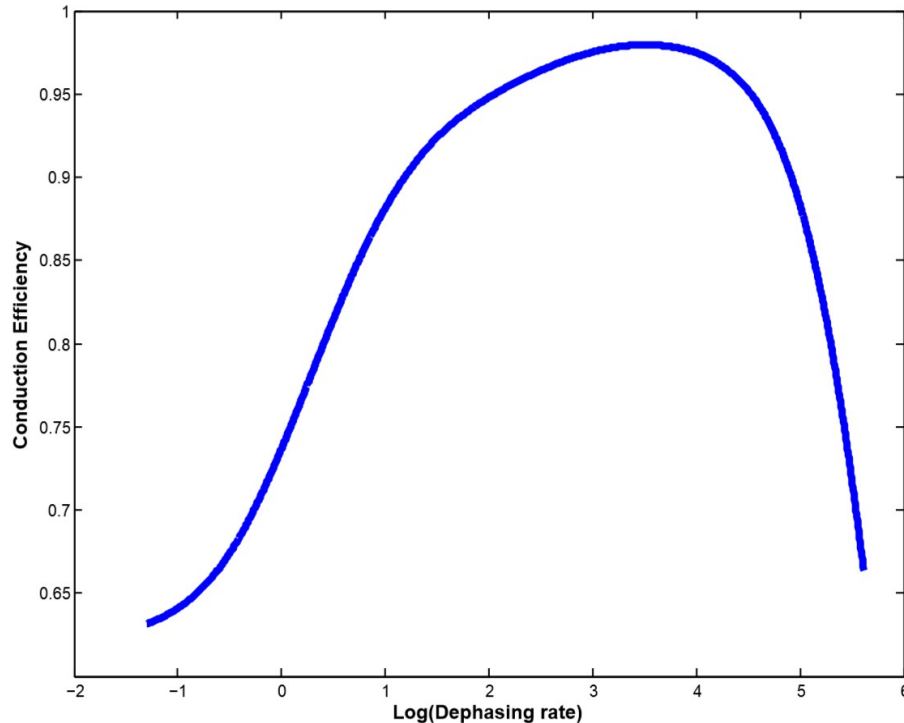


FIG. 4. Plot of the conductivity of the FMO complex where excitations enter the FMO complex at site 1 and exit at site

Dephasing-assisted transport, DAT

2 atoms

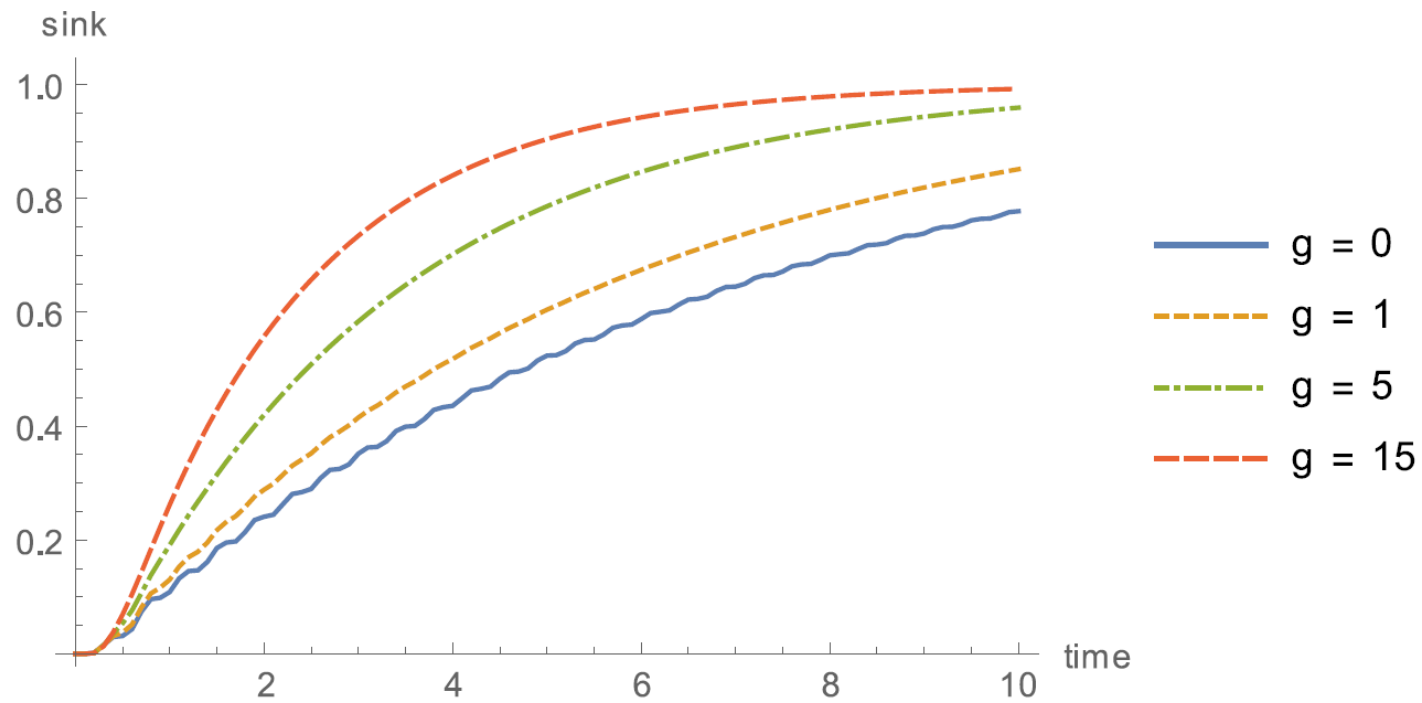
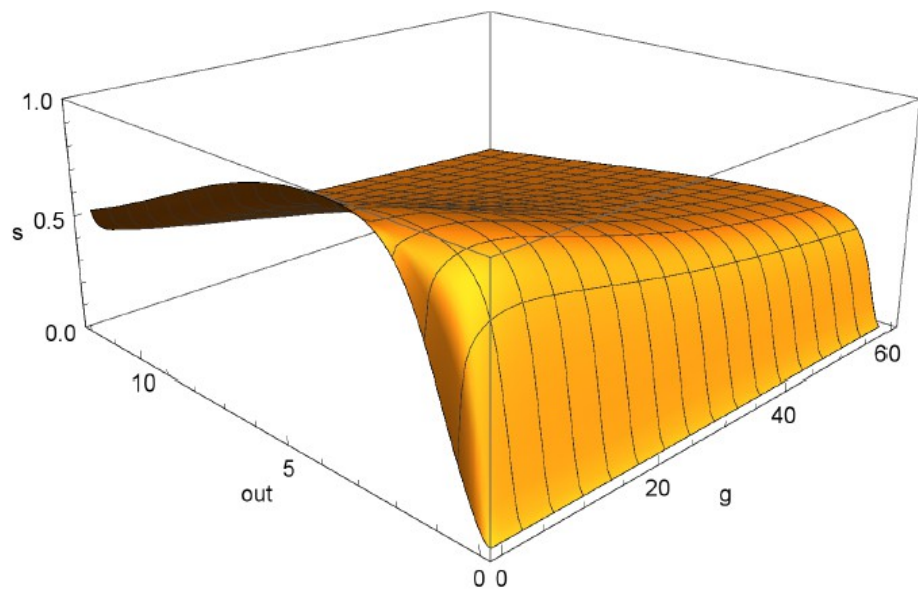
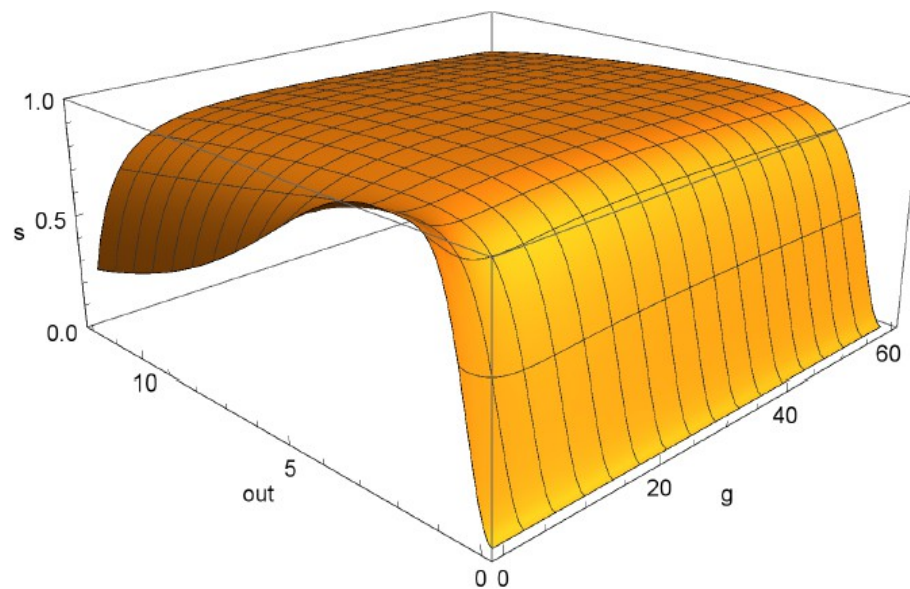


Figure: Evolution of states of the sink in time. $N_{atoms} = 2$, $k = 2$, $\mu = 8$, $out = 15$. No input.

Эффекты DAT и quantum bottleneck



$$\mu = 2, k = 8, time = 15$$



$$\mu = 8, k = 2, time = 6$$

FIG. 6. The state of sink at the fixed time, Lindblad-based dephasing. Two atoms, no input (initial state has a photon in the first cavity). Dependency over the output rate out and the dephasing coefficient g .

Квантовое бутылочное горлышко

Контр-интуитивный феномен: при усилении утечки фотонов из полости они начинают медленнее ее покидать.

Quantum bottleneck

Dependence of conductivity on the intensity of input and output

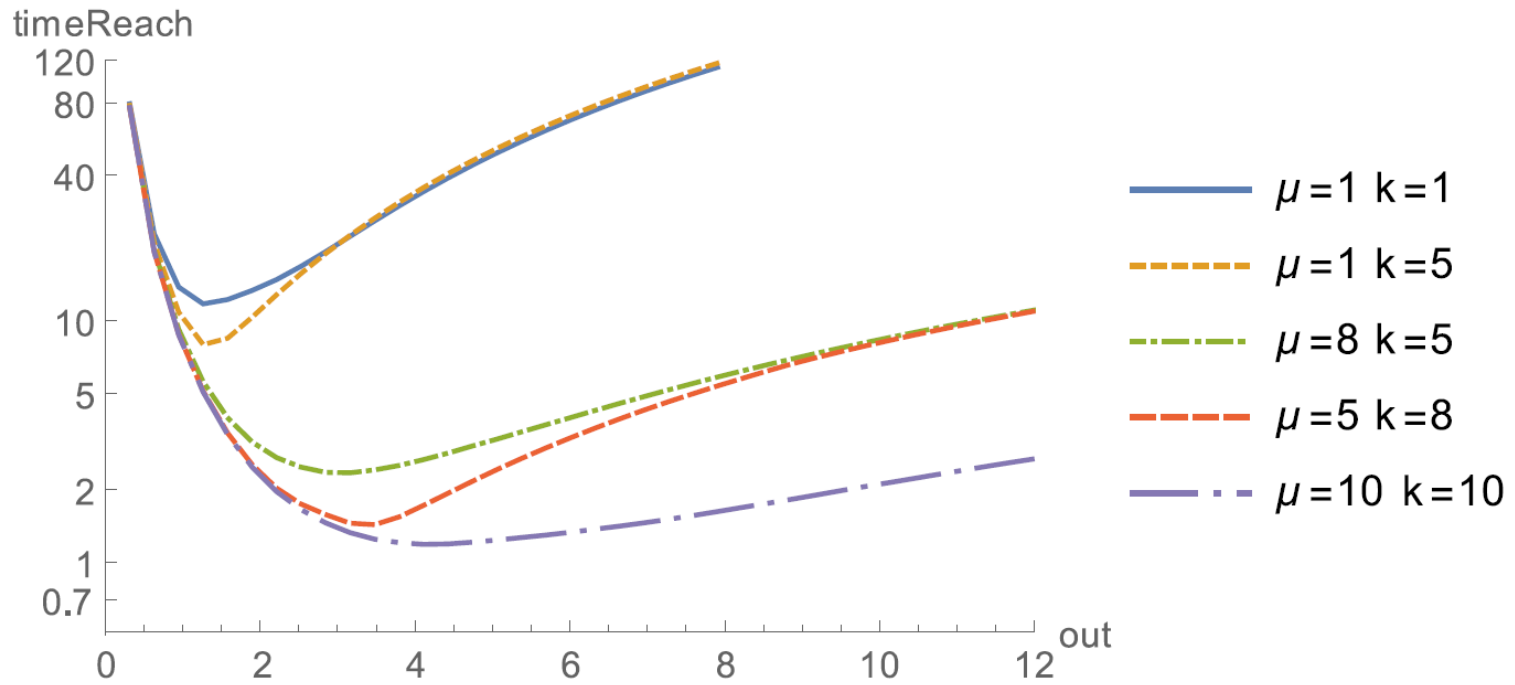
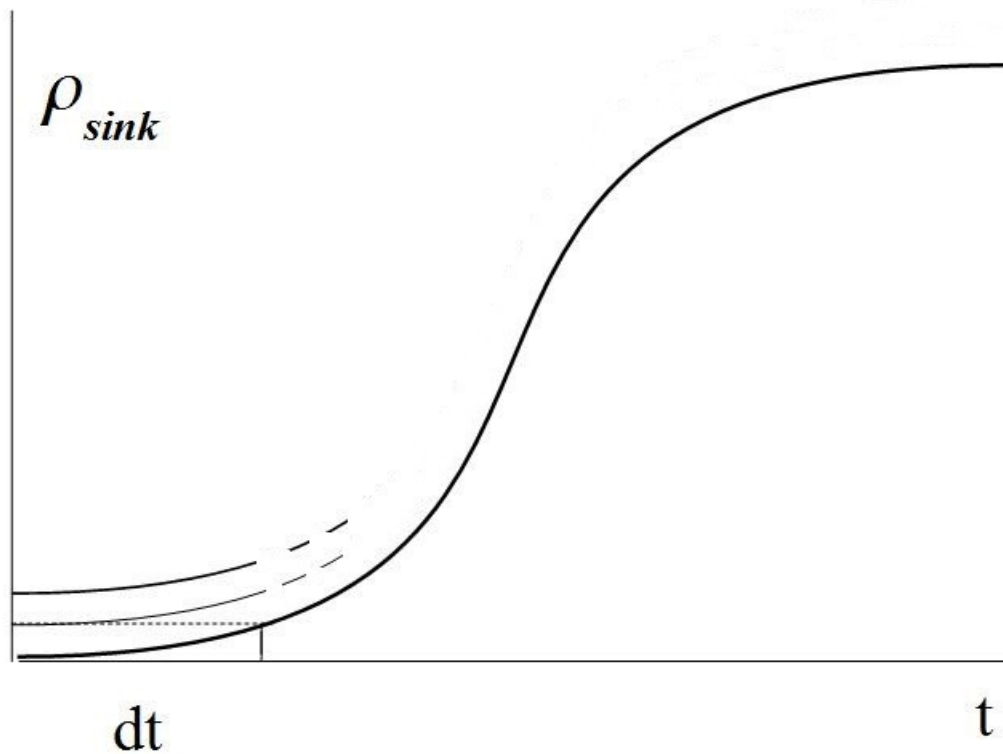


Figure: The time of sink filling to $s = 0.995$ for the chain of two atoms

Механизм квантового бутылочного горлышка

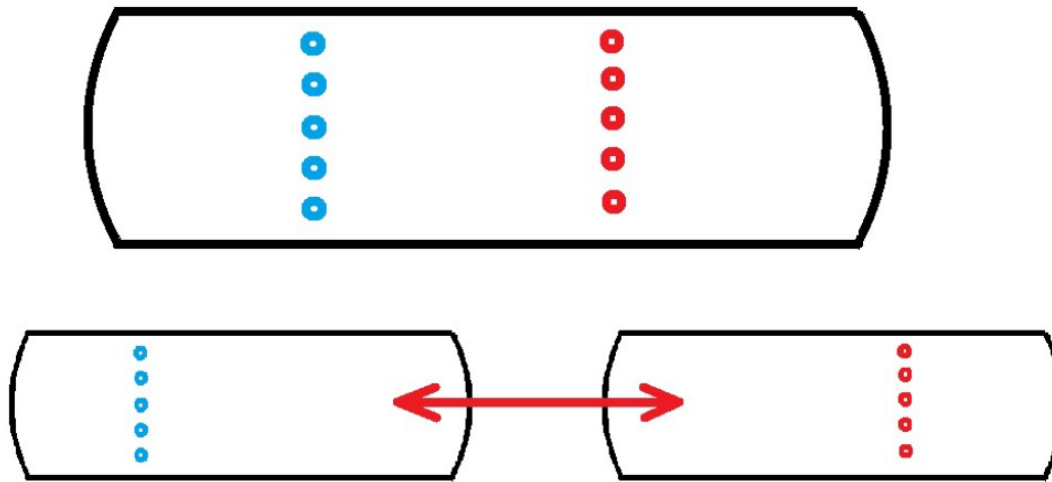
dt обратно пропорционально интенсивности стока. Населенность стока нарастает порциями второго порядка малости по dt



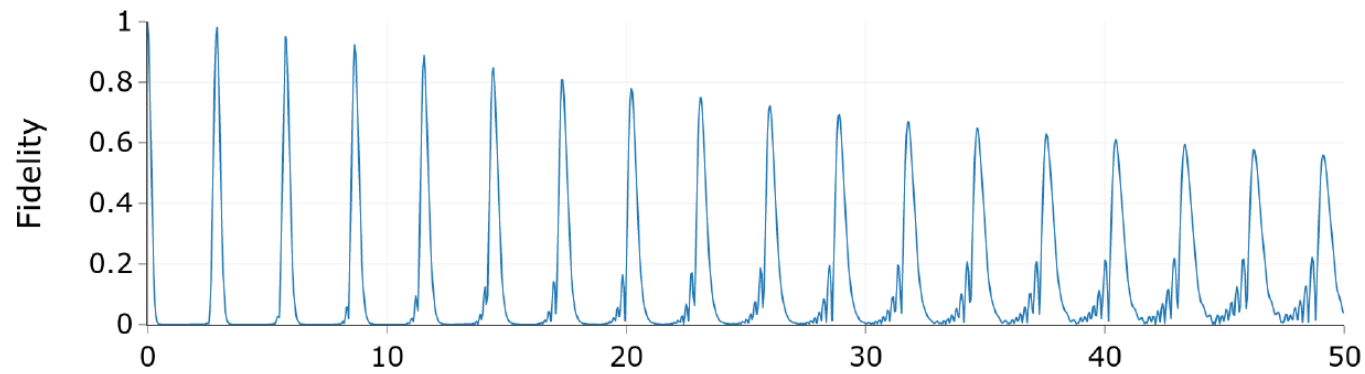
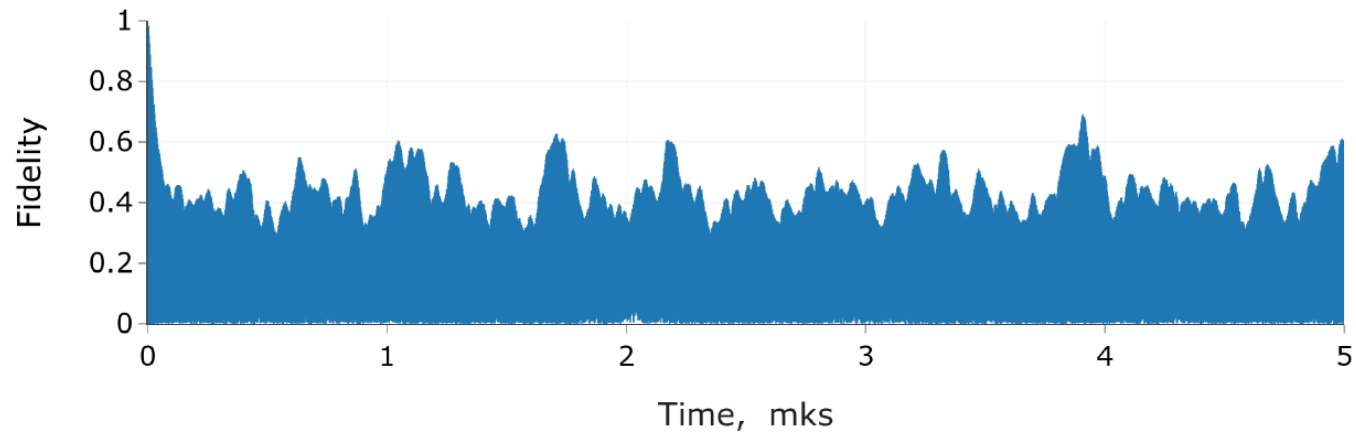
Ensemble Rabi oscillations in one cavity

$|L\rangle_{ph}|00\dots 0\rangle_1|11\dots 1\rangle_2 \leftrightarrow |L\rangle_{ph}|11\dots 1\rangle_1|00\dots 0\rangle_2$ - ensemble oscillations.

Figure: Oscillation of ensemble type in one and two cavities



Ensemble Rabi oscillations in one cavity



Ensemble Rabi oscillations in one and two cavities 3D picture

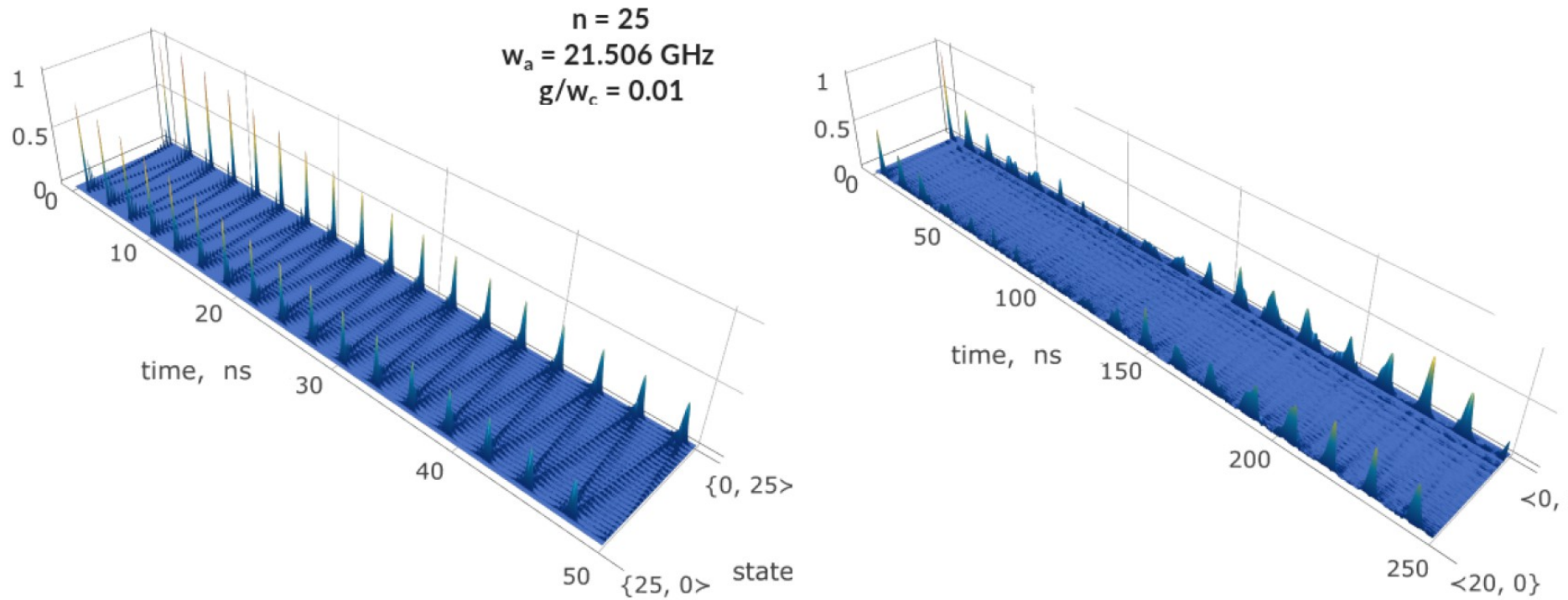


Figure: 3D picture of oscillations in one cavity and in two cavities

Relaxation of ensemble oscillations

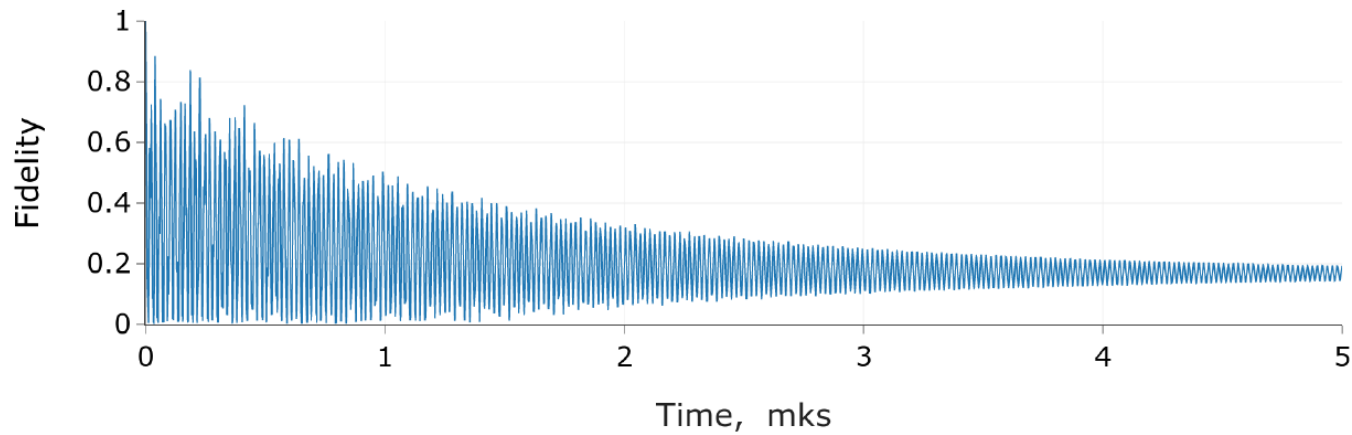
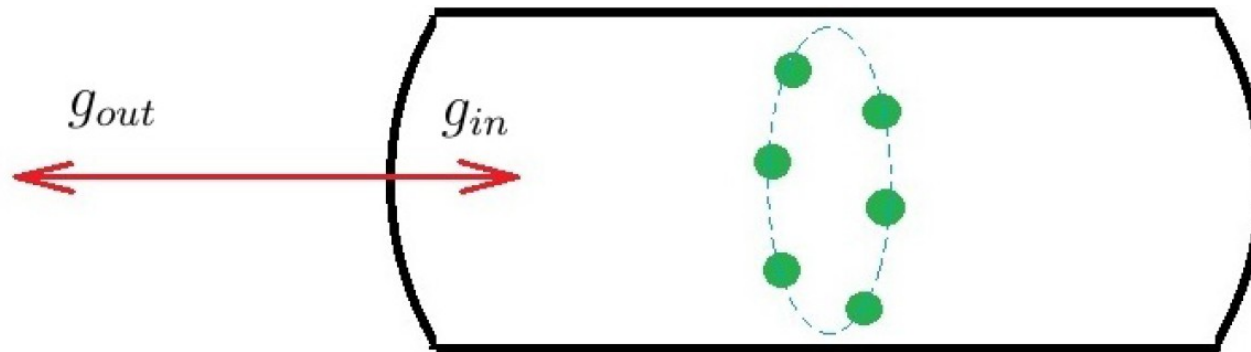


Figure: Error rates over detuning and photon leakage for the optimal cases with desired detuning.

Photon environment as thermal bath



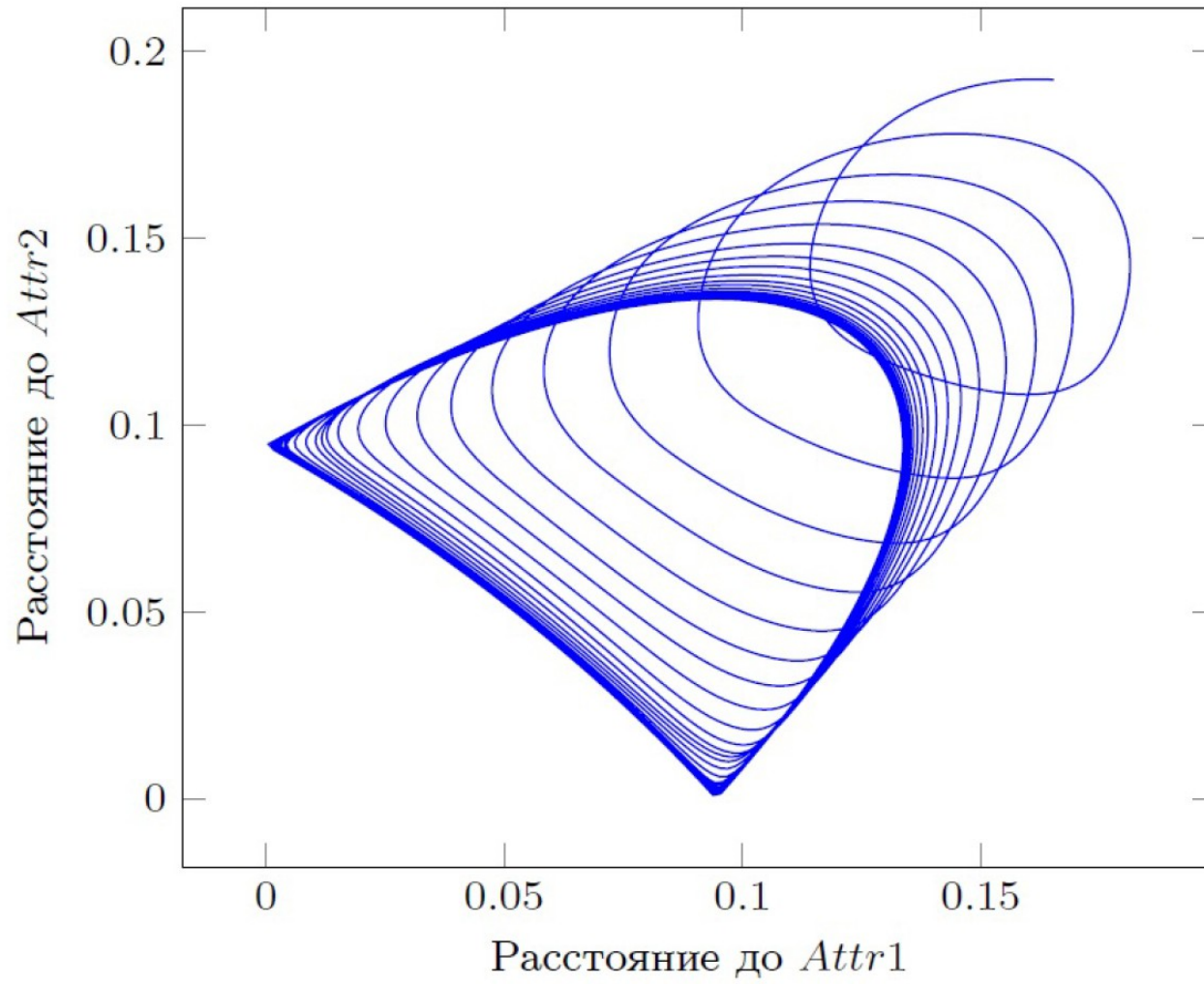
$$H_{TC}^{RWA} = \hbar\omega a^\dagger a + \sum_{j=1}^n \hbar\omega \sigma_j^+ \sigma_j + \sum_{j=1}^n g_j (\sigma_j^+ a + \sigma_j a^\dagger)$$

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] + iL(\rho), \quad L = L_{in} + L_{out},$$

$$L_{in} = g_{in}(a^\dagger \rho a - \frac{1}{2}\{\rho, aa^\dagger\}), \quad L_{out} = g_{out}(a \rho a^\dagger - \frac{1}{2}\{\rho, a^\dagger a\})$$

Figure: Cavity in photon bath: Hamiltonian and quantum master equation

Attractor for two atoms

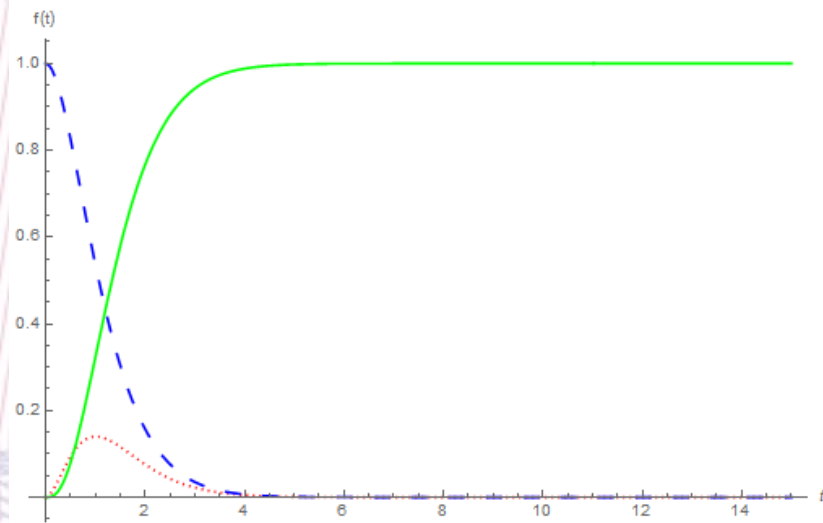


Парадоксальная зависимость населенности стока от его интенсивности

Интенсивность стока

3.9

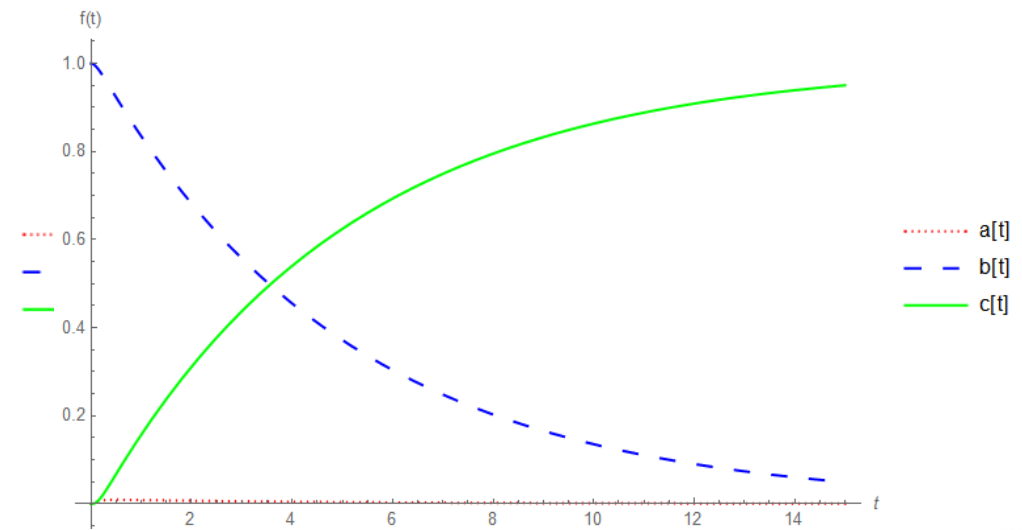
```
Plot[{a[t, 3.9, 1, 1], b[t, 3.9, 1, 1], c[t, 3.9, 1, 1]}, {t, 0, 15},  
  AxesLabel -> {t, "f(t)"},  
  PlotStyle -> {{Dashing[Tiny], Red}, {Dashing[Large], Blue}, {Normal, Green}},  
  PlotLegends -> {"a[t]", "b[t]", "c[t]"}, ImageSize -> 500]
```



Интенсивность стока

20

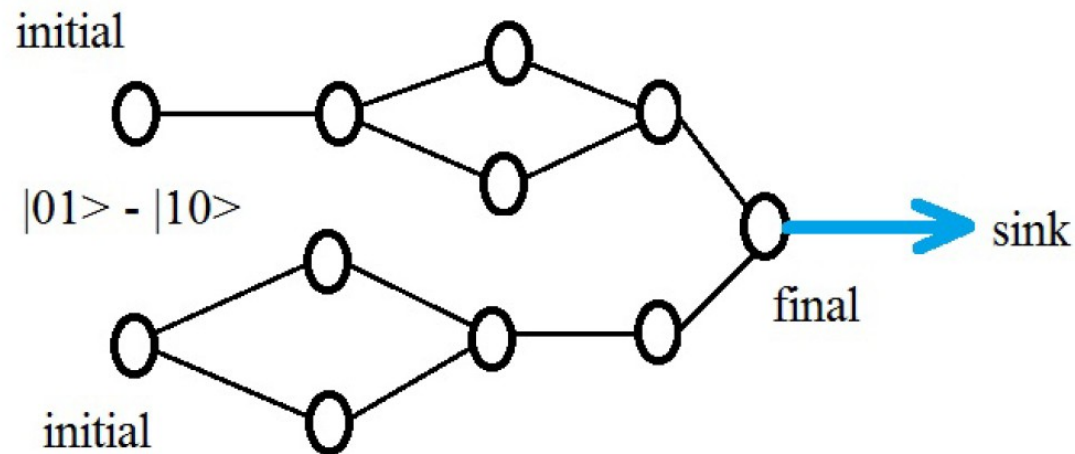
```
Plot[{a[t, 20, 1, 1], b[t, 20, 1, 1], c[t, 20, 1, 1]}, {t, 0, 15}, AxesLabel -> {t, "f(t)"},  
  PlotStyle -> {{Dashing[Tiny], Red}, {Dashing[Large], Blue}, {Normal, Green}},  
  PlotLegends -> {"a[t]", "b[t]", "c[t]"}, ImageSize -> 500]
```



Dark photonic states

If two graphs G_1 and G_2 have the same optical conductivity, we can glue their final vertices and obtain the joint graph, which holds "dark photonic state" $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ that gives zero conductivity $|\langle \Psi(t) | final \rangle|^2 = 0$. It involves the not complete drain to the sink for initial state $|01\rangle$.

Figure: Joint graph with dark photonic states



Темные состояния ансамблей двух- уровневых атомов

- Темное состояние атомов – находящийся в нем ансамбль не может испустить свет
- Пример темного состояния: синглет

$$|s\rangle = |01\rangle - |10\rangle$$

- Любое темное состояние есть суперпозиция состояний вида $|s_{ij}\rangle$
 $|s_{i'j'}\rangle$ $|s_{i''j''}\rangle \dots$
- Размерность темного подпространства ансамбля $2n$ атомов равна

$$C_{2n}^n - C_{2n}^{n-1}$$

- Темное подпространство свободно от декогерентности.

Получение темных состояний

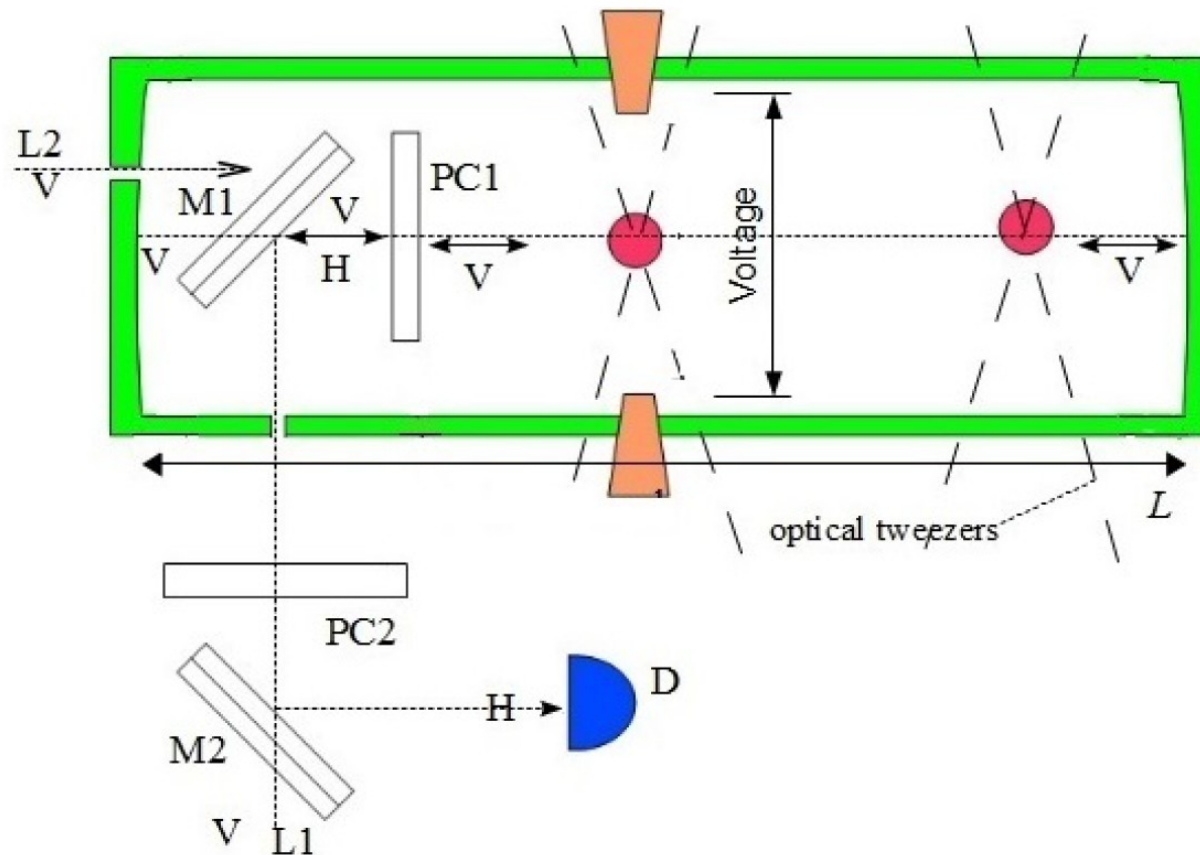


Figure 1. Preparation of dark singlet in optical cavity. Initially, Pockels cells PC1 and PC2 are both switched on. Photon flies from Laser L1 with vertical polarization V , changes polarization to H after PC2, reflects from the mirror M1 and change its polarization to V after PC1. Then PC1 must be switched off before photon comes back reflecting from the right wall of cavity. Photon will then be locked inside the cavity. After an arbitrary time frame PC1 switches on again and photon changes the V polarization back to H , passes through PC2, which is switched off, reflects from M2 and comes to detector D . Alternative way: photon comes from laser L2 with V polarization and becomes locked in the cavity, then PC1 switches on, and photon comes to detector; PC2 is not needed. Figure is taken from the paper.¹²

Еще один метод получения темного состояния

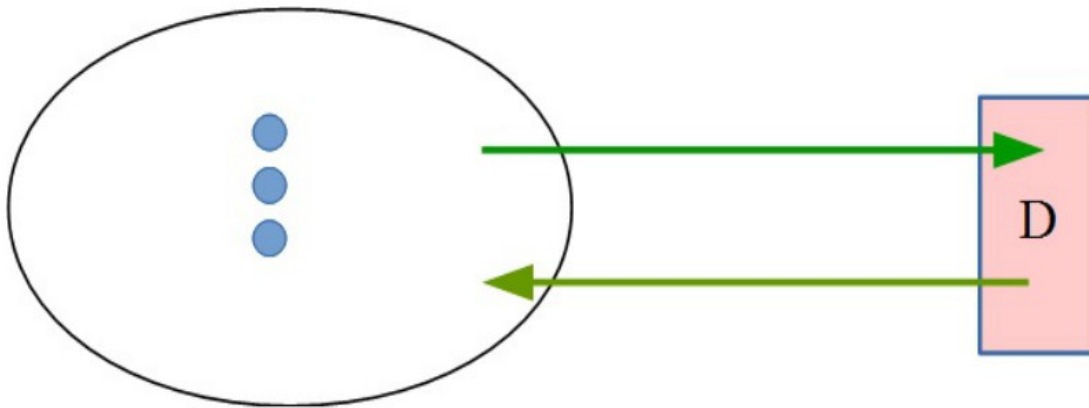


Рис. 1: Оптический отбор. Линдбладовский оператор $L_1 = a^+a$ - улет фотона и возврат его обратно в полость после прохождения через детектор. Детектор щелкает всякий раз, когда в него попадает фотон.

Если первоначальное состояние атомов $|01\rangle$ и детектор молчит, у нас есть темный синглет $|01\rangle - |10\rangle$ в полости. **Сам факт наблюдения меняет квантовое состояние!**

Для произвольного начального состояния атомов - после того, как детектор замолчит, в полости будет состояние $|00\rangle$ или темное.

Для их различения находим среднее время вылета из полости запущенного туда фотона: для $|00\rangle$ оно будет заметно больше, чем для темного из-за взаимодействия с атомами. Это можно выявить статистически.

Безопасный доступ на темных состояниях

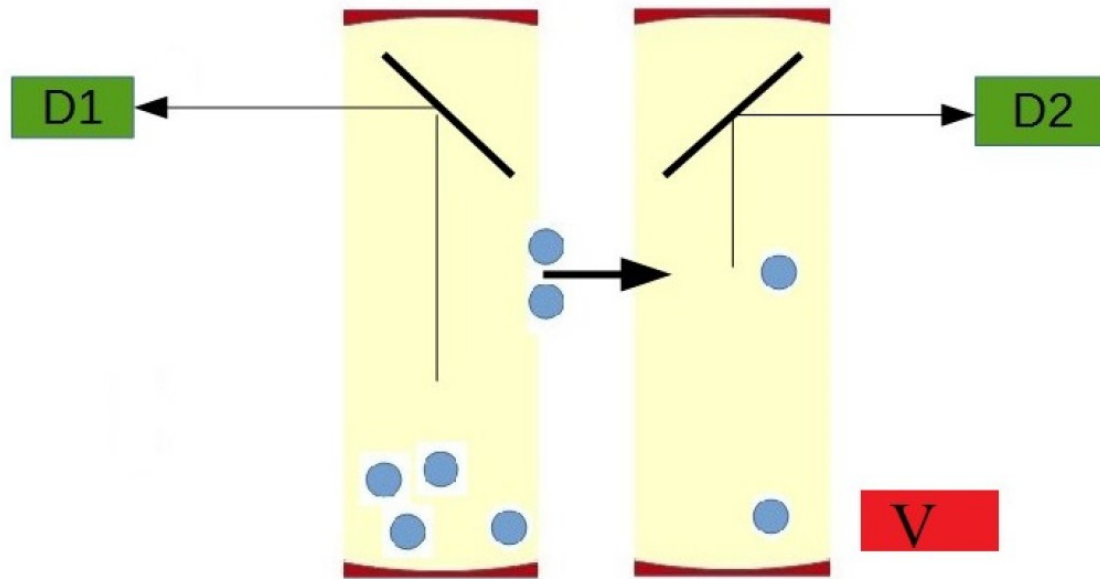


Figure 2. Verification of the password for the quantum lock. The sequential pair is moving to the controlling cavity. One from the detectors must click if this pair does not match to the right password.

In the case when the pair a_i, b_i is wrong, the probability of the photon emission by atoms a_i (or b_i) is $1/2$. If they emit a photon in the time when they are between cavities, this photon will not be detected; but if the emission takes place inside the controlling cavity, it hits detector $D2$. In all cases when the pair a_i, b_i is wrong a photon appears; it passes by detectors only if it was emitted between cavities. In the last case the fact of emission can be checked subjecting the pair trapped in the controlling cavity by the action of non uniform potential causing Stark shift of atomic frequency that shows the excitation of one of atoms a_i, b_i ; if these atoms are in the groundstate the current pair is considered as wrong.

Принципиальная трудность проекта «Квантовый компьютер» - сложность

Нам предстоит преодолеть барьер вычислительной сложности: представить состояние в пространстве размерности 10^{30} на реальных вычислительных машинах, возможно, с отдельными квантовыми элементами.

Конечное значение константы Q дает надежду сделать это.

Каким именно образом это реализовать, неизвестно.

Темы магистерских и кандидатских работ

1. Химический квантовый компьютер. Моделирование фрагментов его работы на классическом суперкомпьютере
2. Использование квантового дальнего действия в распределенных вычислениях
3. Интерпретация биологических процессов: кроссинговер одиночных цепочек ДНК, проведение нервного импульса - в химическом квантовом компьютере.
4. Интерпретация ядерных процессов: ХЯС, деление тяжелых ядер - в химическом квантовом компьютере.