



Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики
Кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики

Ли Ваньшунь

Модель ассоциации - диссоциации молекулы на химическом
квантовом компьютере

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Научный руководитель:
д.ф-м.н., профессор
Ю.И.Ожигов

Москва, 2021

Содержание

1	Введение	2
2	Постановка задачи	3
3	Конечномерные модели КЭД	4
3.1	Модель Тависа-Каммингса(ТС)	4
3.2	Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда(ТСН)	7
4	Моделирование квантового гейта coCsign	8
4.1	Схема модели	8
4.2	Компьютерное моделирование	10
4.3	Результат моделирования	11
5	Ассоциация-диссоциация молекулярного иона водорода H_2^+	14
5.1	Компьютерное моделирование	18
5.2	Решение Квантового основного уравнения	20
5.3	Результаты Моделирования	23
6	Заключение	25
7	Приложение	26

1 Введение

Квантовое моделирование квантовой химии является одним из самых привлекательных приложений квантовых вычислений в последнее время. Это особенно важно в таких областях, как материаловедение, биохимия и физика конденсированных сред. Здесь мы предлагаем модель для описания химии.

Квантовая химия изучает химическую систему с использованием квантовой механики. Одним из основных направлений квантовой химии является расчет молекулярных энергий и электронных структур химической системы, которые определяют ее химические свойства.

Химический квантовый компьютер основан на атомах в системе оптических полостей, соединенных волноводами. Приводится формализм описания химии с помощью модифицированной модели Тависа-Каммингса-Хаббарда (ТСКХ) для КЭД. Модель допускает расширение: переходы электронов и атомов между полостями, динамика связей между полостями, вплоть до слияния полостей.

2 Постановка задачи

В данной работе исследуется динамика квантовых состояний ансамбля двухуровневых атомов и электронов в оптической полости в рамках модели ТСН с приближением RWA. Предметы исследования следующие:

- Перемещение ядер - туннелирование ядер между полостями влияет расстояние между ядрами.
- Изменение координат электронов - электроны могут переходить между уровнями в атоме и гибридными уровнями в молекуле.
- Нахождение вероятности ассоциации или диссоциации в зависимости от параметров задачи: интенсивности прилета-улета фотонов всех трех мод и начального состояния для ассоциации или диссоциации.
- Нахождение стационарных состояний такой задачи, прежде всего - темных состояний; для квантового поведения ядер - черных состояний, то есть темных с учетом движения ядер.
- Нахождение наиболее простых схем численного моделирования динамики таких систем с целью масштабирования моделей на более сложные химические реакции.

3 Конечномерные модели КЭД

Существуют различные модификации конечномерных моделей КЭД. Модель Джейнса-Гаммингса(ЖС). Модель Джейнса-Гаммингса-Хаббарда(ЖСН). Модель Тависа-Каммингса(ТС). Модель Тависа-Гаммингса-Хаббарда(ТСН). В данной работе будем рассматривать модели ТС и ТСН.

3.1 Модель Тависа-Каммингса(ТС)

Определение модели Тависа-Каммингса выглядит следующим образом: несколько двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем в одной полости.

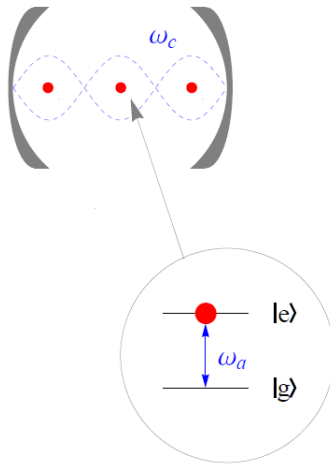


Figure 1: Модель ТС(ист. Wikipedia)

Допустим у нас N двухуровневых(основный и возбужденный) атомов, в идеальной полости. Под действием электромагнитного поля, атомы поглощают или испускают фотоны. При поглощении фотонов, атомы переходят из основного в возбужденное состояние, а при испускании переходят из возбужденного в основное. Состояния атомов обозначим

следующим образом:

$|0\rangle$ - основное состояние.

$|1\rangle$ - возбужденное состояние.

Введем следующие операторы:

a, a^\dagger - операторы уничтожения и рождения фотона.

σ, σ^\dagger - операторы релаксации и возбуждения атомов.

Эти операторы действуют следующим образом:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \text{ при } n \neq 0, \text{ и } a|0\rangle = 0$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

$$\sigma|1\rangle = |0\rangle \quad \sigma^\dagger|0\rangle = |1\rangle$$

$$\sigma|0\rangle = 0 \quad \sigma^\dagger|1\rangle = 0$$

Гамильтониан в полости имеет вид:

$$H_{TC} = \sum_{i=1}^N \hbar\omega_c a_i^\dagger a_i + \sum_{i=1}^N \hbar\omega_a \sigma_i^\dagger \sigma_i + \sum_{i=1}^N g_i (a_i + a_i^\dagger)(\sigma_i + \sigma_i^\dagger) \quad (1)$$

\hbar - постоянная Планка

ω_{ph} - частота фотона

ω_a - частота перехода атома

g_i - интенсивность взаимодействия атома с полем

При условиях: $|\omega_c - \omega_a| \ll \omega_c + \omega_a$, $\frac{g_i}{\hbar\omega_c} \approx \frac{g_i}{\hbar\omega_a} \ll 1$ $i = \overline{1, N}$, мы можем использовать приближение вращающейся волны (RWA), тогда слагаемые $a\sigma$ и $a^\dagger\sigma^\dagger$ не сохраняют энергию, это позволяет удалить из гамильтониана эти слагаемые. Перепишем гамильтониан:

$$H_{TC}^{RWA} = \sum_{i=1}^N \hbar \omega_c a_i^\dagger a_i + \sum_{i=1}^N \hbar \omega_a \sigma_i^\dagger \sigma_i + \sum_{i=1}^N g_i (a_i \sigma_i^\dagger + a_i^\dagger \sigma_i) \quad (2)$$

3.2 Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда(ТСН)

Определение модели Тависа-Каммингса выглядит следующим образом: несколько оптических полостей, и в каждой несколько двухуровневых атомов. И фотоны могут переходить между полостями.

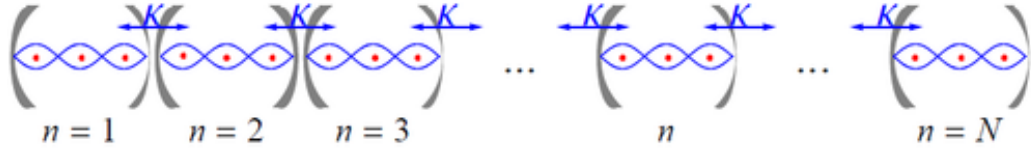


Figure 2: Модель ТСН(ист. Wikipedia)

Гамильтониан Модели ТСН с RWA имеет вид:

$$H_{TCH}^{RWA} = \sum_{i=1}^M H_{TC}^i + \sum_{1 \leq i < j \leq M} \mu_{ij} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) \quad (3)$$

μ_{ij} - амплитуда перехода фотона из полости i в полость j

4 Моделирование квантового гейта coCsign

Кватовый гейт coCsign реализуется в рамке модели JCH с приближением RWA. В такой модели, несколько оптических полостей, соединив оптическими волокнами. В каждой полости один двухуровневый атом. при возбуждении, атом поглощает фотон, и при реалаксации испускает фотон. Фотоны могут прыгать между полостями.

4.1 Схема модели

Квантовый гейт coCsign действует таким оброзом $coCsign|x, y\rangle \rightarrow (-1)^{x(y \oplus 1)}|x, y\rangle$, он меняет знак состояния $|10\rangle$. У нас полости $x, y, auxiliary$. В кадой из x и y существуют один фотон и один двухуровневый атом, атом в основном состоянии. В полости $auxiliary$ один атом в основном состоянии. Последовательность операций, реализующих coCsoign изображенанижней картинке.

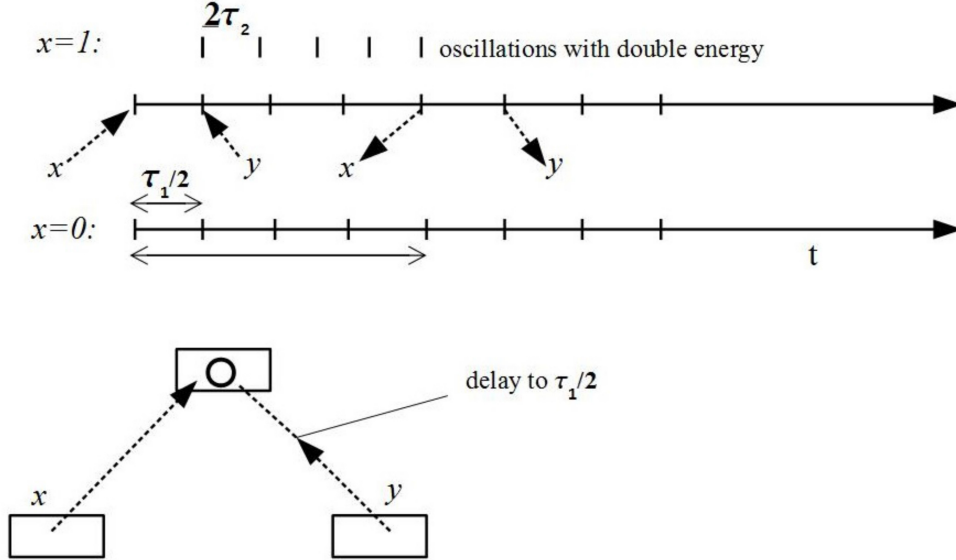


Figure 3: Последовательность операций coCsoign

Сначала соединить полость *auxiliary* с x по короткой длительности, чтобы они могут поменять фотон. Затем, через время $\frac{\tau_1}{2}$, аналогично с полостью y . Затем через время $2n_2\tau_2$, снова соединить полость x и *auxiliary* и поменять фотон. Затем, через время $\frac{\tau_1}{2}$ аналогично с полостью y . Где $\tau_1 = \frac{\pi\hbar}{g}$, $\tau_2 = \frac{\pi\hbar}{g\sqrt{2}}$, они периоды рабиевских осцилляций для общей энергии $\hbar\omega, 2\hbar\omega$ в полости.

4.2 Компьютерное моделирование

Состояние в одной полости обозначим: $|ph\rangle|at\rangle$, где $ph = 0, 1$ - состояние фотона, $at = 0, 1$ - состояние атома. Состояние кубита выполняется из состояния в одной полости. Например, $|0\rangle = |0\rangle_{ph}|1\rangle_{at}$. Мы только ожидаем эффект гейта на кубиты: $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$. Поэтому у нас 4 входных состояния:

$$|01\rangle_x|01\rangle_y|00\rangle_{aux} \quad |01\rangle_x|01\rangle_y|10\rangle_{aux}$$

$$|10\rangle_x|01\rangle_y|00\rangle_{aux} \quad |10\rangle_x|10\rangle_y|00\rangle_{aux}$$

Гамильтониан системы имеет вид:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{int} + H_{jump}, H_{jump} = H_{xjump} + H_{yjump} \\ H_0 &= h\omega(a_x^\dagger a_x + \sigma_x^\dagger \sigma_x + a_y^\dagger a_y + \sigma_y^\dagger \sigma_y + a_{aux}^\dagger a_{aux} + \sigma_{aux}^\dagger \sigma_{aux}) \\ H_{int} &= g(a_x \sigma_x^\dagger + a_x^\dagger \sigma_x + a_y \sigma_y^\dagger + a_y^\dagger \sigma_y + a_{aux} \sigma_{aux}^\dagger + a_{aux}^\dagger \sigma_{aux}) \\ H_{xjump} &= \nu(a_x a_{aux}^\dagger + a_x^\dagger a_{aux}) \\ H_{yjump} &= \nu(a_y a_{aux}^\dagger + a_y^\dagger a_{aux}) \end{aligned} \quad (4)$$

ω - частота фотона ν - частота перехода фотона из полости в полость
 a, a^\dagger - операторы рождения и уничтожения фотона
 σ, σ^\dagger - операторы релаксации и возбуждения атома Параметр ν является переменной, меняющимся по времени, имеет вид Гауссиана:

$$\nu(t) = \sum_{k=1}^4 \alpha \exp(-(t - t_k)^2 / 2\sigma^2) \quad (5)$$

4.3 Результат моделирования

Мы будем показывать результат для состояния $|10\rangle$ по этому.

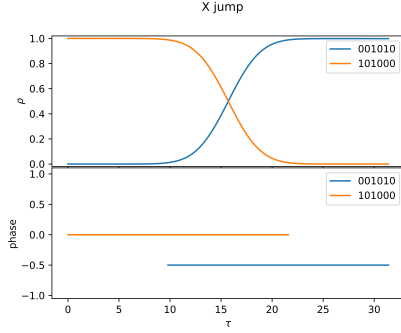


Figure 4: соединить x с aix

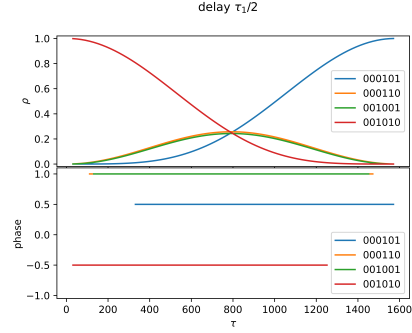


Figure 5: через время $\frac{\tau}{2}$

Этап 1: после соединения полосы x с полостью aix , фотон прыгал из полости x в полость aix .

Этап 2: в полостях y и aix , атомы переходят в возбужденное состояние с поглощением фотона.

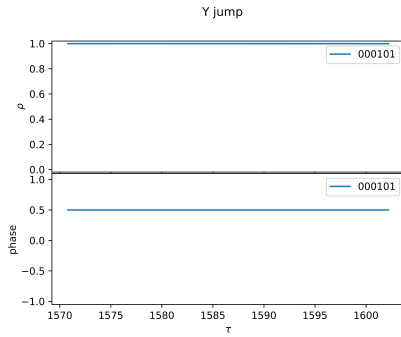


Figure 6: соединить y с aix

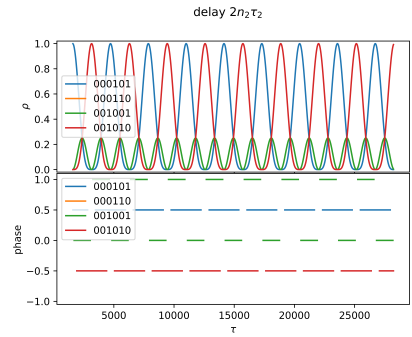


Figure 7: через время $2n_2\tau_2$

Этап 3: В полостях y и aix фотонов нет, атомы в возбужденном состоянии,

ничего не меняется.

Этап 4: в полостях y и aux происходят осцилляции Раби, с поглощением и испусканием фотонов.

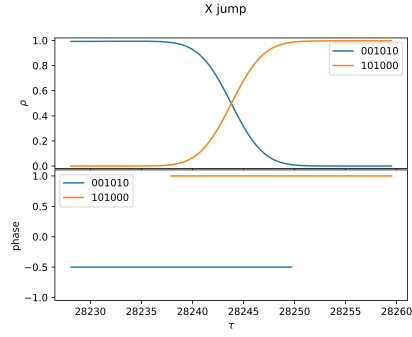


Figure 8: соединить x с aux

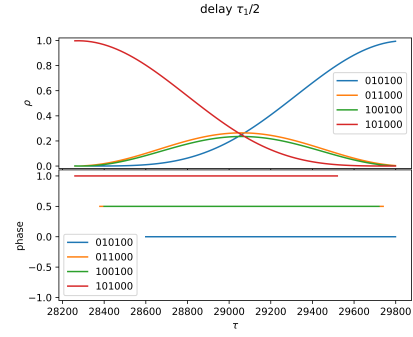


Figure 9: через время $\frac{\tau}{2}$

Этап 5: фотон прыгал из полости x в полость aux .

Этап 6: в полостях x и y , атомы переходят в возбужденное состояние с поглощением фотона.

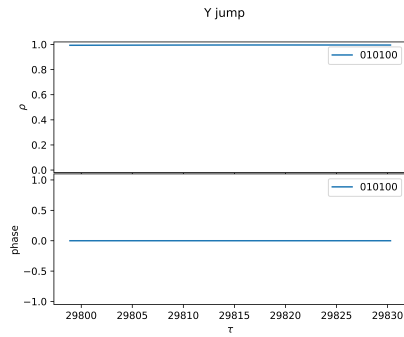


Figure 10: соединить y с aux

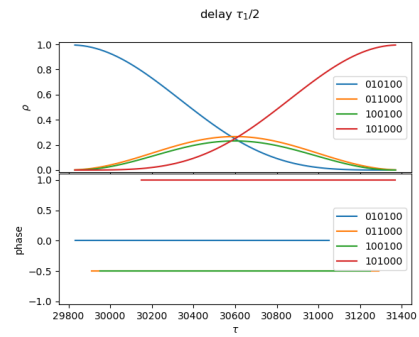


Figure 11: через время $\frac{\tau}{2}$

Этап 7: ничего не меняется.

Этап 8: в полостях x и y , атомы переходят в возбужденное состояние с поглощением фотона. Из этих картинок мы можем видеть, что гейт не меняет состояние. Но меняет фазу начального состояния из 0 в π .

5 Ассоциация-диссоциация молекулярного иона водорода

$$H_2^+$$

В данной модели электрон один и его спин считается фиксированным, и в каждой полости один атом.

Внутри каждого атома существуют свои уровни 0 и 1. Электрон может переходить между уровнями 0 и 1, но это происходит только когда два атома в разных полостях.

Базисные состояния системы обозначаем таким образом:

$$|\Psi\rangle_{bas} = |p, p_{at}\rangle_p |k\rangle_n |l\rangle_e$$

где $p, p_{at} = 0, 1$, $k = 0, 1$, $l = 0, 1$, нижние индексы обозначают: p - состояние молекулярного фотона, p_{at} - состояние атомного фотона, n - состояние ядер, e - состояние электрона.

Молекулярные уровни являются гбридизацией уровней 1 двух атомов. Обозначаем через $|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_1\rangle_e + |1_2\rangle_e)$ и $|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_1\rangle_e - |1_2\rangle_e)$. Когда электрон в состоянии $|\Phi_1\rangle$. Считаем, что электрон не связывает ядра. Это позволяет туннелирование ядер, ядра могут переходить из полости в полость. А если электрон в состоянии $|\Phi_0\rangle$. Считаем, что он связывает ядра, тогда туннелирование не возможно и атомы образуют стационарную молекулу.

Оператор энергии туннелирования ядер имеет вид:

$$H_{n.tun} = \sigma_e^+ \sigma_e (\sigma_n + \sigma_n^+) \quad (6)$$

Когда атомы находятся в разных полостях, электроны могут переходить между своими уровнями 0 и 1 с поглощением или испусканием фотона.

$$H_{dis-as} = g_{dis-as} \sigma_n^+ \sigma_n [a_{at}(\sigma_0^+ + \sigma_1^+) + a_{at}^+(\sigma_0 + \sigma_1)]$$

где операторы σ_0 и σ_1 операторы релаксации, они действуют естественным образом:

$$\sigma_0|1_1\rangle_e = |0_1\rangle_e \quad \sigma_1|1_2\rangle_e = |0_2\rangle_e$$

Гамильтониан модели будет иметь вид:

$$H_{H2+} = H_{n.tun} + H_{dis-as} + \hbar\omega a^+a + \hbar\sigma_e^+\sigma_e + g(\sigma_e a^+ + \sigma_e^+ a). \quad (7)$$

Моделирование ассоциации-диссоциации происходит через квантовое основное уравнение с оператором Линдблада утечки фотона при условии ассоциирующего состояния электрона $|\phi_0\rangle_e: A_{e.ass} = \sigma_e \sigma_e^+ a$ с некоторой интенсивностью γ_A , а также операторов утечки фотона $A_{ass-dis} = \gamma_{ass-dis} a_{at}$.

Процессы ассоциации-диссоциации изображены в следующих картинках.

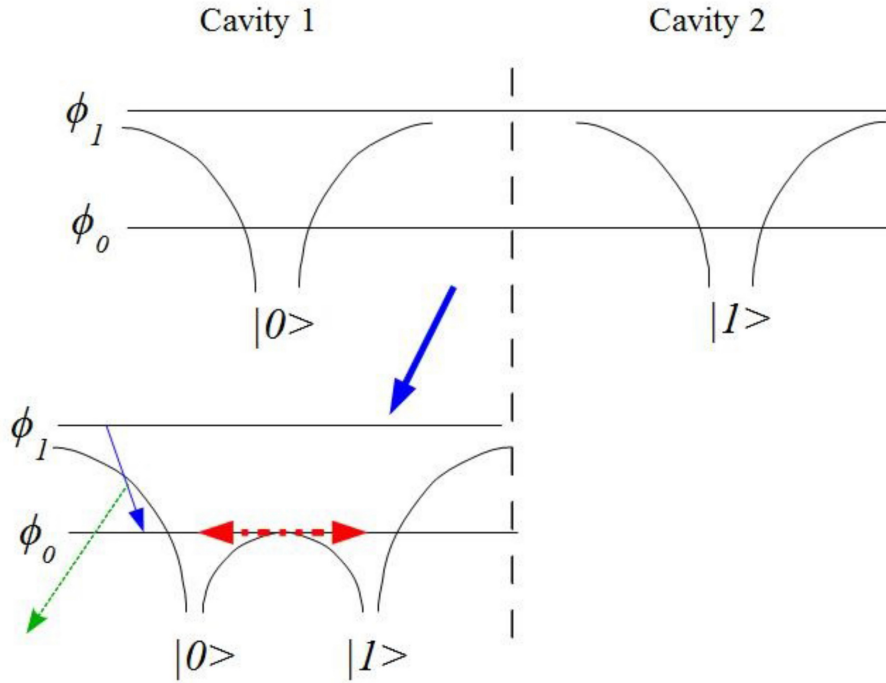


Figure 12: Динамика ассоциации

Электрон находится на основном уровне атома. Электрон поглощает фотон, и переходит из основного уровня ($|1_1\rangle$) на возбужденный уровень ($|1_2\rangle$), так что становится возможной гибридизация этих уровней в молекулярные уровни $|\Phi_0\rangle$ и $|\Phi_1\rangle$. Когда электрон находится на молекулярном уровне $|\Phi_1\rangle$, ядра могут туннелировать из полости в полость, затем 2 ядра в одной полости. Затем электрон переходит из уровня $|\Phi_1\rangle$ на $|\Phi_0\rangle$ с испусканием фотона, и стабильная молекула оформлена.

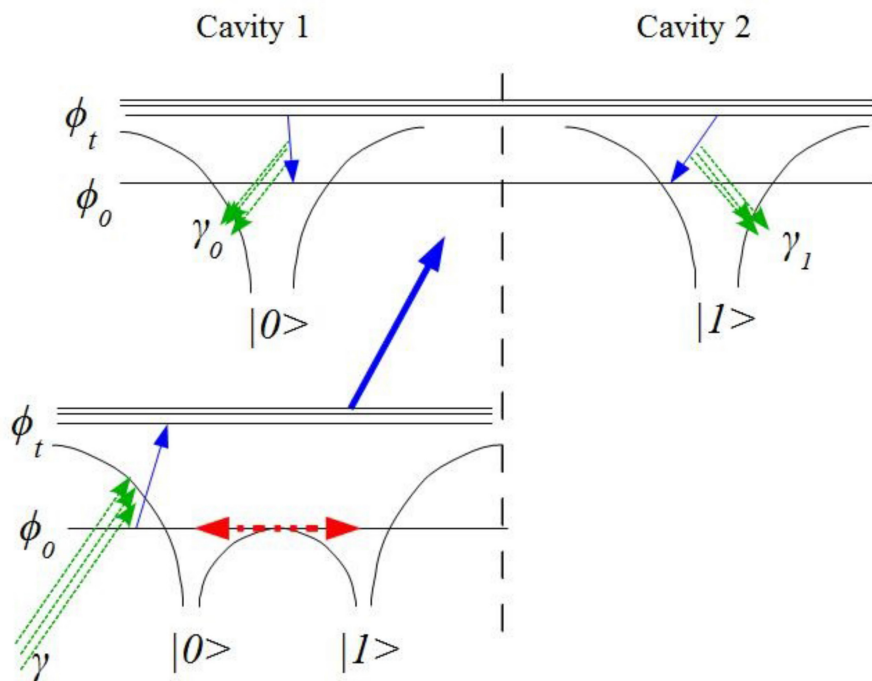


Figure 13: Динамика диссоциации

Электрон находится на молекулярном уровне. Электрон поглощает фотон и переходит из уровня $|\Phi_0\rangle$ на $|\Phi_1\rangle$. Тогда туннелирование ядер возможно. 2 Ядра переходят в разные полости. Увеличение расстояния между ядрами приводит к увеличению высоты барьера. Электрон может упасть на основной уровень атома с испусканием фотона.

5.1 Компьютерное моделирование

a : оператор уничтожения фотона в молекуле

$$a = \begin{matrix} & |0\rangle & |1\rangle \\ \begin{matrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (8)$$

a_{at} : оператор уничтожения фотона в атоме

$$a_{at} = \begin{matrix} & |0\rangle & |1\rangle \\ \begin{matrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (9)$$

σ_n : оператор туннелирования ядер

$|0\rangle_n$ - 2 ядра в одной полости $|1\rangle_n$ - 2 ядра в разных полостях

$$\sigma_n = \begin{matrix} & |0\rangle_n & |1\rangle_n \\ \begin{matrix} |0\rangle_n \\ |1\rangle_n \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (10)$$

σ_0 - оператор перехода электрона: $|1_1\rangle_e \Rightarrow |0_1\rangle_e$

$$\sigma_0 = \begin{matrix} & |0_1\rangle_e & |1_1\rangle_e & |0_2\rangle_e & |1_2\rangle_e \\ \begin{matrix} |0_1\rangle_e \\ |1_1\rangle_e \\ |0_2\rangle_e \\ |1_2\rangle_e \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (11)$$

σ_1 - оператор перехода электрона: $|1_2\rangle_e \Rightarrow |0_2\rangle_e$

$$\sigma_1 = \begin{matrix} & |0_1\rangle_e & |1_1\rangle_e & |0_2\rangle_e & |1_2\rangle_e \\ \begin{matrix} |0_1\rangle_e \\ |1_1\rangle_e \\ |0_2\rangle_e \\ |1_2\rangle_e \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (12)$$

σ_e - оператор перехода элетрона: $|\Phi_1\rangle_e \Rightarrow |\Phi_0\rangle_e \sigma_e$ запиcатся в базисах $|\Phi_0\rangle_e$ и $|\Phi_1\rangle_e$

$$\sigma_e = \begin{matrix} & |0_1\rangle_e & |\Phi_0\rangle_e & |0_2\rangle_e & |\Phi_1\rangle_e \\ \begin{matrix} |0_1\rangle_e \\ |\Phi_0\rangle_e \\ |0_2\rangle_e \\ |\Phi_1\rangle_e \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (13)$$

σ_e переписанно в базисах $|1_1\rangle_e$ и $|1_2\rangle_e$

$$\sigma_e = \begin{matrix} & |0_1\rangle_e & |1_1\rangle_e & |0_2\rangle_e & |1_2\rangle_e \\ \begin{matrix} |0_1\rangle_e \\ |1_1\rangle_e \\ |0_2\rangle_e \\ |1_2\rangle_e \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & -0.5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & -0.5 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (14)$$

Для моделирования расссмотрим квантовое основное уравнениеc оператором Лидблада:

$$\begin{aligned} L(\rho) &= \sum_{k=0}^N \gamma_k (A_k^+ \rho A_k - \frac{1}{2} A_k^+ A_k, \rho) \\ \rho'(t + \Delta t) &= e^{-iH\Delta t} \rho(0) e^{iH\Delta t} \\ \rho(t + \Delta t) &= \rho'(t + \Delta t) + L(\rho'(t + \Delta t)) \Delta t \end{aligned} \quad (15)$$

5.2 Решение Квантового основного уравнения

Мы должны предполагать, что если между некоторыми группами базисных состояний нет когерентности (внедиагональные члены матрицы плотности равны нулю), то обработку таких состояний можно поручить разным ядрам компьютера, а в конце вычисления свести воедино все результаты. В связи с этим предлагается следующий метод поиска решения. Описывается один шаг i по времени длительностью $d\tau$. Мы будем стремиться применять такие численные методы, которые работают при максимально возможной величине $d\tau$.

Начальное состояние шага i будет всегда набором подпространств $\mathcal{H}_j, j = 1, 2, \dots, l_i$ пространства \mathcal{H} и чистых состояний в этих подпространствах вида:

$$|\Psi_i^1\rangle \in \mathcal{H}_1, |\Psi_i^2\rangle \in \mathcal{H}_2, \dots, |\Psi_i^{l_i}\rangle \in \mathcal{H}_{l_i}, \quad (16)$$

где моделирование динамики в каждом подпространстве происходит независимо в виде параллельного вычислительного процесса. При этом некоторые \mathcal{H}_j могут совпадать, все равно процессы будут не зависимы друг от друга.

Опишем отдельный процесс, опуская верхний индекс. В его начале имеется чистое состояние $|\Psi_i(0)\rangle = \sum_{j \in J_i} \lambda_j |j\rangle$, где J_i - множество базисных состояний, избранных на данном шаге. Шаг состоит из 4 этапов.

На первом этапе в результате применения унитарного оператора мы получим $|\Psi'_i\rangle = \exp(-\frac{i}{\hbar} H_i d\tau) |\Psi_i(0)\rangle$, для чего надо диагонализировать H_i - ограничение H на J_i .

На втором этапе мы получим из чистого состояния $|\Psi'_i\rangle$ матрицу плотности ρ_i , применяя один шаг численного метода решения уравнения $\hbar \dot{\rho} = \mathcal{L}(\rho)$ с начальным условием $\rho(0) = \rho_{\Psi'_i}$. Это может быть метод Розенброка, который, вероятно, упрощается из-за того, что начальное состояние - чистое. В результате получается матрица плотности смешанного

состояния ρ'_i . Здесь множество базисных состояний остается неизменным.

На третьем этапе мы диагонализировать

$$\rho'_i = \sum_k p_k |\phi_k^i\rangle \langle \phi_k^i|. \quad (17)$$

Для каждого k , где $p_k > 0$ мы заводим независимый вычислительный процесс, работающий с этого момента в минимальном подпространстве $\mathcal{H}_k \subset \mathcal{H}$ общего пространства, таком, что $|\phi_k^i\rangle \in \mathcal{H}_k$. Индекс k далее опускаем, рассматривая отдельный процесс.

Мы не можем взять просто одно $|\phi_1^i\rangle$ с наибольшей вероятностью p_1 , так как вероятности других состояний $|\phi_k^i\rangle$ будут расти уже в первом порядке по $d\tau$. Например, если бы в простейшей задаче про утечку фотона из полости без атома мы бы взяли только $|\phi_1^i\rangle$ - фотон в полости, мы вообще никогда не получили бы его вылет из нее. С другой стороны, все $|\phi_k^i\rangle$ будут полностью не зависимы друг от друга, и между ними не будет когерентности, поэтому их можно поручить отдельным вычислительным процессам. В конце всего вычисления надо будет просто сложить вероятности для одинаковых базисных состояний по всем таким процессам.

Теперь мы могли бы взять просто $|\Psi_{i+1}(0)\rangle = |\phi_i\rangle$, но это только если множество J_i покрывает все возможные базисные состояния, чего не может быть, так как всевозможных наверняка в содержательных задачах будет гигантское число и J_i может содержать лишь малую часть. Поэтому мы должны отбросить из $|\phi_1\rangle$ все слагаемые с амплитудой, меньшей ϵ , где ϵ^2 меньше чем $1/N$, где N - размер матрицы, к которой удобно работать, и исключить из J_i все такие базисные состояния, а потом включить такое же число новых базисных состояний, не входящих в J_i , но в которые возможен переход по гамильтониану H из оставшихся в J_i . Так получается новое чистое состояние $|\Psi_{i+1}(0)\rangle$ и множество J_{i+1} . Описание шага для отдельного процесса закончено.

Для всех процессов мы получаем ветвящееся дерево, которое будет ограничено в том случае, когда операторы Линдблада приводят к монотонному изменению энергии системы, например, при утечке фотона. Если один из операторов уменьшает энергию, а другой увеличивает (есть утечка и приток фотонов), дерево процессов будет расти неограниченно, и мы должны выбрать критерий остановки из физических соображений, как в книге (термическая стабилизация и аттракторы).

Сложность будет здесь в диагонализации матриц, размер которых надо выбирать так, чтобы вычисление не останавливалось. Множество J_i должно при увеличении i двигаться по всему пространству \mathcal{H} всевозможных состояний, охватывая в каждый момент i лишь малую часть \mathcal{H} . Тонкий момент - в выборе включаемых в J_i базисных состояний.

Замечание к выбору собственных состояний $|\phi_k\rangle$.

В некоторых случаях диагонализацию матрицы ρ'_i можно существенно упростить. Например, в случае, когда все операторы Линдблада имеют вид вылета из системы фотонов разных мод: $A_j = a_j$, набор векторов $|\phi_i^k\rangle$ может мало меняться с ростом i .

Гипотеза.

Каждый вектор $|\phi_i^k\rangle$ получается из какого либо вектора $|\phi_{i-1}^{k'}\rangle$ предыдущего набора применением оператора эволюции: $|\phi_i^k\rangle = U_{k,k'}|\phi_{i-1}^{k'}\rangle$, который имеет вид $U_{k,k'} = \exp(-\frac{i}{\hbar}H_{k,k'}dt)$, где $H_{k,k'}$ - гамильтониан, полученный из основного H путем выбрасывания отдельных операторов, относящихся к некоторым группам фотонов.

В случае выполнения этой гипотезы процесс диагонализации матрицы плотности может быть существенно упрощен, так как не надо применение сложных численных методов станет ненужным.

5.3 Результаты Моделирования

Ассоциация начинается с состояния $|0\rangle_p|1_1\rangle_e|1\rangle_n$, диссоциация - с состояния $|1\rangle_p|\phi_0\rangle_e|0\rangle_n$. Эти два процесса не являются взаимно обратными из-за их необратимости. Диссоциация молекулы должна происходить в случае, если расстояние между ядрами сравнивается с 1 нм.; длина волны фотона, соответствующего переходу между основным и первым возбужденным состояниями в атоме водорода равно примерно 10 нм.

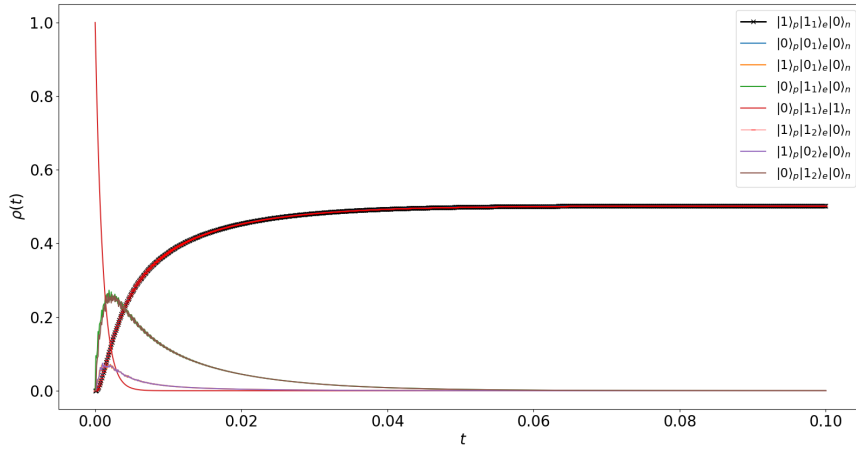


Figure 14: Ассоциация

В этой картинке мы можем видеть, что эволюция начинается со состояния $|0\rangle_p|1_1\rangle_e|1\rangle_n$. Мы получили конечные состояния: $\frac{|1\rangle_p|1_1\rangle_e|0\rangle_n + |1\rangle_p|1_2\rangle_e|0\rangle_n}{2}$. По определению, эти состояния гибридуются в состояние $|1\rangle_p|\phi_0\rangle_e|0\rangle_n$. это знаичт, что ядро туннелировало из разных полости в одну плость, электрон переходил на молекулярный уровень. Затем, фотон летел в среду, атомы образовали стабильную молекулу.

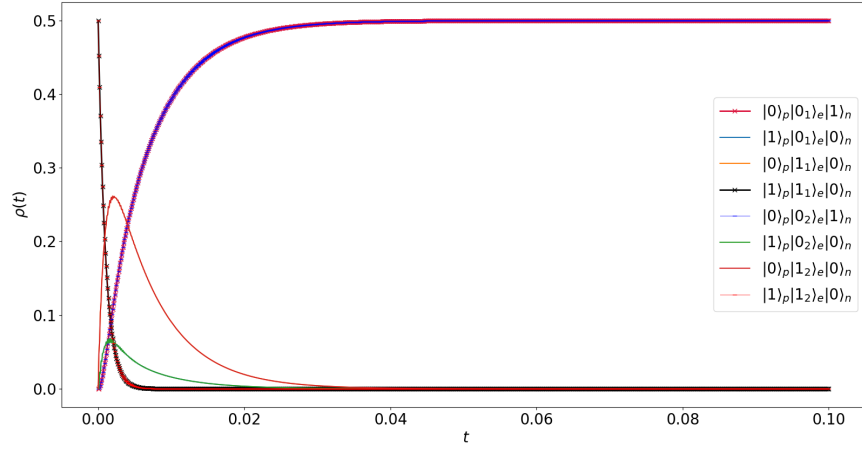


Figure 15: Дислоциация

В этой картинке показывает, что эволюция начинается со состояния: $|1\rangle_p|\phi_0\rangle_e|0\rangle_n$. Мы получили конечные состояния: $\frac{|0\rangle_p|0_1\rangle_e|1\rangle_n}{2}$ и $\frac{|0\rangle_p|0_2\rangle_e|1\rangle_n}{2}$. Это значит, что электрон поглотил фотон, затем ядро туннелировало из одной полости в другую. Затем электрон упал на нижний уровень атома.

6 Заключение

В данной работе была рассмотрена ассоциация-диссоциация двухатомной искусственной молекулы в рамках конечномерной модели ТСН.

Создана химическая модель, описывающая динамику электрона и ядер. Где динамика ядер влияет образование молекул, и динамика электронов влияет стабильность молекул.

Создана математическая модель, решающая квантовое основное уравнение с оператором Лидблаа.

Создана программа моделирования для системы двух искусственных атомов, основанная на квантовом основном уравнении.

С помощью численных экспериментов с программой установлен вид динамики населенности состояний электронов, ядер и поля. В частности, установлен вид стационарных темных состояний, появляющихся в результате двух основных каналов данных реакций.

7 Приложение

Listing 1: программный код

```
1 import numpy as np
2 import scipy.linalg as spl
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 plt.rc('font', size=20)
6 h = 1.054_571_817 * 10 ** -27
7 # h=10e3
8 def commutator(a, b):
9     return a * b - b * a
10
11
12 def anti_commutator(a, b):
13     return a * b + b * a
14
15
16 def jac_commutator(a):
17     return np.kron(a, np.eye( len(a))) - np.kron(np.eye( len(a)), a.T)
18
19
20 def jac_anti_commutator(a):
21     return np.kron(a, np.eye( len(a))) + np.kron(np.eye( len(a)), a.T)
22
23
24 def lindbladian(*, A0,A1, gamma0=0,gamma1=0):
25     return lambda ro: gamma0 * (A0.H * ro * A0 - 0.5 * anti_commutator(A0 * A0.H, ro
26         ))+gamma1 * (A1.H * ro * A1 - 0.5 * anti_commutator(A1 * A1.H, ro))
27
28 def jac_lindbladian(*, A0,A1, gamma0=0,gamma1=0):
29     return gamma0 * (np.kron(A0.T, A0.H) - 0.5 * jac_anti_commutator(A0 * A0.H))+
30         gamma1 * (np.kron(A1.T, A1.H) - 0.5 * jac_anti_commutator(A1 * A1.H))
31
32 def fun(*, A0,A1, gamma0=0,gamma1=0):
33     return lambda ro: (
```

```

34         + lindbladian(A0=A0,A1=A1 ,gamma0=gamma0,gamma1=gamma1)(ro
35         )
36     ) / h
37
38 def jac(*, A0,A1 ,gamma0=0,gamma1=0):
39     return (
40         + jac_lindbladian(A0=A0,A1=A1, gamma0=gamma0,gamma1=gamma1)
41         ) / h
42
43
44 def shordinger(*, ro_0, H, A0,A1, gamma0,gamma1, grid):
45     F = lambda ro: np.array(fun(A0=A0,A1=A1, gamma0=gamma0,gamma1=gamma1)(ro)).ravel
46         ()
47     J = jac(A0=A0,A1=A1, gamma0=gamma0,gamma1=gamma1)
48     a11 = (1 + 1j) / 2
49     step = grid[1] - grid[0]
50     E = np.eye(ro_0.shape[0] * ro_0.shape[1])
51     U = np.matrix(spl.expm(-1j * H * step / h))
52     result = [ro_0]
53     for _ in range( len(grid) - 1):
54         ro = result[-1]
55         ro = U * ro * U.H
56         k_imag = np.linalg.solve(E - a11 * step * J, F(ro.imag)).reshape(ro_0.shape)
57             .real
58         k_real = np.linalg.solve(E - a11 * step * J, F(ro.real)).reshape(ro_0.shape)
59             .real
60         ro = ro + step * (k_real + 1j * k_imag)
61         result.append((ro.H + ro) / 2)
62     return result
63
64 sigma0 = np.zeros([16, 16], dtype=np.complex128)
65 sigma1 = np.zeros([16, 16], dtype=np.complex128)
66 Aat = np.zeros([16, 16], dtype=np.complex128)
67 Am = np.zeros([16, 16], dtype=np.complex128)
68 sigman = np.zeros([16, 16], dtype=np.complex128)
69 sigmae = np.zeros([16, 16], dtype=np.complex128)
70
71 corsig0 = np.array([[4, 0], [5, 1], [6, 2], [7, 3]])

```

```

69 | corsig1 = np.array([[12, 8], [13, 9], [14, 10], [15, 11]])
70 | coraat = np.array([[2, 0], [3, 1], [6, 4], [7, 5], [10, 8], [11, 9], [14, 12], [15,
    | 13]])
71 | coram = np.array([[6, 4], [14, 4], [6, 12], [14, 12]])
72 | corsign = np.array([[1, 0], [3, 2], [5, 4], [7, 6], [9, 8], [11, 10], [13, 12], [15,
    | 14]])
73 | corsigep = np.array([[4, 4], [4, 12]])
74 | corsigem = np.array([[12, 4], [12, 12]])
75 | for i in range(corsig0.shape[0]):
76 |     sigma0[corsig0[i][0]][corsig0[i][1]] = 1
77 |
78 | for i in range(corsig1.shape[0]):
79 |     sigma1[corsig1[i][0]][corsig1[i][1]] = 1
80 |
81 | for i in range(coraat.shape[0]):
82 |     Aat[coraat[i][0]][coraat[i][1]] = 1
83 |
84 | for i in range(coram.shape[0]):
85 |     Am[coram[i][0]][coram[i][1]] = 1 / 2
86 |
87 | for i in range(corsign.shape[0]):
88 |     sigman[corsign[i][0]][corsign[i][1]] = 1
89 |
90 | for i in range(corsigep.shape[0]):
91 |     sigmae[corsigep[i][0]][corsigep[i][1]] = 1 / 2
92 |     sigmae[corsigem[i][0]][corsigem[i][1]] = -1 / 2
93 |
94 | sigma0 = np.asmatrix(sigma0)
95 | sigma1 = np.asmatrix(sigma1)
96 | Aat = np.asmatrix(Aat)
97 | Am = np.asmatrix(Am)
98 | sigman = np.asmatrix(sigman)
99 | sigmae = np.asmatrix(sigmae)
100 |
101 |
102 | W=10e10
103 | gdisas=h*W
104 | g=0.1*h*W
105 | gammaA=h*10

```

```

106 gammaDisas=h*10e2
107 grid = np.linspace(0, 1e-1, 1001)
108
109 Htun=g*sigmae.H@sigmae@(sigman+sigman.H)
110 Hdisas=gdisas*sigman.H@sigmae@(Aat@(sigma0.H+sigma1.H)+Aat.H@(sigma0+sigma1))
111 H=Htun+Hdisas+h*W*Aat.H@Aat+h*W*Am.H@Am+h*W*sigmae.H@sigmae+g*(Am.H@sigmae+Am@sigmae
    .H)
112
113 rho0=np.zeros([16,16],dtype=np.complex128)
114 corrho=np.array([[6,6],[14,6],[6,14],[14,14]])
115 for i in range(corrho.shape[0]):
116     rho0[corrho[i][0]][corrho[i][1]] = 1/2
117 rho0=np.asmatrix(rho0)
118 Aass=sigmae@sigmae.H@Am
119 Aassdis=Aat
120 solution = shordinger(
121     ro_0=rho0,
122     H=H,
123     A0=Aass,
124     A1=Aassdis,
125     gamma0=gammaA,
126     gamma1=gammaDisas,
127     grid=grid,
128 )
129 state=[r'$|0\rangle_p|0_1\rangle_e|0\rangle_n$',r'$|0\rangle_p|0_1\rangle_e|1\rangle_n$',r'$|1\rangle_p|0_1\rangle_e|0\rangle_n$',\
130     r'$|1\rangle_p|0_1\rangle_e|1\rangle_n$',r'$|0\rangle_p|1_1\rangle_e|0\rangle_n$',r'$|0\rangle_p|1_1\rangle_e|1\rangle_n$',\
131     r'$|1\rangle_p|1_1\rangle_e|0\rangle_n$',r'$|1\rangle_p|1_1\rangle_e|1\rangle_n$',r'$|0\rangle_p|0_2\rangle_e|0\rangle_n$',\
132     r'$|0\rangle_p|0_2\rangle_e|1\rangle_n$',r'$|1\rangle_p|0_2\rangle_e|0\rangle_n$',r'$|1\rangle_p|0_2\rangle_e|1\rangle_n$',\
133     r'$|0\rangle_p|1_2\rangle_e|0\rangle_n$',r'$|0\rangle_p|1_2\rangle_e|1\rangle_n$',r'$|1\rangle_p|1_2\rangle_e|0\rangle_n$',r'$|1\rangle_p|1_2\rangle_e|1\rangle_n$',]
134 plt.figure(figsize=(20, 10))
135 plt.ylabel("$\\rho(t)$")
136 plt.xlabel("$\\ t$")
137 for i in range(16):

```

```

138     if np.max([x[i, i].real for x in solution]) > 0.01:
139         if i==0:
140             plt.plot(grid, [x[i, i].real for x in solution], marker='x', c='crimson',
141                          ,linewidth='2',label=state[i])
142         elif i==8:
143             plt.plot(grid, [x[i, i].real for x in solution], marker='_', c='blue',
144                          ,linewidth='0.5',label=state[i])
145         elif i == 6:
146             plt.plot(grid, [x[i, i].real for x in solution],marker='2',c='k',
147                          ,linewidth='2',label=state[i])
148         elif i==14:
149             plt.plot(grid, [x[i, i].real for x in solution], marker='_', c='r',
150                          ,linewidth='0.5',label=state[i])
151         else:
152             plt.plot(grid, [x[i, i].real for x in solution],label=state[i])
153 plt.legend()
154 # plt.savefig('dissociation.png',dpi=1200)
155 plt.legend()
156 plt.show()

```

Список литературы

- [1] Ожигов Ю.И., Квантовый компьютер, 2020, - ISBN 978-5-317-06403-7
- [2] Ozhigov Y.I., Space of dark states in Tavis-Cummings model, 2019
- [3] J. Preskill, Quantum computing in the NISQ era and beyond, 2018
- [4] P. J. J. O' Malley et al., Scalable quantum simulation of molecular energies, 2016
- [5] Y. Nam et al., Ground-state energy estimation of the water molecule on a trapped ion quantum computer, <https://arxiv.org/abs/1902.10171>
- [6] Shijie Wei, Hang Li, GuiLu Long, A Full Quantum Eigensolver for Quantum Chemistry Simulations, Research, vol. 2020, Article ID 1486935, 11 pages, 2020. <https://doi.org/10.34133/2020/1486935>