



Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики

Чжэн Кэли

Оптическая интерпретация химического квантового компьютера

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., профессор

Ю.И. Ожигов

Москва, 2021

Оглавление

1	Введение	3
2	Химическая модель	4
2.1	Модель двухуровневого атома	4
2.2	Двухатомная модель	5
2.3	Эволюция системы	5
2.4	Тёмное состояние	7
3	Оптическая интерпретация	8
3.1	Системы для оптической интерпретации	8
3.2	Интерпретация перехода электрона	9
3.3	Эволюция системы	10
4	Вычислительные эксперименты	12
4.1	Эволюции системы	12
4.2	Влияние параметров на точность	13
5	Заключение	16
6	Приложения	17
6.1	Аппроксимация транспортного уровня	17
6.2	Пакет BraAndKet	18
7	Ссылки	21

1 Введение

Исследование химических систем является важной темой в области компьютерного моделирования. Однако, поскольку это связано с квантовой механикой, с помощью традиционных компьютеров его пока очень сложно моделировать. Трудность заключается в том, что нужно хранить состояние суперпозиции всей системы. А количество возможных состояний растёт экспоненциально по степени свободы системы. Значит, что пока вы моделирование чуть сложных систем требует уже огромную память на классическом компьютере.

С квантовым компьютером, мы надеемся, что сможем эту проблему решить. Поскольку квантовый компьютер использует квантовую память, затрат памяти растёт только линейно по степени свободы системы. В текущее время даже уже существуют некоторые реализованные квантовые компьютеры. Однако, даже с квантовым компьютером моделирование химических систем все ещё не просто из-за сложности самой химической системы. Во-первых, что касается нынешней теории, химическая система непрерывна. Например, положение свободного электрона — наблюдаемая мера в непрерывном пространстве. Моделирование свободного электрона требует много кубитов, чтобы разделить пространство на достаточно мелкие кусочки. Во-вторых, в качестве аппроксимации, например, для атома водорода, мы можем считать только некоторые стабильные орбиты электронов вокруг ядра. Но даже в этом случае теоретически есть ещё бесконечные орбит. Для грубого моделирования должно учитывать как минимум десятки из них. Для текущих квантовых компьютеров пока ещё очень трудно смоделировать даже простейшую химическую систему.

В данной работе, представлен способ для исследования химических систем с помощью оптических полости и захваченных в нём атомов — оптическая интерпретация. Можно сказать, что это специальный для химии (не универсальный) квантовый компьютер. Главная идея — использование трудно моделируемого самого вещества для моделирования химической системы. Это похоже на эксперимент, но контролируемые в системе полости атомы нам дают больше возможность разбираться в состоянии атомов в реальности.

Оптическая интерпретация не предназначена чтобы воспроизводить динамику химических реакций, а качественно предсказывать долгосрочные результаты. Во многих случаях именно эти долгосрочные результаты определяет свойства материала, а динамика нам не так интересует.

В оптической интерпретации, заряды не могут перемещаться на большие расстояния, только фотоны могут. Так делаем, чтобы она проще физически реализуется, поскольку пока нам ещё трудно перемещать зарядов и причём сохранить их когерентность. Это серьёзная техническая проблема. А у нас уже есть надёжные оптические средства для перемещения когерентных фотонов.

В данной работе, представлены некоторые примеры оптической интерпретации на простейших моделях. Проведены вычислительные эксперименты, проверено соответствие

результатов и исследованы влияния некоторых параметров на точность. Они лишь являются очень простыми прототипными примерами, но в некоторой степени показывают осуществимость такого подхода.

2 Химическая модель

2.1 Модель двухуровневого атома

Сначала рассмотрим простую модели одного двухуровневого атома.

Мы определили 4 базисных состояния для такого атома по электронной конфигурации, как видно на **рис. 1**. Предположим, это атом водорода. Когда вокруг ядра нет электрона, это ион водорода, и это есть состояние 0. А если вокруг ядра есть один электрон, сформируется атом водорода. Считаем, что это двухуровневый атом, т. е. у атома возбуждённое и основной уровень. Соответственно, это состояние 1 и состояние 2. А можно ещё добавить электрон. Тогда сформируется анион водорода. И это состояние номер 3. Больше электронов вокруг ядра не удержится. Поэтому у нас всего 4 состояния атома.

Запишем состояния атома в нотации Дирака:

- $|0\rangle_{at} = |0\rangle_{ob_0} |0\rangle_{ob_1}$
- $|1\rangle_{at} = |0\rangle_{ob_0} |1\rangle_{ob_1}$
- $|2\rangle_{at} = |1\rangle_{ob_0} |0\rangle_{ob_1}$
- $|3\rangle_{at} = |1\rangle_{ob_0} |1\rangle_{ob_1}$

Согласно принципу запрета Паули, в одной орбите, можно садиться не больше одного электрона. Кроме этого, чтобы упростить прототипную модель, в данной работе мы учитываем, что все электроны имеют одинаковый спин. Это вряд соответствует реальности. Но главные свойства модели (например, тёмное состояние, см. **параграф 2.4**) сохраняются.

Эти состояния имеют разные потенциалы. При переходе между ними атом поглощает или испускает фотон с определённой энергией. Всего 3 типа фотонов:

- Фотон ω_{01} – фотон, связанный с переход между состояниями 0 и 1, с энергией $\hbar\omega_{01}$
- Фотон ω_{12} – фотон, связанный с переход между состояниями 0 и 1, с энергией $\hbar\omega_{12}$
- Фотон ω_{23} – фотон, связанный с переход между состояниями 0 и 1, с энергией $\hbar\omega_{23}$

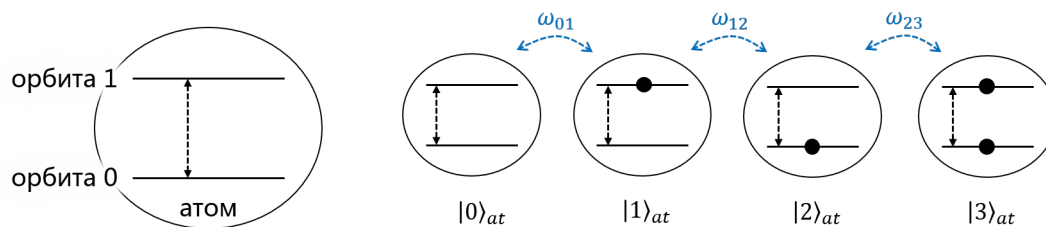


Рис. 1. Схема химической модели

2.2 Двухатомная модель

В данной работе исследована химическая модель с двумя атомами, двумя электронами и транспортным уровнем, как видно на **рис. 2**.

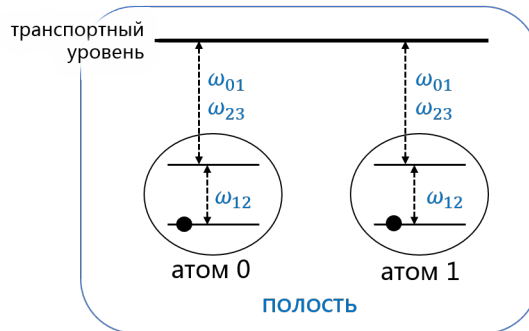


Рис. 2. Схема химической модели

Электроны могут перемещаться между атомами через транспортный уровень. Считаем, что переход электронов производится только между транспортным уровнем и орбитой 1 атомов. Когда атом переходит между состояниями 0 и 1, 2 и 3, есть электрон входит или покидает транспортный уровень.

В реальных материалах транспортный уровень – энергетическая полоса из очень много орбит. Поэтому, не смотря на принцип запрета Паули, считаем, что на нём можно находиться сколько угодно электронов. Тогда обозначим состояние транспортного уровня числом электронов:

- $|0\rangle_{tp}$ – на транспортном уровне нет электрона.
 - $|1\rangle_{tp}$ – на транспортном уровне есть 1 электрон.
 - $|2\rangle_{tp}$ – на транспортном уровне есть 2 электрона.
- и т. д.

Следует отметить, что это на самом деле аппроксимация транспортного уровня. Подробно смотрите на **параграф 6.1**.

Вся система находится в одной многомодовой оптической полости, которая удерживает все типы фотонов. Запишем состояния поля в полости в нотации Дирака:

- $|n_{01}\rangle_{\omega_{01}} |n_{12}\rangle_{\omega_{12}} |n_{23}\rangle_{\omega_{23}}$ – состояние, при котором есть в полости n_{01} фотонов ω_{01} , n_{12} фотонов ω_{12} , n_{23} фотонов ω_{23} , соответственно.

2.3 Эволюция системы

Чтобы описывать эволюцию системы, для удобства, сначала определим лестничные операторы:

Рождение/уничтожение фотонов:

- $a_{01} = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} |k\rangle \langle k+1|_{\omega_{01}}$ – уничтожение одного фотона ω_{01}
- a_{01}^{\dagger} – рождение одного фотона ω_{01}
(аналогично для других типов фотонов: a_{12} и a_{23})

Приход/уход электронов на/из транспортного уровня:

- $\sigma_{tp} = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} |k\rangle \langle k+1|_{tp}$ – приход одного электрона на транспортный уровень.
- σ_{tp}^{\dagger} – уход одного электрона из транспортного уровня.

Потом можем определить следующие операторы:

Энергия фотонов различных типов:

- $E_{01} = \hbar a_{01}^{\dagger} a_{01}$
- $E_{12} = \hbar a_{12}^{\dagger} a_{12}$
- $E_{23} = \hbar a_{23}^{\dagger} a_{23}$

Потенциал транспортного уровня:

- $P_{tp} = 0$ (ноль для любых количество электронов)

Потенциал атомов:

- $P_{at_0} = 0 |0\rangle \langle 0|_{at_0} - \hbar\omega_{01} |1\rangle \langle 1|_{at_0} - (\hbar\omega_{01} + \hbar\omega_{12}) |2\rangle \langle 2|_{at_0} - (\hbar\omega_{01} + \hbar\omega_{12} + \hbar\omega_{23}) |3\rangle \langle 3|_{at_0}$
- $P_{at_1} = 0 |0\rangle \langle 0|_{at_1} - \hbar\omega_{01} |1\rangle \langle 1|_{at_1} - (\hbar\omega_{01} + \hbar\omega_{12}) |2\rangle \langle 2|_{at_1} - (\hbar\omega_{01} + \hbar\omega_{12} + \hbar\omega_{23}) |3\rangle \langle 3|_{at_1}$

Переходы электронов и соответственные переходы состояний атома:

- $T_{01at_0} = a_{01}^{\dagger} \otimes \sigma_{tp} \otimes |1\rangle \langle 0|_{at_0} + a_{01} \otimes \sigma_{tp}^{\dagger} \otimes |0\rangle \langle 1|_{at_0}$
- $T_{12at_0} = a_{12}^{\dagger} \otimes I_{tp} \otimes |2\rangle \langle 1|_{at_0} + a_{12} \otimes I_{tp} \otimes |1\rangle \langle 2|_{at_0}$
- $T_{23at_0} = a_{23}^{\dagger} \otimes \sigma_{tp} \otimes |3\rangle \langle 2|_{at_0} + a_{23} \otimes \sigma_{tp}^{\dagger} \otimes |2\rangle \langle 3|_{at_0}$
- $T_{01at_1} = a_{01}^{\dagger} \otimes \sigma_{tp} \otimes |1\rangle \langle 0|_{at_1} + a_{01} \otimes \sigma_{tp}^{\dagger} \otimes |0\rangle \langle 1|_{at_1}$
- $T_{12at_1} = a_{12}^{\dagger} \otimes I_{tp} \otimes |2\rangle \langle 1|_{at_1} + a_{12} \otimes I_{tp} \otimes |1\rangle \langle 2|_{at_1}$
- $T_{23at_1} = a_{23}^{\dagger} \otimes \sigma_{tp} \otimes |3\rangle \langle 2|_{at_1} + a_{23} \otimes \sigma_{tp}^{\dagger} \otimes |2\rangle \langle 3|_{at_1}$

Для описания эволюции системы используем гамильтониан:

$$\begin{aligned}
H = & P_{at_0} + P_{at_1} + P_{tp} + E_{01} + E_{12} + E_{23} \\
& + g_{01} T_{01at_0} + g_{12} T_{12at_0} + g_{23} T_{23at_0} \\
& + g_{01} T_{01at_1} + g_{12} T_{12at_1} + g_{23} T_{23at_1}
\end{aligned}$$

где g_{01} , g_{12} , g_{23} – интенсивность перехода электронов.

В качестве факторы декогеренции, учитываем утечку фотонов всех типов.

$$A_{01} = a_{01} \quad (\text{с интенсивностью } \gamma_{01})$$

$$A_{12} = a_{12} \quad (\text{с интенсивностью } \gamma_{12})$$

$$A_{23} = a_{23} \quad (\text{с интенсивностью } \gamma_{23})$$

Вычислим эволюцию системы по уравнению Линдблада:

$$i\hbar\dot{\rho} = (H\rho - \rho H) + i \sum_j \gamma_j (A_j \rho A_j^\dagger - \frac{1}{2}(A_j^\dagger A_j \rho + \rho A_j^\dagger A_j))$$

2.4 Тёмное состояние

Эта модель имеет такое специальное тёмное состояние с RWA (Rotating Wave Approximation), как показано на **рис. 3**. Оно является линейной комбинации двух собственных состояний.

Запишем в нотации Дирака (состояние других компонентов опущено):

$$|s\rangle_{at_0 at_1} = |1\rangle_{at_0} |2\rangle_{at_1} - |2\rangle_{at_0} |1\rangle_{at_1}$$

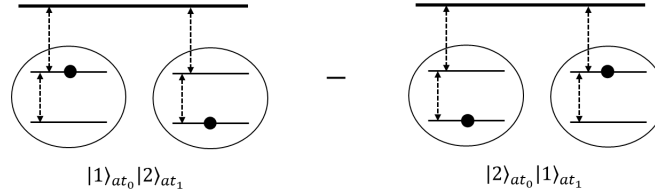


Рис. 3. Схема оптической интерпретации

При этом ходя в системе есть атом на возбуждённом состоянии, из-за интерференции волны вероятности, система не может испускать фотона, поскольку

$$(T_{12at_0} + T_{12at_1}) |s\rangle_{at_0 at_1} = 0$$

Тогда это состояние в какой-то степени стабильно, но с высокой энергией.

Если вышесказанная химическая система (см. **гальв. 2**) эволюционирует с утечкой фотонов всех типов. После достаточно долгого времени, мы получим в конце концов только те стабильные состояния.

Например (см. **рис. 4**), начнём с такого состояния, что все электроны у одного атома. Ещё добавлен фотон, чтобы электрон смог возбудиться на транспортный уровень. Система эволюционирует с утечкой фотонов. В результате получим суперпозицию 4-ёх конечных состояний. И видно, что среди их, есть состояние $|s\rangle_{at_0 at_1}$.

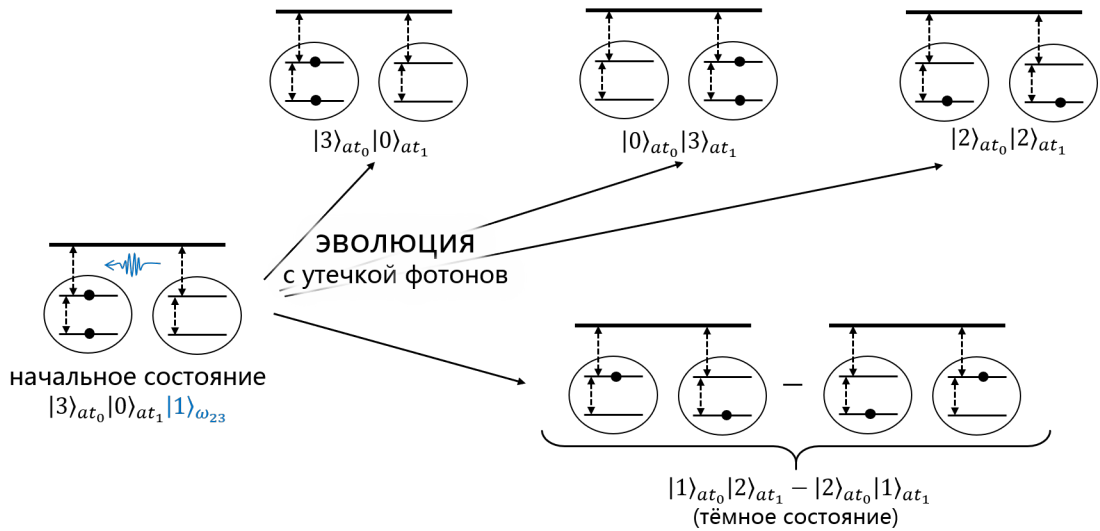


Рис. 4. Схема эволюции системы с утечкой фотонов

На самом деле, они все являются тёмными состояниями, поскольку они не могут испускать фотон. Но среди них, состояние $|s\rangle_{at_0at_1}$ является очень специальным. Потому что, очевидно другие состояния не требуют ни какую связь между двумя атомами, т. е. они возможно существуют с отдельными двумя атомами. Однако, состояние $|s\rangle_{at_0at_1}$ возможно существует в парах атома.

Существование состояния $|s\rangle_{at_0at_1}$ тесно связано со свойством материала. Оно может соответствовать какой-то структуре материала. Или такое состояние существует в качестве промежуточного состояния химической реакции. А другие состояния, поскольку стабильны, они могут долгое время существовать, поэтому также играют важную роль.

Для оптической интерпретации химической модели, главная цель заключается в том, чтобы предсказывать существование таких тёмных состояний.

3 Оптическая интерпретация

3.1 Системы для оптической интерпретации

В рис. 5 показана схема системы для оптической интерпретации. Структура похожа на химическую – два двухуровневых атома в многомодовой оптической полости.

Эти атомы такие же, как в химической модели. Но разница в том, что атомы изолированы для перехода электронов, т. е. у них транспортный уровень разделенный.

Тогда состояние двух транспортных уровня записывается как:

- $|n_{tp_0}\rangle_{tp_0}|n_{tp_1}\rangle_{tp_1}$ – на транспортном уровне левого атома n_{tp_0} электронов, а на транспортном уровне правого атома n_{tp_1} электронов.

Кроме этого, ещё искусственно создан так называемый “анодный уровень” с потенциалом

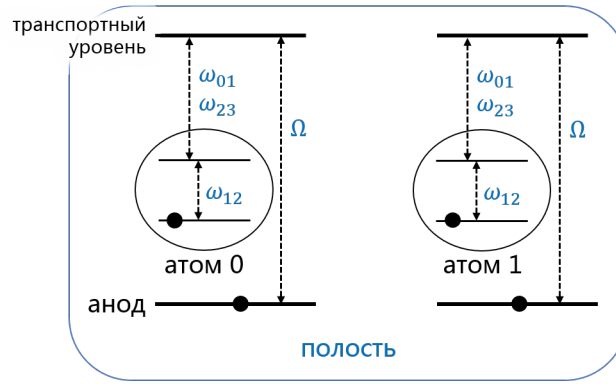


Рис. 5. Схема оптической интерпретации

$-\hbar\Omega$. Анодный уровень, также является энергетической полосой, состоящей из очень много орбит, как транспортный уровень. И видно, что анодный уровень тоже разделенный.

Тогда состояние двух анодных уровня записывается как:

- $|n_{an_0}\rangle_{an_0} |n_{an_1}\rangle_{an_1}$ – на анодном уровне левого атома n_{an_0} электронов, а на анодном уровне правого атома n_{an_1} электронов.

Между транспортным уровнем и анодным можно переходят электроны. При переходе, система испускать или поглощать фотоны с энергией $\hbar\Omega$. Полость должна такой тип фотона тоже удерживаться. Тогда в системе дополнительный тип фотона – фотон Ω .

Состояние поля в полости:

- $|n_{01}\rangle_{\omega_{01}} |n_{12}\rangle_{\omega_{12}} |n_{23}\rangle_{\omega_{23}} |n_{\Omega}\rangle_{\Omega}$ – состояние, при котором есть в полости n_{01} фотонов ω_{01} , n_{12} фотонов ω_{12} , n_{23} фотонов ω_{23} , n_{Ω} фотонов Ω , соответственно.

3.2 Интерпретация перехода электрона

С модели оптической интерпретации, переход электрона интерпретируется фотоном Ω .

Напомним процесс перехода электрона в химической модели (см. **рис. 6**):

1. Электрон на орбите 1 у левого атома, поглотив фотон ω_{01} (или фотон ω_{23}), поднимается на транспортный уровень.
2. Этот электрон из транспортного уровня спускается на орбиту 1 у другого атома, испуская фотон ω_{01} (или фотон ω_{23}).

А в системе оптической интерпретации: (см. **рис. 7**):

1. Электрон на орбите 1 левого атома, поглотив фотон ω_{01} (или фотон ω_{23}), поднимается на левый транспортный уровень.
2. Этот электрон из транспортного уровня спускается на анодный уровень, испуская фотон Ω .
3. Этот фотон Ω может взаимодействовать с электроном на анодном уровне в другой стороне, поднимая тот электрон на правый транспортный уровень.

4. Тот электрон из транспортного уровня спускается на орбиту 1 у правого атома, испуская фотон ω_{01} (или фотон ω_{23}).

Это сложный процесс. Но важно, что при этом заряженные частицы длинные расстояния не идут. Лишние электроны, которые уже вне химической системы, хранятся на анодный уровень. Далеко перемещаться только фотоны. Так мы сможем хорошо сохранить когерентность.

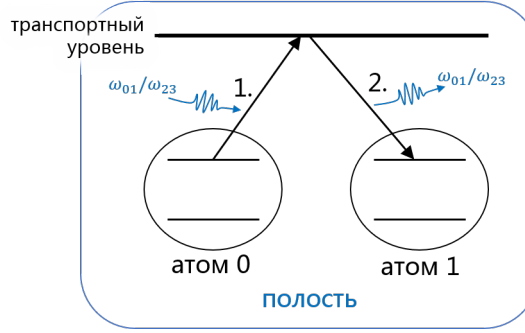


Рис. 6. Переход электрона в химической модели

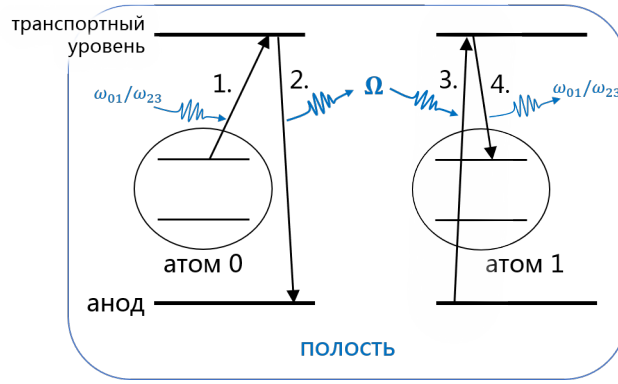


Рис. 7. Оптическая интерпретация перехода электрона

3.3 Эволюция системы

В системе оптической интерпретации, лестничные операторы похожи на те в химической системе, только у нас разделенные транспортные уровни, добавлены анодные уровни (тоже разделены), и ещё добавлен фотон Ω .

- $a_{01} = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} |k\rangle \langle k+1|_{\omega_{01}}$ – уничтожение одного фотона ω_{01}
- a_{01}^{\dagger} – рождение одного фотона ω_{01}
(аналогично для других типов фотонов: a_{12} , a_{23} и a_{Ω})
- $\sigma_{tp_0} = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} |k\rangle \langle k+1|_{tp_0}$ – приход одного электрона на левый транспортный уровень.
- $\sigma_{tp_0}^{\dagger}$ – уход одного электрона из левого транспортного уровня.
(аналогично для правого: σ_{tp_1})

- $\sigma_{an_0} = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} |k\rangle \langle k+1|_{an_0}$ – приход одного электрона на левый транспортный уровень.
- $\sigma_{an_0}^\dagger$ – уход одного электрона из левого транспортного уровня.
(аналогично для правого: σ_{an_1})

Энергия фотона ω_{01} , ω_{12} и ω_{23} одинакова как в химической системы.

А энергия фотона Ω :

- $E_\Omega = \hbar a_\Omega^\dagger a_\Omega$

Потенциал транспортного уровня и анодного уровня:

- $P_{tp_0} = 0$ (ноль для любых количество электронов)
- $P_{tp_1} = 0$ (ноль для любых количество электронов)
- $P_{an_0} = \sum_{k=0}^{\infty} (-k\hbar\Omega) \sigma_{tp_0}^\dagger \sigma_{tp_0}$ (количество электронов умножить на потенциал)
- $P_{an_1} = \sum_{k=0}^{\infty} (-k\hbar\Omega) \sigma_{an_1}^\dagger \sigma_{an_1}$ (количество электронов умножить на потенциал)

Поскольку атомы такие же, потенциал атомов одинаковый, как для химической модели.

Переходы состояния атома также, но только с разделенными транспортными уровнями.

Ещё добавлен переход электронов между транспортным и анодным уровнем:

- $T_{01at_0} = a_{01}^\dagger \otimes \sigma_{tp_0} \otimes |1\rangle \langle 0|_{at_0} + a_{01} \otimes \sigma_{tp_0}^\dagger \otimes |0\rangle \langle 1|_{at_0}$
- $T_{12at_0} = a_{12}^\dagger \otimes |2\rangle \langle 1|_{at_0} + a_{12} \otimes |1\rangle \langle 2|_{at_0}$
- $T_{23at_0} = a_{23}^\dagger \otimes \sigma_{tp_0} \otimes |3\rangle \langle 2|_{at_0} + a_{23} \otimes \sigma_{tp_0}^\dagger \otimes |2\rangle \langle 3|_{at_0}$
- $T_{\Omega tp_0} = a_\Omega^\dagger \otimes \sigma_{tp_0} \otimes \sigma_{an_0}^\dagger + a_\Omega \otimes \sigma_{tp_0}^\dagger \otimes \sigma_{an_0}$
(аналогично для правой части: $T_{01at_1}, T_{12at_1}, T_{23at_1}, T_{\Omega tp_1}$)

Гамильтониан системы будет:

$$\begin{aligned} H = & P_{at_0} + P_{at_1} + P_{tp_0} + P_{tp_1} + P_{an_0} + P_{an_1} + E_{01} + E_{12} + E_{23} + E_\Omega \\ & + g_{01} T_{01at_0} + g_{12} T_{12at_0} + g_{23} T_{23at_0} + g_\Omega T_{\Omega 0} \\ & + g_{01} T_{01at_1} + g_{12} T_{12at_1} + g_{23} T_{23at_1} + g_\Omega T_{\Omega 1} \end{aligned}$$

В качестве факторы декогеренции, учитываем утечку фотонов всех типов.

$$A_{01} = a_{01} \quad (\text{с интенсивностью } \gamma_{01})$$

$$A_{12} = a_{12} \quad (\text{с интенсивностью } \gamma_{12})$$

$$A_{23} = a_{23} \quad (\text{с интенсивностью } \gamma_{23})$$

$$A_\Omega = a_\Omega \quad (\text{с интенсивностью } \gamma_\Omega)$$

Вычислим эволюцию системы тоже по уравнению Линдблада:

$$i\hbar \dot{\rho} = (H\rho - \rho H) + i \sum_j \gamma_j (A_j \rho A_j^\dagger - \frac{1}{2} (A_j^\dagger A_j \rho + \rho A_j^\dagger A_j))$$

4 Вычислительные эксперименты

4.1 Эволюции системы

Проведены вычислительные эксперименты чтобы воспроизводить эволюции системы по времени. Так мы сможем сравнить результаты эволюции химической модели и оптической интерпретации. Компьютерное моделирование и вычисление выполняются с помощью пакет BraAndKet (на языке python). Смотрите приложенный **параграф 6.2** для деталей.

Мы воспроизводили эволюции системы на несколько случаях.

4.1.1 Случай 1

Это случай как пример на **рис. 4**. Начальное состояние такое, что левое атом имеет 2 электрон, а правое атом нет имеет электрон. И ещё добавлен один фотон ω_{23} , чтобы возбудить электрон на транспортный уровень. Таким образом электроны смогут достигать до другого атома. Для оптической интерпретации, поскольку фотон Ω играет важную роль на интерпретации переход электронов между атомами, в этом случае, не учитываем утечку фотон Ω , т. е. $\gamma_{\Omega} = 0$.

Конфигурация для химической модели:

- Начальное состояние: $|3\rangle_{at_0} |0\rangle_{at_1} \otimes |0\rangle_{tp} \otimes |0\rangle_{\omega_{01}} |0\rangle_{\omega_{12}} |1\rangle_{\omega_{23}}$
- $g_{01} = g_{12} = g_{23} = 0.02 \quad \gamma_{01} = \gamma_{12} = \gamma_{23} = 0.002$

Конфигурация для оптической интерпретации:

- Начальное состояние: $|3\rangle_{at_0} |0\rangle_{tp_0} |0\rangle_{an_0} \otimes |0\rangle_{at_1} |0\rangle_{tp_1} |2\rangle_{an_1} \otimes |0\rangle_{\omega_{01}} |0\rangle_{\omega_{12}} |1\rangle_{\omega_{23}} |0\rangle_{\Omega}$
- $g_{01} = g_{12} = g_{23} = g_{\Omega} = 0.02 \quad \gamma_{01} = \gamma_{12} = \gamma_{23} = 0.002 \quad \gamma_{\Omega} = 0$

На **рис. 8** показаны кривые изменения вероятностей состояний системы химической модели. А на **рис. 9** показаны такие же кривые для системы оптической интерпретации. Видно, что конечные состояния хорошо соответствуют химической. Даже вероятности близки. Но скорости сходимости очевидно различаются. Скорость сходимости оптической интерпретации значительно медленнее. Поэтому, оптическая интерпретация хорошо предсказывает долгосрочные результаты химических реакции, но не может точно воспроизводить динамику.

4.1.2 Случай 2

Это случай похож на предыдущий, но в начальном состоянии добавлен ещё два фотона – фотон ω_{01} и фотон ω_{12} . Таким образом, система имеет в начале больше энергии. Тогда система станет активнее. А доля вероятности конечных состояний станут разными.

Конфигурация для химической модели:

- Начальное состояние: $|3\rangle_{at_0} |0\rangle_{at_1} \otimes |0\rangle_{tp} \otimes |1\rangle_{\omega_{01}} |1\rangle_{\omega_{12}} |1\rangle_{\omega_{23}}$

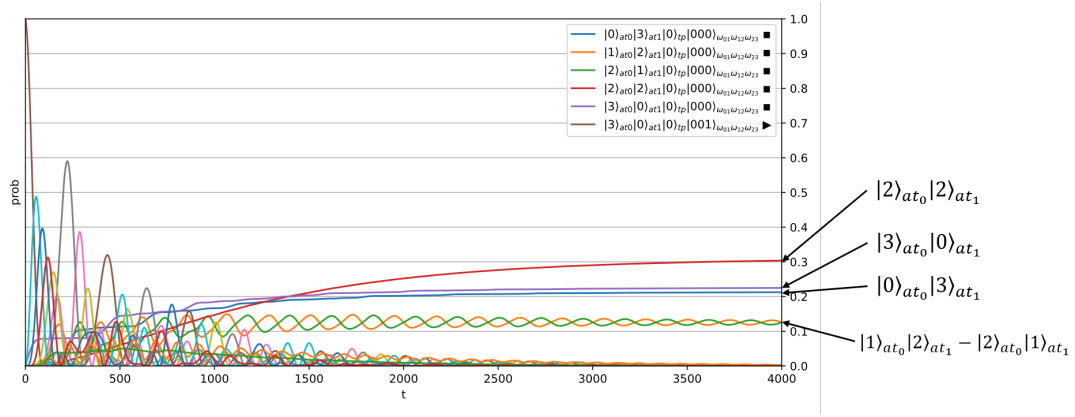


Рис. 8. Эволюции системы химической модели (случай 1)

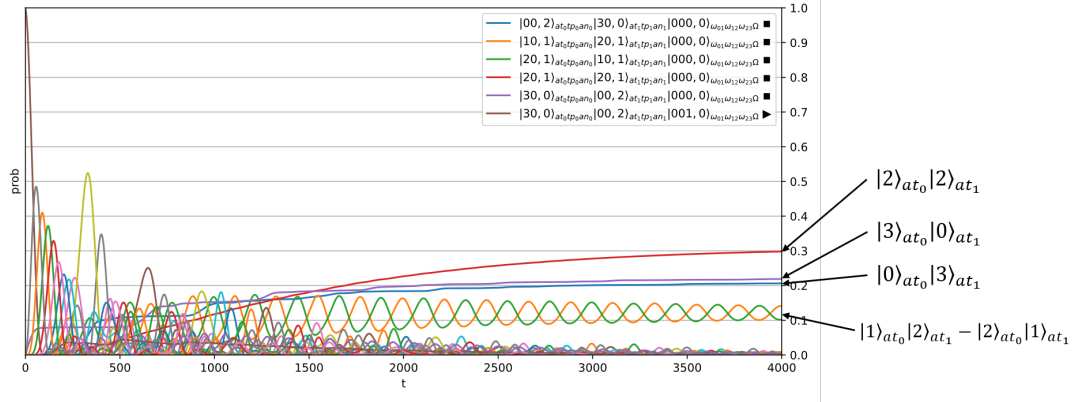


Рис. 9. Эволюции системы оптической интерпретации (случай 1)

$$\bullet \quad g_{01} = g_{12} = g_{23} = 0.02 \quad \gamma_{01} = \gamma_{12} = \gamma_{23} = 0.002$$

Конфигурация для оптической интерпретации:

- Начальное состояние: $|3\rangle_{at_0} |0\rangle_{tp_0} |0\rangle_{an_0} \otimes |0\rangle_{at_1} |0\rangle_{tp_1} |2\rangle_{an_1} \otimes |1\rangle_{\omega_{01}} |1\rangle_{\omega_{12}} |1\rangle_{\omega_{23}} |0\rangle_{\Omega}$
- $g_{01} = g_{12} = g_{23} = g_{\Omega} = 0.02 \quad \gamma_{01} = \gamma_{12} = \gamma_{23} = 0.002 \quad \gamma_{\Omega} = 0$

На рис. 10 показаны кривые изменения вероятностей состояний системы химической модели. А на рис. 11 показаны такие же кривые для системы оптической интерпретации. Ситуация похожа на случай 1. Конечные результаты соответствуются очень хорошо, но скорости сходимости различаются.

4.2 Влияние параметров на точность

Как видно из предыдущей экспериментов, конечные состояния в оптической интерпретации хорошо соответствуют химической модели. Даже их вероятности очень близки. А на сколько близко?

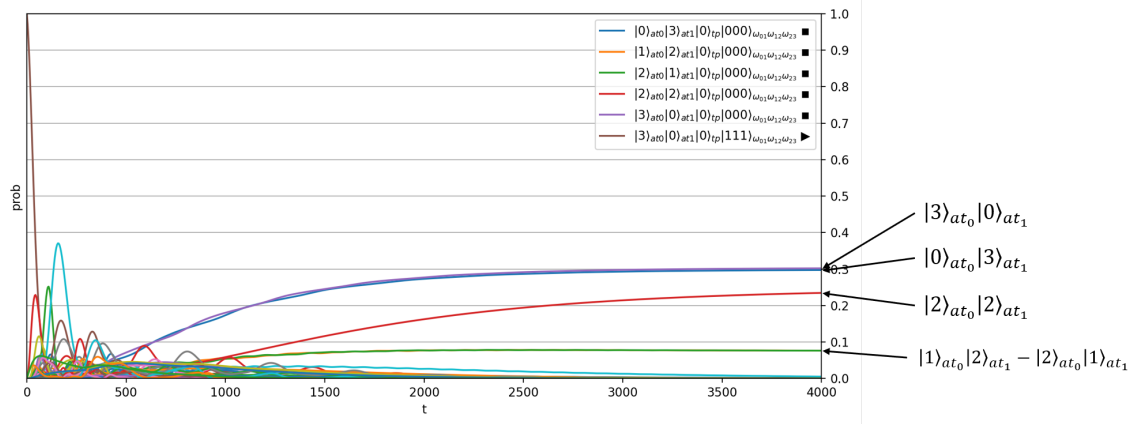


Рис. 10. Эволюции системы химической модели (случай 2)

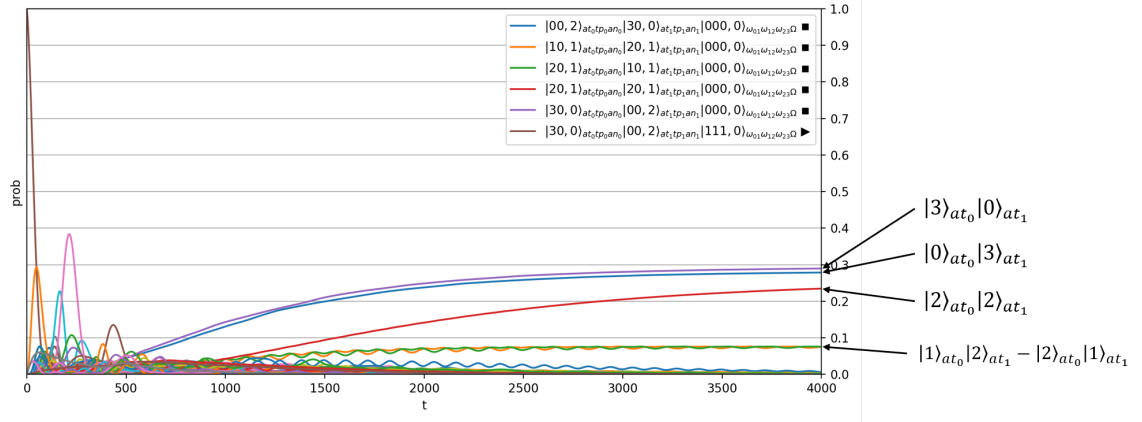


Рис. 11. Эволюции системы оптической интерпретации (случай 2)

Оцениваем точность по уравнению:

$$Acc = \sum_{k=1}^4 \sqrt{p_k \hat{p}_k}$$

где p_k — вероятность k -го конечного состояния химической модели.

\hat{p}_k — вероятность k -го конечного состояния оптической интерпретации.

Acc — точность оптической интерпретации (в диапазоне 0.0 — 1.0)

Это по смыслу похоже на Fidelity. Единица — совершенно точно. А ноль — совершенно не точно. Но сдзть точность так считается, как конечное состояние все являются чистыми.

Поскольку фотон Ω игнает важную роль в оптической интерпретации. На основном исследовано влияние двух параметров, связанных с фотон $\Omega - g_{\Omega}$ и γ_{Ω} .

4.2.1 Влияние g_{Ω} на точность

Параметр g_{Ω} — интенсивность взаимодействия между транспортным и анодным уровнем, или другими словами, проводимость электронов между этими уровнями.

Исследовано влияние g_Ω на точности оптической интерпретации. Результаты показаны на **рис. 12**. Параметры (кроме g_Ω) настроены так, как случай 1 (см. 4.1.1)

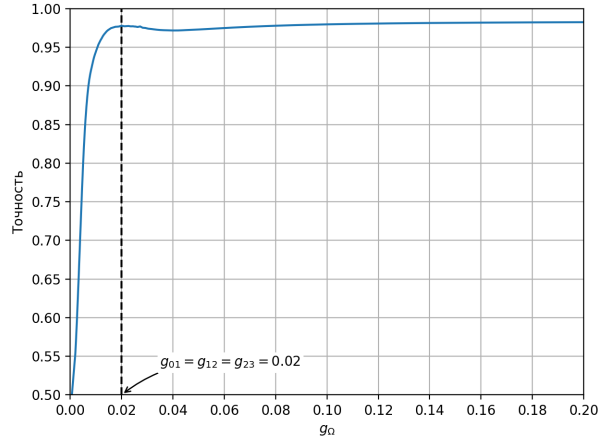


Рис. 12. Влияние g_Ω на точность

Видно, чтобы получить высокую точность, требуется высокое значение g_Ω , хотя бы до масштаба значения g_{01} , g_{12} , g_{23} (интенсивность переход электронов). Это будет одним из трудностей для физической реализации.

4.2.2 Влияние γ_Ω на точность

Параметр γ_Ω — интенсивность утечки фотона Ω .

Исследовано влияние γ_Ω на точности оптической интерпретации. Результаты показаны на **рис. 13**. Параметры (кроме γ_Ω) настроены так, как случай 1 (см. 4.1.1)

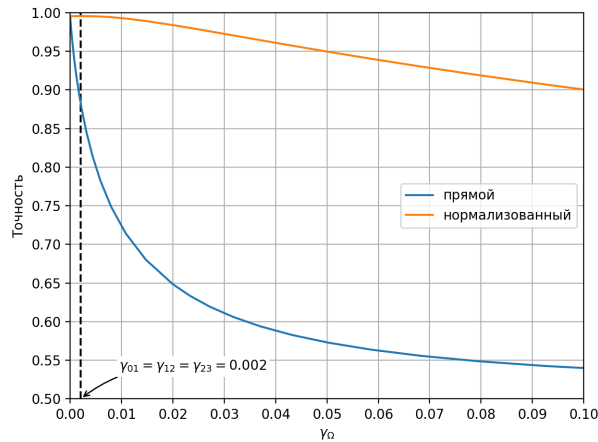


Рис. 13. Влияние γ_Ω на точность

Видно, что с утечкой фотонов Ω , появились новые состояния, не соответствующие ни какому состоянию в химической модели. Это снизит вероятности ожидаемых 4 состояния, и соответственно, значительно снизит точность (синяя линия). Чтобы с этим бороться, мы можем

нормировать вероятностей тех 4-ёх состояний, игнорируя другие состояний. Тогда мы получим вышее точность (оранжевая линия).

По сравнению с интенсивностью других фотонов (γ_{01} , γ_{12} и γ_{23}), видно, что утечка фотона Ω на графике уже достаточно велика. А точность снижает не так значительно. Значит, что утечка фотона γ_{Ω} на самом деле влияет на точность не так сильно. Но всё-таки чем меньше утечка, тем лучше.

5 Заключение

В данной работе, представлена оптическая интерпретация как способ исследования химических систем. Она динамику не воспроизводит, но хорошо предсказывает долгосрочные результаты эволюции химических систем. Таким образом с помощью оптической интерпретации можем обнаружить некоторые свойства веществ, например существование тёмного состояния.

Проведены эксперименты с простой двухатомной моделей. Получилось, что оптическая интерпретация успешно предсказал все конечные состояния. И даже вероятности хорошо соответствуются. Кроме этого, оценили влияние параметров g_{Ω} (проводимость электронов между транспортными и анодными уровнями) и γ_{Ω} (интенсивность утечки фотонов Ω) на точность. Получилось, что для получения высокую точности, требуется высокое значение g_{Ω} , хотя бы до масштаба значения g_{01} , g_{12} и g_{23} (интенсивность переход электронов). А значение γ_{Ω} , не так серьёзно влияет на точность. Но всё-таки лучше быть поменьше утечка.

Представленная в данной работе модель оптической интерпретации имеет ещё ограничения. Во-первых, в модели не учитывается спин электронов. Это вряд соответствует реальности. Во-вторых, транспортный уровень и орбиты атома в данной модели тоже не так соответствует реальности. Принимали аппроксимацию транспортногo уровня. Только учитывали 2 орбитой атома. Кроме этого, модель оптической интерпретации ещё трудно физически реализовать. Трудно реализовать высокую проводимость между транспортным и анодным уровнем, трудно опеспечить, что при переходе электрическая потенциальная энергия полностью преобразуется в энергию фотонов, трудно запретить переход электрона между двумя атомами в одной и той же полости.

Хотя до практичности ещё далеко, оптическая интерпретация всё-таки дает новую идею химического квантового компьютера. А вышесказанные трудности и ограничения избавиться возможно. В будущее время, может быть, квантовый компьютер, предназначенный специально для химии, будет иметь вид, сильно отличающийся от универсального квантового компьютера.

6 Приложения

6.1 Аппроксимация транспортного уровня

В данной работе, при определении химической модели используется транспортный уровень.

Можно так понять транспортный уровень: конденсированное вещество состоит из множества атомов. Обычно волна де Бройля электронов имеет большую амплитуду только вокруг одного из атомов. А согласно теории свободный электронный газ, можно существуют электроны, волна де Бройля которых распространяется по всему атомам. Такие электроны имеют высокий потенциал. Поскольку волна де Бройля распространяется по всему атомам, эти электроны могут взаимодействовать с любым из атомов, поэтому названы транспортными. Волна де Бройля может иметь разные частот (волновой вектор), соответственно электроны могут иметь разные потенциалы, или другими словами, существуют орбиты с разными потенциалы. (Для кристаллов даже можно решить конкретные значения потенциалы.) Потенциалы между этими орбиталями очень близки. Таким образом, эти орбиты образуют энергетическую полосу. А эта полоса называем транспортным уровнем.

Согласно принцип запрета Паули, на одной орбите можно находиться не более одного электрона. Но на транспортном уровне, количество орбит огромно, даже почти бесконечно. Поэтому считем, что на нём можно находиться сколько угодно электронов, как фотоны в поле. Но электроны следуют распределению Ферми-Дирака, а фотоны следуют распределению Бозе-Эйнштейна.

Например, пусть у нас всего N орбит на транспортном уровне (N – очень большое число) с одинаковым потенциалом. Тогда можем определить состояние:

$$\begin{aligned} |0\rangle_{tp} &= |000 \dots 0\rangle \\ |1\rangle_{tp} &= \frac{1}{N}(|100 \dots 0\rangle + |010 \dots 0\rangle + |001 \dots 0\rangle + \dots |001 \dots 1\rangle) \\ |2\rangle_{tp} &= \frac{2}{N(N-1)}(|110 \dots 00\rangle + |101 \dots 00\rangle + \dots |100 \dots 01\rangle + |011 \dots 00\rangle) + \dots |000 \dots 11\rangle) \\ &\dots \\ |n\rangle_{tp} &= \frac{n!(N-n)!}{N!} \sum_{\sum_k n_k = n} |n_1 n_2 n_3 \dots n_N\rangle \end{aligned}$$

Поскольку орбиты все одинаковы, вероятности состояния должен быть однородны. А если учитываем разные потенциалы на орбитах и взаимно тунелирование между орбитами, согласно распределению Ферми-Дирака, должен быть ещё коэффициент. Тогда будет:

$$|n\rangle_{tp} = \sum_{\sum_k n_k = n} P(n_1, n_2, n_3, \dots, n_N) |n_1 n_2 n_3 \dots n_N\rangle$$

где $P(n_1, n_2, n_3, \dots, n_N)$ следует распределению Ферми-Дирака и нормированию вероятности. Следует отметить, что в $P(n_1, n_2, n_3, \dots, n_N)$ содежается не только вероятность и также фазы.

В данной работе, оговариваем, что вещество, которое описывается химической моделью, является изолятором. Тогда в транспортном уровне только электроны, возмущенные из атомов. А лишние электроны редки. Таким образом, значение n можно представляет абсолютное число электронов, а не число отрицательных зарядов относительно к балансу. То мы можем использовать лестничные операторы как:

- $\sigma_{tp} = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} |k\rangle \langle k+1|_{tp}$ – приход одного электрона на транспортный уровень.
- σ_{tp}^{\dagger} – уход одного электрона из транспортного уровня.

Здесь добавляется коэффициент $\sqrt{k+1}$, потому что проводимость (интенсивность перехода) пропорциональна количеству электронов.

И соответственно, оператор $\sigma_{tp}^{\dagger} \sigma_{tp} = \sum_{k=0}^{\infty} k |k\rangle \langle k|_{tp}$ становится оператором количества электронов.

6.2 Пакет BraAndKet

В данной работе для моделирования квантовых систем и вычисления их эволюции используется пакет BraAndKet.

BraAndKet – разработанный нами пакет на языке программирования python для численного моделирования конечномерных квантовых систем. Исходный код этого пакета открыт на сайте GitHub (<https://github.com/ZhengKeli/BraAndKet>). Этот пакет не предназначен для универсальных квантовых вычислений, а специально для моделирования конечномерных химических модели.

Ниже кратко представлены возможности и особенности этого пакета.

6.2.1 Кодовое представление квантовых состояний

Главная цель этого пакета заключается в том, чтобы представить удобное кодовое представление квантовых состояний (суперпозицией). При выполнении квантовых операций этот пакет помогает автоматически сопоставлять разные размерности тензоров.

Сначала определим представление Гильбертова пространство. В пакете созданы классы KetSpace и BraSpace для представления Гильбертова пространство как \mathcal{H}^n и его сопряженное как $(\mathcal{H}^n)^*$. Пример кода выглядит следующим образом:

```
ket_space = KetSpace(n) # Hilbert space
bra_space = ket_space.ct # conjugate space
```

В пакете не прямо определено комбинационное пространство как $\mathcal{H}_{AB}^{n_A \times n_B} = \mathcal{H}_A^{n_A} \otimes \mathcal{H}_B^{n_B}$. Для описания комбинационной системы (например, с компонентом A и B), просто использовать массив, состоящий из объект класса KetSpace и BraSpace.

Ещё создан класс QTensor, который может описывать и чистое квантовое состояние как $|0\rangle_A |1\rangle_B$, и оператор как $|0\rangle_A \langle 1|_B$, а также беспарное выражение как $|1\rangle_B \langle 0|_A$.

```

ket_space_a = KetSpace(na)
ket_space_b = KetSpace(nb)

psi = ket_space_a.eigenstate(0) @ ket_space_b.eigenstate(1)

op = ket_space_a.eigenstate(0) @ ket_space_b.eigenstate(1) \
    @ ket_space_a.eigenstate(1).ct @ ket_space_b.eigenstate(0).ct

exp = ket_space_b.eigenstate(1) @ ket_space_a.eigenstate(0).ct

```

Каждый объект `QTensor` держит один многомерный тензор (например, `numpy.ndarray`). Каждая размерность соответствует одному пространству или сопряжённому пространству.

```

# fake code
psi.spaces          # [ket_space_a, ket_space_b]
psi.value.shape     # [na, nb]
psi.value[0,1]      # 1
psi.value[else]     # 0

op.spaces           # [ket_space_a, ket_space_b, ket_space_a.ct, ket_space_b.ct]
op.values.shape     # [na, nb, na, nb]
op.values[0,1,1,0]  # 1
op.values[else]     # 0

exp.space           # [ket_space_b, ket_space_a.ct]
exp.values.shape    # [nb, na]
exp.values[1,0]     # 1
exp.values[else]    # 0

```

При выполнении операции как плюс, минус и умножение, `QTensor` автоматически проверяет сокращающиеся пространства и их сопряжённые, комбинирует разные пространства и расширяется при встрече новых пространств с единичной матрицей I .

6.2.2 Вычисление эволюции квантовых систем

Кроме этого, в пакете ещё инструменты для вычисления эволюции квантовых систем по уравнению Шрёдингера и уравнению Линдблада. Чтобы ускорить вычисление, применены различные оптимизации.

Во-первых, поскольку уравнению Линдблада является – дифференциальное уравнение, описывающее эволюцию по времени. Легко подумать об использовании метода Эйлера. Кроме этого, чтобы добиться вшнее точность, в пакете также реализован метод Рунге-Кутты 4-го порядка.

Во-вторых, чтобы эффективно вычислить эволюции системы. Принята такая архитектура, как показано на **рис. 14**.

Как сказано выше, при выполнении операций, выполняется ещё автоматическое

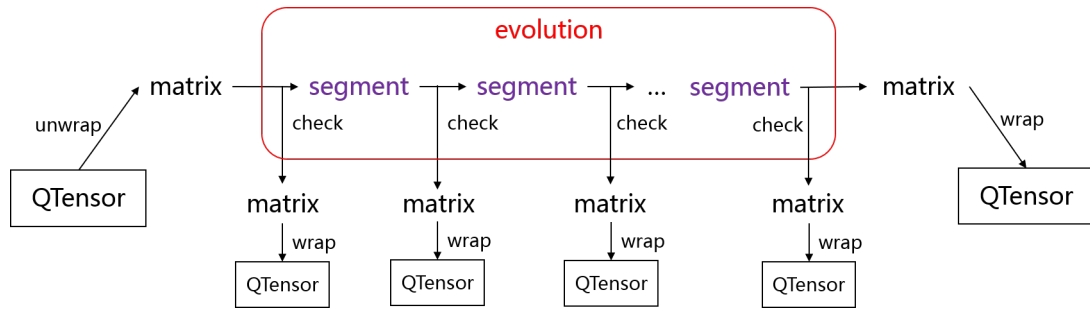


Рис. 14. Влияние γ_Ω на точность

соответствие, комбинирование и расширение пространств. Эти функционалы существуют для удобства при описании квантовых систем, но они сильно замедляют вычисление.

Поэтому перед началом тяжёлого вычисления, организуем все связанные объекты QTensor и “распаковываем” их на данные для вычисления, а при выходе в качестве результатов, опять “упаковываем” данные на объекты QTensor. Таким образом, для вычисления, можно подготовить данные в какой угодно форме, чтобы достигнуть наивысшей эффективности.

Кроме этого, поскольку вычисление может долго проводиться. В процессе ещё настроены контрольные точки (checkpoints), при котором можем извлекать, проверять или корректировать промежуточное состояние системы. При этом тоже производится “упаковка” и “распаковка”. А между контрольными точками – сегмент вычисления без возмущения, в котором можно применить какие угодно алгоритмы и средства чтобы эффективно, быстро и точно получить состояние на следующей контрольной точке.

Такая архитектура даёт большую возможность ускорить вычисление.

6.2.3 Обрезка квантовых моделей

В том оптимизация специально для квантовых задач – обрезка квантовых моделей, при котором недоступные при эволюции собственные состояния системы распознаются и убираются. Осталась упрощённая квантовая система, с которой вычисление занимает гораздо меньше памяти и время.

Например, пусть A и B – связанные волокном одинаковые оптические полости. А состояние $|n_A\rangle_A$ и $|n_B\rangle_B$ описывают количества фотонов в полостях. При эволюции, учитываем утечку фотонов. Если начнём с состояния $|1\rangle_A |0\rangle_B$, то очевидно, что достигаемые состояния при эволюции лишь 3 – $|1\rangle_A |0\rangle_B$, $|0\rangle_A |1\rangle_B$ и $|0\rangle_A |0\rangle_B$. А состояния как $|1\rangle_A |1\rangle_B$, $|2\rangle_A |1\rangle_B$, $|1\rangle_A |2\rangle_B$ и т. д. не достигаемы. Тогда можем переиндексировать состояния системы:

$$|0\rangle_{AB} = |1\rangle_A |0\rangle_B \quad |1\rangle_{AB} = |0\rangle_A |1\rangle_B \quad |2\rangle_{AB} = |0\rangle_A |0\rangle_B$$

Для такой простой системы такое переиндексирование легко вручную выполнить. А для сложных систем (например, те имеющие сотни достигаемых состояний) это очень утомительный и подвержен ошибкам.

В данном пакете разработан инструмент PrunedKetSpace для выполнения такой операции. Получив начальное состояние и оператор эволюции, можем автоматически определить все доступные состояния и их переиндексировать. После этого получим образную систему, с которой гораздо быстрее и эффективнее вычисляется.

Принцип работы PrunedKetSpace заключается в следующих шагах.

1. Сначала анализируем начальное состояние, данное пользователем. Отмечаем связанные с ним собственные состояния как достигаемые.
2. Потом принимаем оператор эволюции к состоянию, получаем новое состояние. Анализируем это новое состояние и отмечаем связанные собственные состояния таким же образом.
3. Ещё принимаем оператор и опять анализируем, и т. д. Повторяем до тех пор, когда более нет новых достигаемых собственных состояний.
4. На конец переиндексируем все достигаемые собственные состояния и перестроим упрощенное начальное состояние и операторы эволюции.

После обрезки, затрат расчета эволюции обычно огромно сократится. Например при случае на 4.1.1, размер модели оптической интерпретации до обрезки – 20736, а после обрезки – 20. Поэтому этот инструмент значительно облегчает нашу работу.

7 Ссылки

(ещё добавлю)