

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ И ЯВЛЕНИЯ

Управление проводимостью двумерной графеновой сверхрешетки поперечными электрическими полями	
<i>С.Ю. Глазов, Н.Е. Мещерякова, И.А. Подгорная</i>	<i>2</i>
Квантовые свёрточные нейронные сети для мультиклассовой классификации	
<i>Д.А. Бохан, А.С. Мастюкова, А.С. Боев, Д.Н. Трубников, А.К. Федоров</i>	<i>5</i>
Расчет туннельного матричного элемента в координационном соединении терпиридина с двумя выделенными одноатомными зарядовыми центрами	
<i>С.А. Панкратов, А.А. Паршинцев, В.В. Шорохов.....</i>	<i>8</i>
Флоке-спектр дираковского кристалла в поле импульсного излучения	
<i>Д.А. Силиванов, Е.И. Кухарь, С.В. Крючков.....</i>	<i>10</i>
Особенности формирования квантового фантомного изображения с учетом эффектов самовоздействия, кросс-взаимодействия и волновой расстройки	
<i>А.В. Белинский, Р. Сингх.....</i>	<i>13</i>
Towards quantum control for many-body quantum systems	
<i>А.К. Федоров.....</i>	<i>16</i>
Моделирование и интерпретация широкополосных диэлектрических спектров жидкой воды	
<i>С.В. Чучупал, А.А. Волков</i>	<i>17</i>

Управление проводимостью двумерной графеновой сверхрешетки поперечными электрическими полями

С.Ю. Глазов^{1,2}, Н.Е. Мещерякова², И.А. Подгорная^{1,2}

¹ Волгоградский государственный социально-педагогический университет

² Волгоградский государственный медицинский университет

ser-glazov@yandex.ru

В последние годы изучению двумерных (2D) графеновых сверхрешеток (ГСР) посвящено большое количество работ: рассматриваются новые подходы к изготовлению ГСР [1-3], исследуется влияние внешних электрических полей на их транспортные свойства [3,5]. В данной работе исследована возможность управления проводимостью в двумерной графеновой сверхрешетке поперечными электрическими полями. Для расчета тока использовано решение кинетического уравнения Больцмана с модельным интегралом столкновений в приближении постоянного времени релаксации.

Энергетический спектр электронов в 2D ГСР в одноминизонном приближении выбран в виде [3]

$$\varepsilon(\vec{p}) = \sqrt{\Delta_1^2 + \Delta_2^2(1 - \cos(p_x d_1)) + \Delta_3^2(1 - \cos(p_y d_2))}, \quad (1)$$

где \vec{p} – квазиимпульс электрона, $d_i = a_i + b_i$ – период ГСР, a_i и b_i – ширины ячеек бесщелевого и щелевого графена, здесь и далее $\hbar = 1$. Отметим, что энергетический спектр ГСР неаддитивен. Как показано в [6], с увеличением периода ГСР уменьшается неаддитивность энергетического спектра. В случае слабой неаддитивности, при разложении спектра в ряд Фурье можно ограничиться первыми слагаемыми

$$\varepsilon(\vec{p}) = \Delta \{g_0 - g_1 [\cos(p_x d) + \cos(p_y d)] - g_2 \cos(p_x d) \cos(p_y d)\}. \quad (2)$$

В плоскости ГСР приложено постоянное и переменное электрические поля $\vec{E} = (E_{1x} + E_{0x} \cos \omega t, E_{1y} + E_{0y} \cos \omega t)$, где E_0 и ω – амплитуда и частота переменного электрического поля, E_l – модуль напряженности постоянного электрического поля.

Для невырожденного электронного газа получена постоянная составляющая плотности тока, текущего вдоль оси одной из осей ГСР

$$j_x = j_0 \sum A_{nm} C_{nm} \sin \varphi_{knm} \cos \varphi_{knm} J_k^2(n\alpha_x + m\alpha_y), \quad (3)$$

где $j_0 = -ed_1 n \Delta / 2$, n – концентрация электронов в зоне проводимости, N – концентрация примесей в графене, $J_n(x)$ – функция Бесселя 1-го рода n -го порядка, ν – частота столкновений, $\Omega_x = eE_{1x} d_1$, $\Omega_y = eE_{1y} d_2$, $\sin \varphi_{knm}^\pm = \nu / \sqrt{\nu^2 + (m\Omega_x \pm n\Omega_y + k\omega)^2}$, $\alpha_x = eE_{0x} d_1 / \omega$, $\alpha_y = eE_{0y} d_2 / \omega$, A_{nm} и C_{nm} – коэффициенты, определяемые спектром (1), в силу громоздкости формул не приводим. В случае слабой неаддитивности спектра (4) переходит в выражение

$$j_x = j_0 \sum_{k=-\infty}^{\infty} \{g_1 A \sin \varphi_k \cos \varphi_k J_k^2(\alpha_x) + g_2 B [\sin \varphi_k^+ \cos \varphi_k^+ J_k^2(\alpha_x + \alpha_y) + \sin \varphi_k^- \cos \varphi_k^- J_k^2(\alpha_x - \alpha_y)]\}. \quad (4)$$

Из формул (3,4) можно увидеть, что постоянная составляющая плотности тока, текущего вдоль оси x , определяется не только полями, ориентированными вдоль этой

оси, но и полями, ориентированными перпендикулярно. Это зависимость является следствием неаддитивности энергетического спектра ГСР.

Для расчета выбрана симметричная ГСР ($d_1 = d_2 = d = 2 \cdot 10^{-6}$ см.). Для этого случая ширина запрещенной зоны между валентной минизоной и минизоной проводимости $\varepsilon_g = 0.8434\Delta$; ширина запрещенной зоны между первой и второй минизонами проводимости $\varepsilon_{g12} = 0.6270\Delta$; ширину первой минизоны проводимости $\varepsilon_e = 0.2111\Delta$.

Приведем один из примеров исследования плотности тока. Выберем направление вектора напряженности постоянного электрического поля вдоль одной из осей ГСР. Зависимость плотности тока от угла φ поворота вектора поляризации переменного электрического поля относительно оси x , при фиксированных значениях параметров внешних электрических полей показана на рис. 1. Для значения угла $\varphi = \pi/2$ ярко прослеживается возможность управления проводимостью поперечными полями. В рассматриваемом в работе частном случае ($d = 2 \cdot 10^{-6}$ см) энергетический спектр обладает слабой неаддитивностью, что и проявляется в слабой зависимости плотности тока от поперечного электрического поля. При уменьшении периода ГСР возможность управления проводимостью поперечными электрическими полями увеличивается.

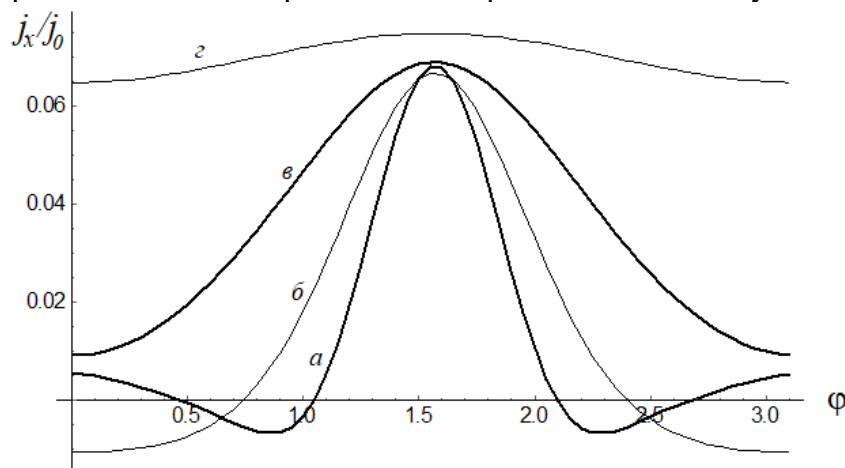


Рис. 1. Зависимость плотности тока от угла поворота φ переменного поля, когда $\Omega_x/\nu = 1.0$, $\omega/\nu = 2.0$: а) $\alpha = 7$; б) $\alpha = 5$; в) $\alpha = 3$; г) $\alpha = 1$.

В работе использовано одноминизонное приближение, пренебрегалось межминизонными переходами, что соответствует выполнению условий: $\hbar\omega \ll \varepsilon_g, \varepsilon_{g12}$ ($\omega \ll 1.2 \cdot 10^{14}$ с $^{-1}$), $k_bT \ll \varepsilon_g, \varepsilon_{g12}$ ($T \ll 10^3$ К). При расчете плотности тока использован квазиклассический подход, приводящий к условиям на параметры полей: $\omega < 10^{13}$ с $^{-1}$; $edE_0/\hbar\nu$, $edE_1/\hbar\nu \ll 1.2 \cdot 10^3$. Для численных расчетов использованы следующие параметры: $n=10^{11}$ см $^{-2}$, $\tau = \nu^{-1} \approx 10^{-11}$ с., $T=70$ К. Численная оценка величины поля E при $edE/\hbar\nu=1$ составляет 33 В/см.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Forsythe et al // Nature Nanotechnology. 2018. V. 13. P. 566.
2. Y. Zhang, Y. Kim, M.J. Gilbert and N. Mason // NPJ 2D Materials and Applications. 2018. V. 2. P. 31.
3. S.V. Kryuchkov, C.A. Popov // Journal of Nano- and Electronic Physics. 2017. V. 9. № 2. P. 02013.
4. П.В. Бадикова, С.Ю. Глазов, Г.А. Сыродоев // ФТП. 2019. Т. 7. В. 53. С. 927.

5. П.В. Бадикова, С.Ю. Глазов, Г.А. Сыродоев // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 1. С.38.
6. С.Ю. Глазов, Г.А. Сыродоев // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 1. С.128.

Квантовые свёрточные нейронные сети для мультиклассовой классификации

Д.А. Бохан^{1,2,*}, А.С. Мастюкова^{2,3}, А.С. Боев², Д.Н. Трубников¹, А.К. Федоров^{2,3,+}

¹ Лаборатория молекулярных пучков, отделение физической химии, химический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва 119991, Россия

² Российский квантовый центр, Сколково, Москва, 143025, Россия

³ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва 119049, Россия

*denisbokhan@mail.ru

+akf@rqc.ru

Мультиклассовая (полиномиальная) классификация представляет большой интерес для различных приложений машинного обучения, например, для обычной задачи в компьютерном зрении, где нужно разделить изображение на три или более классов. В этой работе мы предлагаем подход квантового машинного обучения, основанный на квантовых свёрточных нейронных сетях (QCNN) для решения такой задачи. Соответствующая процедура обучения реализована через TensorFlowQuantum в виде гибридной квантово-классической (вариационной) модели, где результаты квантового вывода подаются в целевую функцию softmax с последующей ее минимизацией за счет оптимизации параметров квантовой схемы. Наши концептуальные усовершенствования включают новую модель квантового персептрона и оптимизированную структуру квантовой схемы. Мы используем предложенный подход, чтобы продемонстрировать 4-классовую классификацию для случая набора данных MNIST (объёмная база данных образцов рукописного написания цифр) с использованием восьми кубитов для кодирования данных и четырех кубитов-анцилл. Мы ожидаем, что наше открытие сделает новый шаг к использованию квантового машинного обучения для решения практически важных задач в эпоху NISQ-устройств (шумные устройства промежуточного масштаба) и в последующие годы развития квантовых технологий.

Квантовые вычисления в настоящее время широко рассматриваются как новая парадигма, которая, используя явления квантовой физики, такие как суперпозиция и запутанность, позволяет решать различные проблемы, неразрешимые для классических вычислительных устройств. В модели на основе квантовых вентилях квантовые алгоритмы реализуются как последовательность логических операций над кубитами, которые составляют соответствующие квантовые схемы, завершающиеся измерениями, выборочными по кубитам. В отличие от классического случая, когда для описания состояния n бит достаточно одной строки из n нулей и единиц, для описания состояния физической системы из n кубитов может потребоваться 2^n комплексных чисел. Использование NISQ-устройств в контексте квантово-классической (вариационной) модели стало ведущей стратегией их использования. Рабочий процесс вариационных квантовых алгоритмов, в котором параметры схемы итеративно обновляются (оптимизируются), напоминает классические процедуры обучения. Краеугольной проблемой различных подходов, основанных на машинном обучении, является классификация, поэтому она широко рассматривается с точки зрения потенциального ускорения с использованием квантовых вычислений. В этой работе мы представляем квантовый мультиклассовый классификатор, основанный на архитектуре QCNN (квантовые свёрточные нейронные сети). Разработанный подход использует традиционное использование свёрточных нейронных сетей, когда после нескольких свёрточных слоев размещается несколько полносвязных слоев. Полученные результаты классификации 4-х классов изображений MNIST подтверждают возможность

эффективного использования разработанного подхода. Насколько нам известно, наша работа является первой такой демонстрацией.

На первом этапе реализуем амплитудное кодирование входных данных, в нашем случае изображений MNIST. Мы рассматриваем изображения MNIST, которые перемасштабированы с 28 на 28 до 16 на 16 пикселей, и, таким образом, для реализации квантовых схем требуется 8 кубитов. В терминах состояний кубитов закодированные изображения могут быть выражены следующим образом

$$\Psi_k = \sum_{m=0}^N C_m^k |m\rangle, \quad (1)$$

где k – индекс изображения, а $|m\rangle$ – регистр кубитов из 8 кубитов, кодирующих индекс m , и $N = 255$. Коэффициенты C_m^k равны элементам нормализованных векторов выравнивания изображений.

Сначала мы используем процедуру амплитудного кодирования, в которой вспомогательные кубиты используются для однократного кодирования класса целевых изображений. Предварительный анализ закодированных изображений выполняется с помощью 3 сверточных слоев с размерами фильтров, равными 4, 3 и 2 соответственно. Каждый такой слой состоит из 2-х подслоев, которые необходимы для поддержания трансляционной инвариантности (по крайней мере, частично), и все фильтры одного размера содержат одинаковые обучаемые параметры, как это имеет место в случае классических сверточных нейронных сетей (CCNN).

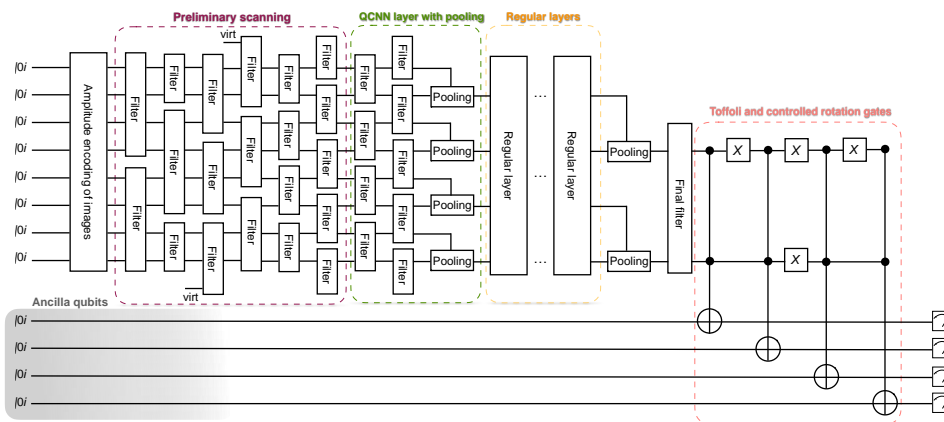


Рис. 1. Общая схема предлагаемой структуры квантовой нейронной сети, состоящей из нескольких этапов: предварительное сканирование с использованием n -кубитных фильтров, объединение и регулярные слои.

В данной работе мы продемонстрировали квантовый мультиклассовый классификатор, основанный на архитектуре QCNN. Основными концептуальными улучшениями, которые мы реализовали, являются новая модель квантового персептрона и оптимизированная структура квантовой схемы. Мы показали использование предложенного подхода для 4-классовой классификации для случая четырех MNIST. Как мы представили, результаты, полученные с помощью QCNN, сравнимы с результатами CCNN для случая, если количество параметров сопоставимо. Более того, поскольку схема требует использования многокубитных вентилях, для реализации таких алгоритмов могут представлять интерес процессоры кубитов, в которых декомпозиция многокубитных вентилях может быть реализована более эффективно.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант №19-71-10092). А также данная работа была поддержана Дорожной картой по развитию квантовых вычислений в Российской Федерации.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Mottonen, J. J. Vartiainen, V. Bergholm, and M. M. Salomaa // *Quantum Information and Computation*. 2005. No 5. P. 467.

Расчет туннельного матричного элемента в координационном соединении терпиридина с двумя выделенными одноатомными зарядовыми центрами

С.А. Панкратов, А.А. Паршинцев, В.В. Шорохов

Центр квантовых технологий, Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова
shorokhov@physics.msu.ru

Одномерные и двумерные упорядоченные металлоорганические молекулярные каркасы, содержащие одиночные атомы металлов, которые обладают свойствами выделенных зарядовых центров, могут быть использованы для построения высокотемпературных резервуарных одноэлектронных сетей [1-3], которые, в свою очередь, открывают большие возможности: для создания сенсоров локальных химических событий нанометрового разрешения и чувствительности долей электрона; элементов нейросетей нанометрового масштаба, а также универсальных перестраиваемых логических вентилях и универсальных перестраиваемых элементов аналогового компьютера. Используя координационные соединения переходных металлов с терпиридином можно создавать упорядоченные цепочки металлических одноатомных зарядовых центров и упорядоченные двумерные сетки таких зарядовых центров. Подбирая органические лиганды, соединяющие зарядовые центры при построении цепочек и сеток можно добиться возможности туннелирования электронов между соседними туннельными зарядовыми центрами с туннельной прозрачностью 0.0001 — 0.01, что позволяет рассматривать такие цепочки и сетки как готовые одноэлектронные устройства. Непосредственное изготовление резервуарной сети на таких молекулярных соединениях осуществляется путем их осаждения на систему планарных нанoeлектронов, размещенных на твердотельной подложки. Ввиду малого размера области локализации (~1 нм) электронов на одноатомных зарядовых центрах в таких цепочках и сетках они демонстрируют устойчивую работу и проявляют ярко выраженные одноэлектронные свойства при комнатной температуре.

Для теоретического описания электронного транспорта в молекулярных одноэлектронных цепочках и двумерных сетках помимо параметризации электронного одночастичного энергетического спектра необходимо уметь вычислять величину туннельного матричного элемента, которая, в свою очередь, необходима для расчета темпов туннелирования между соседними зарядовыми центрами. В этой работе нами была выполнена оценка величины туннельного матричного элемента в координационном соединении терпиридина с двумя зарядовыми центрами на основе атомов меди. Оценка выполнена двумя способами. Первый способ заключался в оценке высоты и ширины эффективного туннельного барьера между соседними зарядовыми центрами на атомах меди. Второй способ заключается в непосредственном расчете Хартри-Фоко-подобного спектра такого молекулярного соединения и выявлении расщепления одночастичных электронных энергетических уровней, связанных с локализацией электронов на зарядовых центрах атомов меди.

Для расчета одночастичных энергетических спектров и спектров полной энергии использовался метод теории функционала плотности (DFT) и система квантово-химических расчетов NWChem [4].

По результатам оценки туннельного матричного элемента показано, что для выбранного молекулярного соединения зарядовых центров на атомах меди режим переноса электронов между соседними зарядовыми центрами одноэлектронный.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дагесян С.А. и др. // ВМУ. Серия 3. физика. астрономия. 2020. No 4. с. 36–40.
2. Bose S.K. et al. // Nature nanotechnology. 2015. 10, N 12. P. 1048.
3. Chen T. et al. // Nature. 2020 577(7790):P. 341-345.
4. Apra E. et al. // The Journal of Chemical Physics 152, 184102 (2020)

Флоке-спектр дираковского кристалла в поле импульсного излучения

Д.А. Силиванов¹, Е.И. Кухарь¹, С.В. Крючков^{1,2}

¹ Волгоградский государственный технический университет

² Волгоградский государственный социально-педагогический университет, Лаборатория физики
низкоразмерных систем

dmitrijsilivanov47@gmail.com

Современные технологии позволяют получать низкоразмерные структуры различного типа, в том числе 2D-кристаллы моноатомной толщины [1,2]. Открытие так называемых дираковских и вейлевских кристаллов имеет не только практическое [3,4], но и фундаментальное значение. Хорошо известно, что свободный графен характеризуется линейной зависимостью между энергией и импульсом электрона, т.е. коническим типом закона дисперсии. В то время как графену на подложке может соответствовать гиперболический тип закона дисперсии. Таким образом, налицо математическое сходство электронных состояний в физике низкоразмерных систем и релятивистской квантовой физике. Последнее дает возможность использовать современные наноматериалы в качестве платформы для моделирования и проверки некоторых эффектов квантовой электродинамики [5]. Таким образом, изучение нелинейных оптических и электрических свойств дираковских и вейлевских кристаллов представляет интерес для области физики, развивающейся на стыке физики твердого тела и физики высоких энергий.

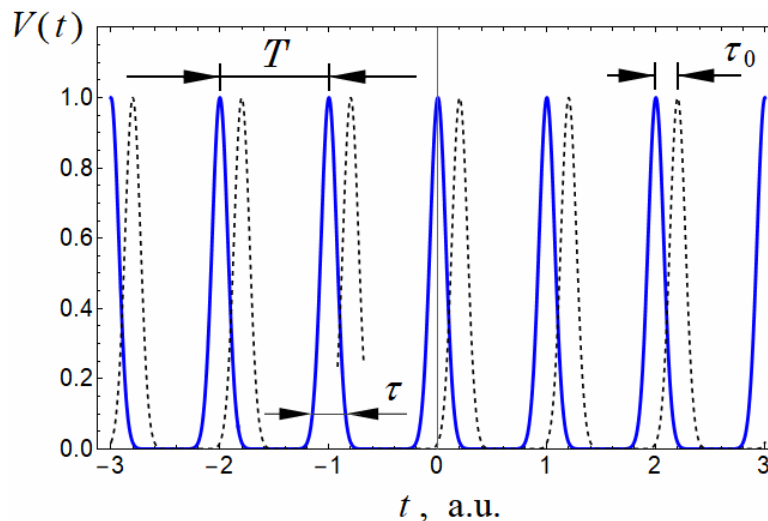


Рис. 1. Профиль импульсных сигналов

Уникальность указанных выше материалов объясняется наличием в квантовом уравнении для электронных состояний слагаемых, связывающих импульс носителя заряда с его псевдоспиновой степенью свободы. Например, для электрона в свободном графене вблизи дираковской точки зоны Бриллюэна можно записать

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = v_F \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \psi, \quad (1)$$

где ψ – спинор, две компоненты которого отвечают состояниям электрона из двух различных подрешеток кристалла, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – матрицы Паули, v_F – скорость Ферми. Следствием проявления такой связи являются топологические фазовые переходы и переходы типа “полуметалл – изолятор” [6,7], благодаря которым

реализуются так называемые Флоке-топологические изоляторы [8]. В отсутствие электромагнитного (ЭМ) излучения графен обладает полуметаллическим типом проводимости. Однако если последний поместить в высокочастотное (ВЧ) поле ЭМ волны, то при определенных условиях возможен переход к состоянию зонного диэлектрика. Здесь стоит отметить, что задача о взаимодействии кристалла с ВЧ излучением является нестационарной. Существуют определенные методы [6], позволяющие свести такую задачу к задаче на собственные значения некоторого «эффективного» гамильтониана. В этом случае говорят о Флоке-спектре системы. Таким образом, указанное выше диэлектрическое состояние носит характер динамически наведенного (усредненного по времени) состояния.

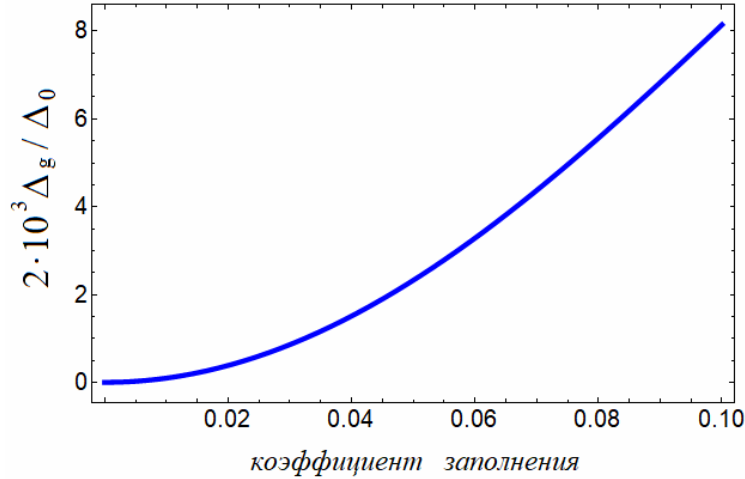


Рис. 2. Зависимость квазиэнергетической щели от коэффициента заполнения

На данный момент исследования взаимодействия дираковских материалов с ВЧ полем касаются в основном непрерывного режима ЭМ излучения. Ниже излагаются результаты исследования Флоке-спектра дираковского кристалла, помещенного в поле импульсного излучения. Считаем, что 2D кристалл, связанный с плоскостью xy , облучается двумя ЭМ волнами, распространяющимися вдоль оси Oz и поляризованными во взаимно перпендикулярных направлениях. Каждая из волн представляет собой последовательность импульсов гауссовского профиля. Причем эти последовательности сдвинуты по отношению друг к другу на время τ_0 . Длительность каждого импульса равна τ , а время между соседними импульсами составляет T (рис. 1). Согласно сказанному, напряженность электрического поля в плоскости xy равна

$$\vec{E}(t) = E_0 \cdot \{ V(t + \tau_0), V(t) \}, \quad (2)$$

где E_0 – амплитуда поля,

$$V(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F\left(\frac{t-nT}{\tau}\right), \quad F(\xi) = e^{-\xi^2}. \quad (3)$$

Отношение τ/T будем называть коэффициентом заполнения, полагая $\tau \ll T$. Флоке-спектр $\tilde{\epsilon}(\vec{p})$ ищется путем усреднения уравнения

$$\left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + v_F \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \cdot \vec{\sigma} \right] u = \tilde{\epsilon} u \quad (4)$$

по периоду сигналов. Здесь $\vec{A}(t)$ – векторный потенциал ЭМ поля волны в плоскости $xу$, вычисляемый согласно формуле $\vec{E} = -\partial\vec{A}/c\partial t$. Согласно стандартной схеме усреднения спинор $u(t)$ представляется в виде постоянной и ВЧ частей: $u(t) = u_0 + u_1(t)$, $u_0 = \text{const}$, $\langle u_1 \rangle = 0$, причем $|u_1| \ll |u_0|$. Последнее неравенство выполнено, если

$$\Omega \gg \frac{v_F e E_0}{\hbar \Omega}, \quad (5)$$

где обозначено $\Omega = 2\pi/T$. В результате Флоке-спектр имеет вид

$$\tilde{\epsilon}(\vec{p}) = \pm \sqrt{v_F^2 p^2 + \Delta_g^2}. \quad (6)$$

Здесь $2\Delta_g$ – энергетическая щель, динамически наведенная ВЧ излучением, равная

$$2\Delta_g = \frac{\Delta_0 \tau^2}{T^2} \left| \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin k \varphi_0}{k^3} e^{-\frac{2\pi^2 k^2 \tau^2}{T^2}} \right|, \quad (7)$$

$\varphi_0 = \Omega \tau_0$, $\Delta_0 = 8\pi v_F^2 e^2 E_0^2 / \hbar \Omega^3$. Таким образом, в случае малых амплитуд поля (5) квазиэнергетическая щель пропорциональна квадрату амплитуды, так же как и в случае эллиптически поляризованного гармонического сигнала [9].

Из формулы (7) также следует, что величина Δ_g определяется временным сдвигом импульсов τ_0 . Например, если $\tau_0 = 0$, то щель не наводится. При фиксированной амплитуде щель максимальна, если $4\tau_0 = kT$ (k – целое число). Если $4\tau_0 = T$, то вместо (6) имеем

$$2\Delta_g = \frac{\Delta_0 \tau^2}{T^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)^3} e^{-\frac{2\pi^2 (2k+1)^2 \tau^2}{T^2}}. \quad (8)$$

График зависимости квазиэнергетической щели от коэффициента заполнения, построенный по формуле (8), показан на рис. 2. Из графика видно, что в рамках условия $\tau \ll T$ квазиэнергетическая щель увеличивается с ростом коэффициента заполнения.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Khandelwal et al. // Mater. Sci. Eng. B. 2017. V. 221. P. 17.
2. L. Zhang et al. // Mater. Today. 2021. V. 50. P. 442.
3. J. Prasongkit et al. // Appl. Surf. Sci. 2019. V. 497. P. 143660.
4. B. Datta et al. // Appl. Phys. Lett. 2021. V. 119. P. 133501.
5. Н.Е. Фирсова, С.А. Ктиоров. // ФТТ. 2021. Т. 63. В. 2. С. 277.
6. M. Ezawa. // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 109. P. 055502.
7. P. Delplace, A. Gomez-Leon, G. Platero. // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 245422.
8. Y.H. Wang et. al. // Science. 2013. V. 342. P. 453.
9. O.V. Kibis. // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 165433.

Особенности формирования квантового фантомного изображения с учетом эффектов самовоздействия, кросс-взаимодействия и волновой расстройки

А.В. Белинский*, Р. Сингх**

*Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, ГСП-1, Москва
Эл. почта: *belinsky@inbox.ru **ranjit.singh@mail.ru

Одним из источников генерации запутанных состояний является спонтанное параметрическое рассеяние (СПР) на основе нелинейной восприимчивости $\chi^{(2)}$ оптических кристаллов. В результате рождаются коррелированные фотоны, которые затем используются для решения задач квантовой информатики и/или формирования квантовых фантомных изображений. Обычно для формирования квантовых фантомных изображений используется СПР $\chi^{(2)}$ процесс [1].

Ограничения, связанные с выполнением условия фазового синхронизма при определенных углах взаимодействия световых пучков негативно влияют на эффективное рождение коррелированных фотонов в широкой угловой апертуре в случае кристалла с оптической нелинейностью $\chi^{(2)}$. Интерес к использованию встречного вырожденного по частоте процесса четырехфотонного смешения на основе нелинейности $\chi^{(3)}$ обусловлен безусловным выполнением волнового/фазового синхронизма в изотропных средах [2]. Нелинейные операторные уравнения, описывающие этот процесс, не удается решить аналитически, поэтому приходится прибегать к приближению заданного поля. В случае вырожденного по частоте встречного четырехфотонного смешения система нелинейных операторных уравнений линеаризуется, но аналитическое решение становится сингулярным при высокой эффективности взаимодействия [2]. Для ухода от сингулярности необходимо решать полную систему операторных уравнений, то есть, без использования приближения заданного поля.

Мы предлагаем еще одну возможность формирования квантовых фантомных изображений на основе коллинеарного попутного четырехволнового взаимодействия $\omega_3 + \omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ [3], включая самовоздействие, кросс-взаимодействие и волновую расстройку.

Рассмотрим плоские монохроматические моды с частотами ω_1 , ω_2 и ω_3 характеризующиеся операторами уничтожения (рождения) фотона $\hat{a}_1(\hat{a}_1^+)$, $\hat{a}_2(\hat{a}_2^+)$ и $\hat{a}_3(\hat{a}_3^+)$. Эти моды коллинеарно распространяются внутри нелинейного кристалла с кубической нелинейностью (см. Рис. 1). Операторы удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям: $[\hat{a}_j, \hat{a}_{j'}^+] = \delta_{j,j'}$ ($j = 1, 2, 3; j' = 1, 2, 3$). Система операторных уравнений в случае, когда одновременно происходят 3 процесса: параметрический процесс, самовоздействие и кросс-взаимодействие, имеет следующий вид:

$$\frac{d\hat{a}_1}{dz} = -i\gamma_1 \xi_3^2 \hat{a}_2^+ \exp(-i\Delta kz) - i\gamma_2 \hat{E} \hat{a}_1, \quad (1)$$

$$\frac{d\hat{a}_2}{dz} = -i\gamma_1 \xi_3^2 \hat{a}_1^+ \exp(-i\Delta kz) - i\gamma_2 \hat{E} \hat{a}_2, \quad (2)$$

где ξ_3 - постоянная амплитуда неистощимой накачки моды \hat{a}_3 ; $\Delta k = 2k_{3z} - k_{1z} - k_{2z}$ - волновая расстройка; $\hat{E} = \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 + \hat{a}_3^+ \hat{a}_3$ - полная энергия рассматриваемого коллинеарного процесса четырехволнового смешения, которая не меняется от длины взаимодействия, т.е. является инвариантом; $\gamma_{1,2}$ - коэффициенты параметрического процесса, самовоздействия и кросс-взаимодействия.

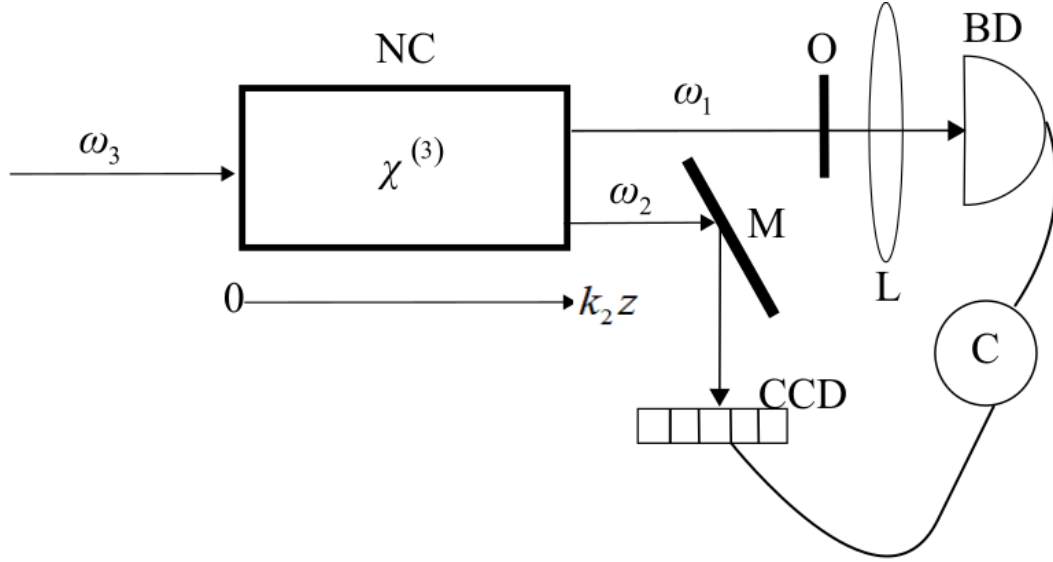


Рис.1. Схема формирования квантовых фантомных изображений: NC — нелинейный кристалл; ω_3 - накачка; ω_1 и ω_2 - моды запутанных пар фотонов; O - прозрачный объект; M - зеркало; BD - интегрирующий детектор в объектном канале; L - оптический объектив; CCD - матрица фотодетекторов в восстанавливающем канале; C — коррелятор интенсивностей (схема совпадений).

Для решения системы операторных уравнений (1,2) можно сделать замену переменных $\hat{a}_1 = \hat{A}_1 \exp(-i \Delta k z / 2)$, $\hat{a}_2 = \hat{A}_2 \exp(-i \Delta k z / 2)$, тогда система (1,2) преобразуется к виду:

$$\frac{d\hat{A}_1}{d\zeta} = -i\gamma\xi_3^2 \hat{A}_2^+ - i\left(E - \frac{\Delta k}{2\gamma_2}\right) \hat{A}_1, \quad (3)$$

$$\frac{d\hat{A}_2}{d\zeta} = -i\gamma\xi_3^2 \hat{A}_1^+ - i\left(E - \frac{\Delta k}{2\gamma_2}\right) \hat{A}_2, \quad (4)$$

где $\gamma = \gamma_1 / \gamma_2$; $\zeta = \gamma_2 z$ - приведенная длина взаимодействия. Линейные операторные уравнения (3,4) решаются аналитически, например, с помощью преобразования Лапласа. Правильность решения можно проверить контролем коммутационных соотношений $[\hat{A}_j, \hat{A}_{j'}^+] = \delta_{j,j'}$ ($j=1,2; j'=1,2$).

Корреляционная функция между модами a_1 и a_2 имеет следующий вид:

$$g^{(2)}(\zeta) = \frac{\langle a_1^+ a_1 a_2^+ a_2 \rangle}{\langle a_1^+ a_1 \rangle \langle a_2^+ a_2 \rangle} = 2 + \left(1 - \frac{\tilde{E}^2}{|\xi_3|^4 \gamma^2}\right) \text{csch}^2 \left[\left(|A_3|^4 \gamma^2 - \tilde{E}^2 \right) \zeta \right], \quad (5)$$

где $\tilde{E} = E - \Delta k / 2\gamma_2$. Среднее значение $g^{(2)}$ вычислялось в случае, когда моды \hat{a}_1 и \hat{a}_2 находились в исходном вакуумном состоянии при разных значениях $\Delta k = \{0, 0.1, 0.3\}$

(см. Рис.2). Поведение кривых корреляции слабо зависит от волновой расстройки, т.е. кривые практически совпадают.

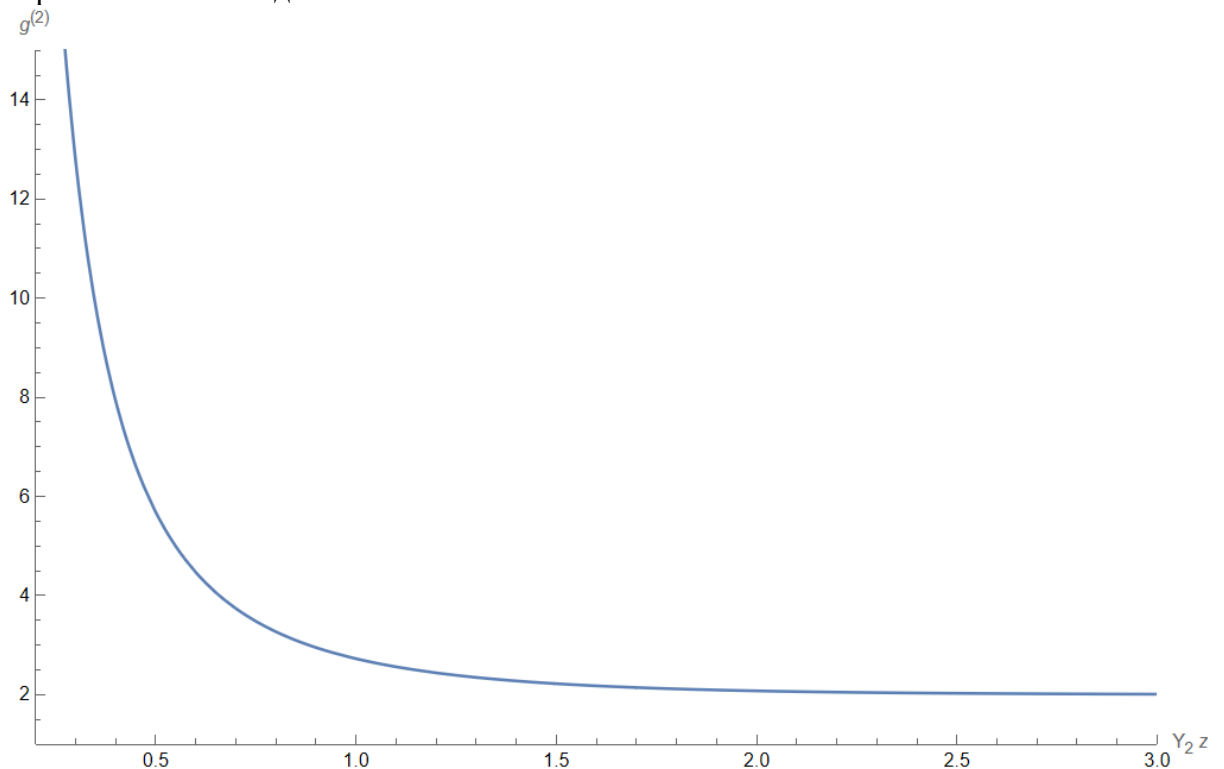


Рис.2. Коэффициент корреляции между модами \hat{a}_1 и \hat{a}_2 , когда они находятся в вакуумном состоянии, и накачка \hat{a}_3 неистошима при $\Delta k = 0.1$.

При $g^{(2)} > 1$ парных коррелированных фотонов больше, чем одиночных в каждой моде. Таким образом, предложенная схема может стать хорошим кандидатом генерации запутанных/коррелированных фотонов. Интересно, что среднее значение коэффициента корреляции не имеет сингулярности, как в случае встречного четырехфотонного смешения в приближении заданной накачки и слабо зависит от волновой расстройки.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.И. Колобов, А.С. Чиркин (ред.), Квантовое изображение, Физматлит, М., 2009.
2. А.В. Белинский, Р. Сингх. Встречное четырехфотонное смешение в формировании фантомных изображений. Журнал экспериментальной и теоретической физики, том 159, № 2, с. 258-261 (2021).
3. Chi, Y., Huang, J., Zhang, Z. et al. A programmable qudit-based quantum processor. Nat Commun. 13, 1166 (2022). <https://doi.org/10.1038/s41467-022-28767-x>.

Towards quantum control for many-body quantum systems

A.K. Fedorov

Russian Quantum Center, 100 Novaya St., Skolkovo, Moscow 143025, Russia

Corresponding author: *akf@rqc.ru*

A precise understanding of the influence of an environment on quantum dynamics, which is at the heart of the theory of open quantum systems, is crucial for further progress in the development of controllable large-scale quantum systems. However, existing approaches to account for complex system environment interaction in the presence of memory effects are either based on heuristic and oversimplified principles or give rise to computational difficulties. In practice, one can take advantage of available experimental data and replace the first-principles simulation with a data-driven analysis that is often much simpler. Inspired by recent advances in data analysis and machine learning, we suggest a data-driven approach to the analysis of the non-Markovian dynamics of open quantum systems. Our method allows capturing the most important properties of open quantum systems, such as the effective dimension of the environment, eigenfrequencies of the joint system-environment quantum dynamics, as well as reconstructing the minimal Markovian embedding, predicting dynamics, and denoising of measured quantum trajectories. We demonstrate the performance of the suggested approach on various models of open quantum systems, including a qubit coupled with a finite environment, a spin-boson model, and the damped Jaynes-Cummings model.

The development of the data processing scheme, analysis of the spin-boson model, and analysis of the damped Jaynes-Cummings model are supported by the Russian Science Foundation (19-71-10092) and by the Leading Research Center on Quantum Computing (Agreement no. 014/20; analysis of non-Markovian processes for NISQ devices). The analysis of the finite-environment-induced non-Markovian quantum dynamics is supported by the Foundation for the Advancement of Theoretical Physics and Mathematics "BASIS" for support under Project No. 19-1-2-66-1. The authors thank A. Ryzhov and G. Semin for fruitful discussions.

References

- [1] I.A. Luchnikov, E.O. Kiktenko, M.A. Gavreev, H. Ouerdane, S.N. Filippov, and A.K. Fedorov. "Probing non-Markovian quantum dynamics with data-driven analysis: Beyond "black-box" machine learning models". arXiv:2103.14490.

Моделирование и интерпретация широкополосных диэлектрических спектров жидкой воды

С.В. Чучупал, А.А. Волков

Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук
MirrorMan@yandex.ru

Молекулярная структура жидкой воды до сих пор остаётся загадкой [1]. Считается, что вода представляет собой набор неделимых газовых молекул H_2O , скреплённых сеткой водородных связей, и что всё богатство её свойств определяется динамикой этих связей — их непрекращающимися разрывами и восстановлениями. Проблема в том [2], что хаотическая динамика не вяжется с предельно простой колоколообразной формой электродинамического отклика $\epsilon''(\nu)$, известной под названием дебаевской релаксации — Рис. 1.

В настоящей работе для прояснения вопроса мы анализируем диэлектрические спектры жидкой воды в расширенном окне наблюдения на языке динамической проводимости $\sigma'(\nu) = 2\pi\nu\epsilon_0\epsilon''(\nu)$ — Рис. 2. При таком подходе привычный для жидкой воды спектральный колокол $\epsilon''(\nu)$ предстаёт в форме ступеньки $\sigma'(\nu)$, характерной для электродинамики электролитов — сред, наполненных ионами и связанных с ними эффектами экранирования.

По аналогии с электролитами из ступенчатого спектра проводимости на Рис. 2 мы выводим закономерности формирования молекулярной структуры жидкой воды, которые оказываются радикально отличными от принятых. Традиционная и предлагаемая структуры жидкой воды сравниваются на Рис. 3. Вода в новом представлении есть плотный газ короткоживущих экранированных заряженных частиц, существующих в виде матрёшкообразно встроенных молекулярных роев. Ступени спектров $\sigma'(\nu)$ жидкой воды объясняются деформационной поляризацией роев и их миграционной диффузией.

В рамках нового подхода присущие воде свойства, такие как релаксация Дебая, высокая статическая диэлектрическая проницаемость, проводимость на постоянном токе, высокая подвижность протонов и водородный индекс pH впервые получают последовательное обоснование.

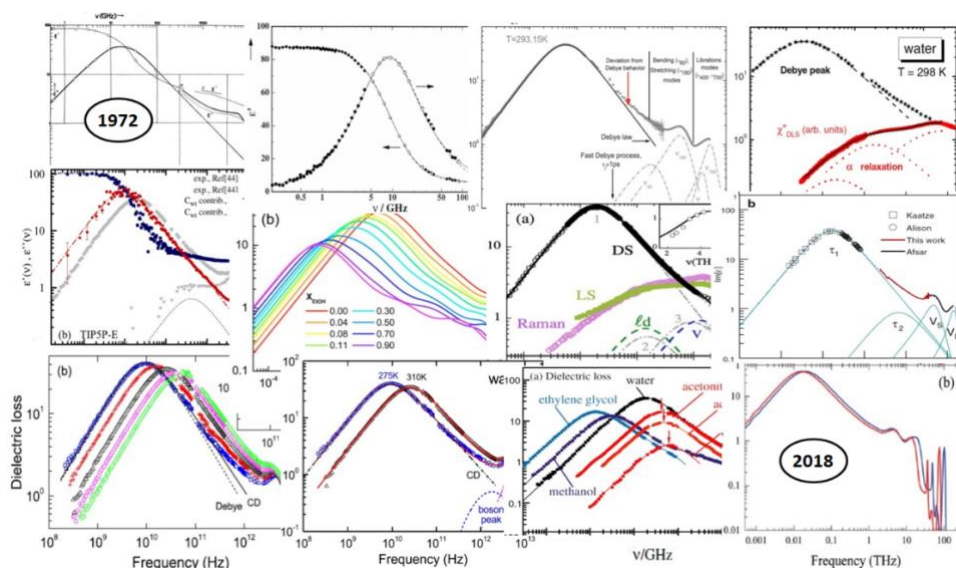


Рис.1. Дебаевская релаксация в спектрах поглощения жидкой воды. Коллаж из данных, собранных примерно за 50 лет спектральных исследований (ссылки в статьях [2], [3]). Спектральные «колоколы» стартуют одинаково из области частот в районе $\sim 10^8$ Гц.

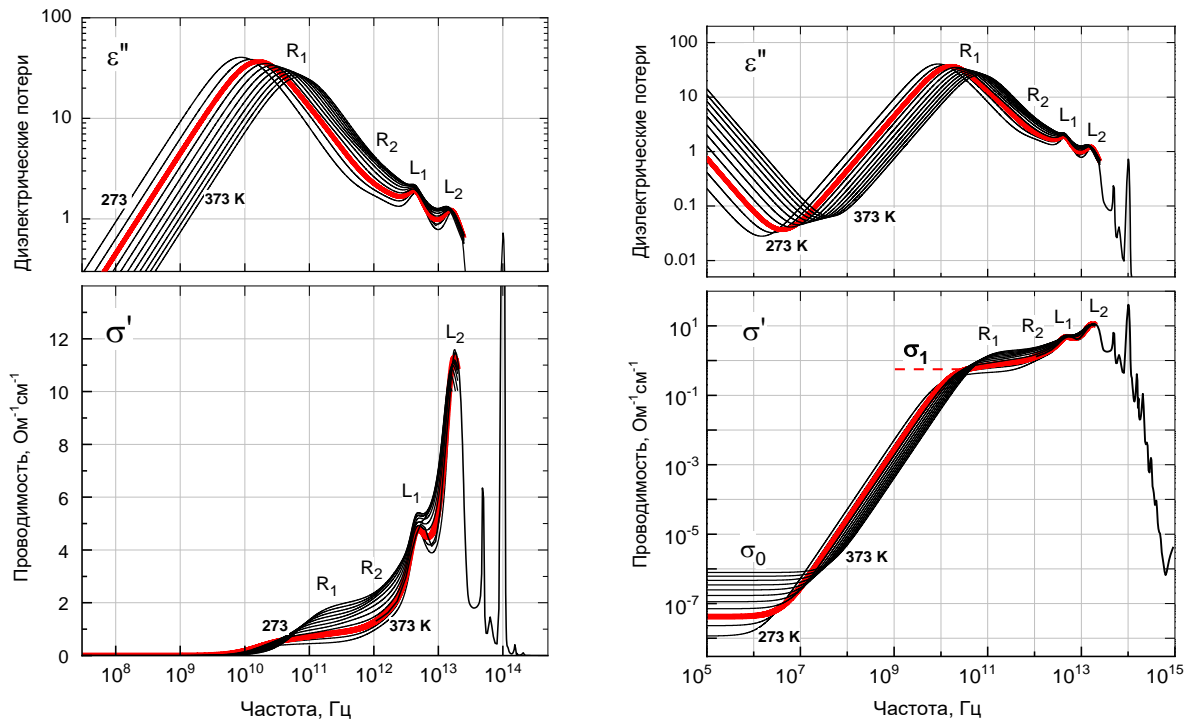


Рис.2. Спектры поглощения жидкой воды в расширенном окне наблюдения в ϵ'' - и σ' -представлениях. На частотах ниже $\sim 10^8$ Гц к дебаевскому «колоколу» $\epsilon''(\nu)$ подключена полка проводимости «на постоянном токе» σ_0 (т.н. dc-проводимость).

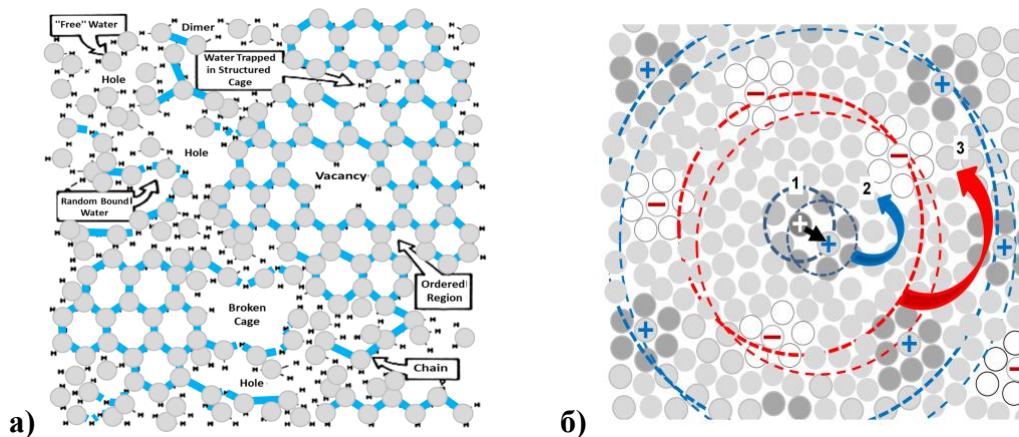


Рис.3. Две модели структуры жидкой воды:

- Принятая модель — тетрагонально упорядоченная сетка водородных связей [4]. Свойства среды определяются хаотической динамикой «дефектов» — случайных отклонений структуры от тетрагональности.
- Предлагаемая модель — ион-молекулярная газовая смесь. Свойства среды определяются биполярной диффузией зарядов — системным «хороводом» протонов и протонных дырок. Динамика перемещения заряда: 1 — столкновительный межкислородный перескок протона, 2 — релаксационное подтягивание за протоном гидратной оболочки, 3 — релаксационное подтягивание за протоном и гидратной клеткой ионного облака.

ЛИТЕРАТУРА

- L.G.M. Pettersson, R.H. Henchman, A. Nilsson // Chem. Rev. 2016. V. 116. No. 13. P. 7459.
- D.C. Elton // Phys. Chem. Chem. Phys. 2017. V. 19. N. 28. P. 18739.
- I. Popov et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2016. V. 18. N. 20. P. 13941.
- J.C. Del Valle et al. // Ferroelectrics. 2014. V. 466. N. 1. P. 166.