# *Юрий Ожигов*<sup>1 2</sup>,*Ю Цзянчуань*<sup>3</sup>

# ОПИСАНИЕ НЕМАРКОВСКОЙ ДИНАМИКИ ATOMOВ ЧЕРЕЗ ЧИСТОЕ СОСТОЯНИЕ\*

### Введение

Задача построения компьютерного симулятора химии до сих пор не решена. Она представляет настоящий вызов вычислительной математике из-за экспоненциально растущей сложности вычислений. Ее отличие от называемой молекулярной ключевой так динамики электромагнитного поля, резко усложняющего картину реакции. специальные объекты, рассматриваются литературе численного анализа - поляритоны, представляющие собой запутанные состояния молекулярных структур и электромагнитного поля (см., например, [1]). Это представление позволяет эффективно исследовать в рамках конечномерной модели Джейнса-Каммингса довольно тонкие эффекты типа вращения поляритонов, фотонную блокаду и роль объемлющей оптической полости (см. [2], а также [3]).

Направление нашей работы большей мере связано коллективными эффектами и сложными химическими сценариями, чем с детальным исследованием тонкой микроскопики, как в цитированных квантовой статьях. Многоатомные системы точки зрения [4],рассматривались, например, В рамках модели Хольстейна-Тависа-Каммингса НТС (см. [5], [6], [7]).

Нашей целью является исследование еще более сложных сценариев, чем чисто химические; скорее относящиеся к биологии. Поэтому нам необходимо еще более упростить нашу модель по сравнению с НТС. В данной работе мы рассматриваем абстрактные атомы, называя их искусственными в знак того, что в них сохранены только основные атрибуты реальных атомов - электроны, отвечающие за ковалентные

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова, Факультет вычислительной математики и кибернетики,

 $<sup>^2</sup>$  Физико-технологический институт РАН имени К.А.Валиева, e-mail: ozhigov@cs.msu.ru.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова, Факультет вычислительной математики и кибернетики, e-mail: youjiangchuan2021@gmail.com.

связи и динамика ядер в пределах целочисленной пространственной решетки, и молекулярные структуры, составленные из них. Рассмотрение больших ансамблей таких атомов и поля (искусственных поляритонов) требует очень экономного расходования вычислительных ресурсов, и соответствующих математических подходов.

Первый прием, о котором пойдет речь, носит общий характер и связан со стандартным описанием декогерентности в виде квантового основного уравнения.

$$i\hbar\dot{\rho} = [H,\rho] + i\mathcal{L}(\rho), \quad \mathcal{L}(\rho) = \sum_{i=1}^{N-1} \gamma_i (A_i \rho A_i^+ - \frac{1}{2} \{A_i^+ A_i \rho, \rho A^+ A\}),$$
 (1)

на матрицу плотности  $\rho(t)$  рассматриваемой системы. Здесь нарушение когерентности представляется в виде влияния окружения, и это влияние входит в него в виде факторов декогерентности  $A_i$ , образующих ортонормированный базис пространства операторов Лиувилля, причем их конкретный вид которых никак не зависит от гамильтониана H ([8]).

# Эволюция вектора состояния вместо квантового основного уравнения

Уравнение (1) великолепно работает для простых процессов, которые можно приближенно считать марковскими, но для химических взаимодействий, в особенности для сложных динамических сценариев, оно совершенно не подходит. Первая причина состоит в большой затратности любого метода решения уравнения (1): для получения вероятностного распределения нам нужно оперировать с квадратичным по величине массивом. Вторая причина состоит в том, что представление состояния виде матрицы плотности предполагает разделение вероятности на классическую и квантовую, что привносит искусственный беспорядок в описание системы. Но еще важнее третья причина - не соблюдение соотношения неопределенностей "время - энергия".

Поясним последний аргумент на простом примере, когда все факторы декогерентности  $A_i$  сводятся только к утечке фотонов из полости:  $A_i = a$ . Возьмем два момента времени  $t_1$  и  $t_2 > t_1$  и предположим, что фотон вылетел из полости в момент  $t_1$ . Получившая часть состояния декогерентности становится объектом интерференционное взаимодейтвие с оставшейся частью состояния. Так что если фотон также вылетел из полости в момент  $t_2$ , получившееся состояние никак не будет интерферировать с результатом вылета фотона в момент  $t_1$ , хотя в обоих случаях энергия результирующих состояний будет одинакова. Однако, если речь идет о единичных фотонах, как в рассматриваемых нами моделях, соотношение неопределенностей  $\delta t \cdot \delta E$ означает, что мы должны допустить такую интерференцию, ибо частота фотона в конечномерных моделях КЭД фиксирована, и дисперия времени вылета его из полости велика. Результаты событий: вылет фотона в момент  $t_1$  и в момент  $t_2$  могут интерферировать и мы должны учесть такую возможность.

Поэтому для химических взаимодействий вместо уравнения (1) целесообразно использовать эволюцию вектора состояния, что показано ниже.

# Итерационный алгоритм для фотонной машинерии

Под фотонной машинерией мы понимаем процесс, связанный с обменом фотонами между различными атомами в ансамбле, распределенном в пространстве. Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда не дает полного описания такого процесса, так как в этой модели траектории фотонов четко фиксированы системой волноводов между оптическими полостями; между тем в свободном пространстве такой фиксации нет.

Итак, мы рассматриваем случай, когда единственным фактором декогерентности является утечка фотона из полости: A=a.

Введем в базисное состояние один новый регистр - число m вылетевших из полости фотонов. Таким образом, базисное состояние будет иметь вид

$$|n,m,atoms\rangle,$$
 (2)

где n - число фотонов, находящихся вблизи атомной системы (внутри условной полости), способных взаимодействовать с рассматриваемыми атомами, m - число удаленных фотонов, которые не могут взаимодействовать с системой атомов, а последний регистр - состояния всех атомов в системе. Рассмотрим сначала простейший случай двухатомной системы, полная энергия которой ограничена числом  $\hbar \omega$ , так что базисное состояние будет иметь вид  $|n,m,at_1,at_2\rangle$ , где  $n+m+at_1+at_2=1$ .

Гамильтониан такой системы "атомы + фотоны" будет иметь следующий вид

$$H = \hbar \omega (a^+ a + a_{out}^+ a_{out} + \bar{\sigma}^+ \cdot \bar{\sigma}) + g(a\bar{\sigma}^+ + a^+ \bar{\sigma}), \ \bar{\sigma} = \sigma_1 + \sigma_2,$$
 (3)

где  $a^{(+)}$  - операторы поля внутри полости,  $a_{out}^{(+)}$  - операторы поля вне полости,  $\sigma$  - операторы атомной релаксации (возбуждения), · обозначает скалярное произведение. Поле, таким образом, фактически разделяется на 2 компоненты - ближнюю и дальнюю, так что с атомным ансамблем взаимодействует только первая, но энергия второй, тем не менее, входит в гамильтониан.

Теперь шаг итерационного процесса, определяющего эволюцию во времени нашей системы, будет состоять из двух действий, примененных к состоянию  $|\Psi(t)\rangle$ , первое из которых состоит в применении оператора унитарной эволюции, а второе выражает процесс "взаимодействия с окружением". Эти действия имеют такой вид.

## 1. Пусть

$$|\tilde{\Psi}(t+dt)\rangle = (1 - \frac{i}{\hbar}H \ dt)|\Psi(t)\rangle = |0,0,\Phi_{00}\rangle + |0,1,\Phi_{01}\rangle + |1,0,\Phi_{10}\rangle, \quad (4)$$

где  $|\Phi\rangle$  обозначают различные атомные состояния. В нашем случае полной энергии  $\hbar\omega$  мы имеем:  $|\Phi_{00}\rangle=\lambda_{01}|01\rangle+\lambda_{10}|10\rangle,\ |\Phi_{01}\rangle=\mu_{01}|00\rangle,\ |\Phi_{01}\rangle=v_{01}|00\rangle$ , где  $\lambda,\mu$  и  $\nu$  - комплексные числа.

#### 2. Положим

$$|\Psi(t+dt)\rangle = |0,0,\Phi_{00}\rangle + \alpha|0,1,\Phi_{01}+\Phi_{10}\rangle, \ \alpha = \frac{\sqrt{\|\Phi_{01}\|^2 + \|\Phi_{10}\|^2}}{\|\Phi_{01}+\Phi_{10}\|}.$$
 (5)

Поскольку все три слагаемых в разложении  $|\tilde{\Psi}(t+dt)\rangle$  из пункта 1 являются ортогональными, выбор  $\alpha$  в пункте 2 обеспечивает сохранение единичной нормы вектора  $|\Psi(t)\rangle$  во все моменты времени. Пара состояний:  $|1,0,...\rangle$  и  $|0,1,...\rangle$  в  $|\tilde{\Psi}(t+dt)\rangle$  и  $|\Psi(t+dt)\rangle$  соответственно можно назвать донором и акцептором в шаге эволюции состояния, так как амплитуда первого суммируется с амплитудой второго. Причем если норма донора имеет порядок dt, то амплитуда акцептора растет, так что знаменатель в (5) не равен нулю.

Данный итерационный процесс естественно обобщается на случай наличия притока фотонов и на случай произвольной полной энергии системы, а также и на случай многоуровневых атомов, причем для ансамблей, состоящих из атомов разных типов спектра.

Пусть у нас имеется n атомов  $at_1, at_2, ..., at_n$  так что у каждого  $at_i$  есть некий граф спектральных переходов  $G_i$ . Пусть также  $b_1, b_2, ..., b_k$  - всевозможные фотонные моды, соответствующие всем переходам графов  $G_i$ , i = 1, 2, ..., n. Тогда базисное состояние поля будет иметь вид

$$|n_1, n_2, ..., n_k; m_1, m_2, ..., m_k\rangle,$$
 (6)

где  $n_j, m_j$  - числа фотонов моды  $b_j$ , которые находятся вблизи рассматриваемой локации и вдали от нее соответственно. Мы наложим на эти состояния условие  $n_i + m_j = const_j$  для каждого j = 1, 2, ..., k. Пару состояний  $|ph_{don}\rangle$ ,  $|ph_{ac}\rangle$  вида (6) мы назовем донорно-акцепторной, если одно из этих состояний получается из другого под действием оператора  $A = a_{j_1}a_{j_2}^+$ , где  $j_1, j_2 \in \{1, 2, ..., j\}$ , который мы назовем оператором данной пары.

Выберем для каждой донорно-акцепторной пары  $P=(|ph_{don}\rangle,\,|ph_{ac}\rangle)$  некоторую вероятность p(P).

Теперь итерационный процесс, описанный выше, будет изменен так. Пункт 1 останется как раньше, а пункт 2 преобразуется следующим образом. С вероятностью p=p(P) мы выберем из донорно-акцепторных пар некоторую пару P, и пусть оператор этой пары переводит  $|ph_{don}\rangle$  в  $|ph_{ac}\rangle$ . Представим результат пункта 1 в виде

$$|\tilde{\Psi}(t+dt)\rangle = \dots + |ph_{don}, \Phi_{don}\rangle + |ph_{ac}, \Phi_{ac}\rangle + \dots, \tag{7}$$

где полевая часть всех состояний, обозначенных многоточием, ортогональна полевой части обоих состояний из P. Тогда мы положим

$$|\Psi(t+dt)\rangle = ... + \alpha |ph_{ac}, \Phi_{ac} + \Phi_{don}\rangle + ...,$$
 (8)

где

$$\alpha = \frac{\sqrt{\|\boldsymbol{\Phi}_{\textit{don}}\|^2 + \|\boldsymbol{\Phi}_{\textit{ac}}\|^2}}{\|\boldsymbol{\Phi}_{\textit{don}} + \boldsymbol{\Phi}_{\textit{ac}}\|}.$$

Заметим, что числа запонения фотонов будут, как правило, только из множества  $\{0,1\}$ , так как приближение первого порядка унитарной эволюции из пункта 1 не может дать более одного "внутреннего" фотона. В то же время превращение "внешнего" фотона во "внутренний" должно происходить с малой вероятностью: в противном случае приток фотонов извне превзошел бы их отток, что означало бы неограниченный рост температуры окрестности атомной системы ([9]).

# Случай распределенной атомной системы

Приведенный алгоритм описывает эволюцию открытой квантовой системы, локализованной в пространстве; например, в некачественной оптической полости, или просто в малой области пустого пространства. Здесь мы разделяем фотоны на "внутренние" и "внешние", так что у нас есть возможность еще и вернуть обратно "внешние" фотоны, превратив их во "внутренние".

Данный алгоритм можно обобщить на случай нескольких локаций, когда вся система атомов будет разбита на группы  $At_1, At_2, ..., At_d$ , так что внутри одной группы атомы будут поглощать или испускать идентичные "внутренние" для этой группы фотоны, но для разных групп "внутренние" фотоны будут различными. В то же время, "внешние" фотоны будут для разных групп  $At_j$  идентичными. Это означает, что базисное состояние всей распределенной системы будет иметь вид

$$|\bar{n}_1,\bar{n}_2,...,\bar{n}_d,\bar{m};\bar{A}t\rangle$$
,

где  $\bar{n}_j=(n_1^j,n_2^j,...,n_k^j)$  - числа заполнения "внутренних" фотонов, соответствующие локации  $j,\ \bar{m}=(m_1,m_2,...,m_k)$  - числа заполнения "внешних" фотонов,  $\bar{A}t_i$  - атомная система в локации i.

Теперь эволюция всей распределенной системы может быть представлена через очевидную модификацию изложенного выше алгоритма. Пусть  $P_1, P_2, ..., P_d$  - вероятностные распределения на фотонных модах, соответствующие атомным группам  $At_1, At_2, ..., At_d$ , причем получаемые из единого вероятностного распределения  $\mathscr{P}$ . Тогда пункт 2 должен быть видоизменен следующим образом: его преобразование должно с вероятностным распределением  $P_j$  относиться к атомной локации j.

Физическое расстояние, равно как и оптические свойства среды между атомными локациями, должно сказываться в виде изменения

вероятностных распределений  $P_j$ . Таким образом, наш алгоритм будет применим к атомным системам, распределенным в пространстве.

Наша алгоритмическая схема хорошо приспособлена для распаралеливания на узлах вычислительной системы, которые могут сохранять общее запутанное состояние  $|\Psi(t)\rangle$ . В этом случае каждый узел сохраняет часть состояния, относящуюся к одной атомной локации  $At_j$ , а общая память хранит часть состояния, относящуюся к "внешним" фотонам:  $m_1, m_2, ..., m_k$ . Такая вычислительная система фактически имитирует реальный мир с тем лишь ограничением, что она создается вручную из наноструктур, способных сохранять запутанные состояния. Максимальная приближенность такой системы к реальномум прототипу делает квантовую модель очень ценной практически.

С другой стороны, работа с чистым состоянием вместо смешанного позволяет численно исследовать поведение реальной системы в данной модели на полностью классическом вычислителе.

## Эксперименты и оценка итерационных алгоритмов

Мы сравнивали наш алгоритм и итерационный метод Эйлера для расчета матрицы плотности в классической модели ТСН и модели ТСН, в которой атомы могут перемещаться между полостями. Критерий сравнения, используемый нами, состоит в выделении темной компоненты из атомного состояния  $|\Psi(0)\rangle$ , которая должна неизбежно возникнуть при утечке фотонов из полости.

Итерационный метод Эйлера([10]) для расчета матрицы плотности заключается в следующем.

1. Вычисляется унитарная динамика матрицы плотности:

$$\widetilde{\rho}(t+dt) = e^{-iHdt/\hbar} \rho(t) e^{iHdt/\hbar}.$$
(9)

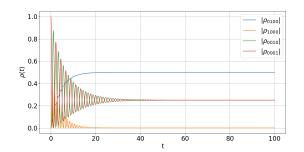
2. Вычисляется действие супероператора Линдблада  $\mathscr L$  на промежуточную матрицу плотности  $\rho(t+dt)$ :

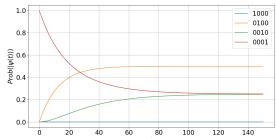
$$\rho(t+dt) = \widetilde{\rho}(t+dt) + \frac{1}{\hbar} \mathcal{L}(\widetilde{\rho}(t+dt))dt. \tag{10}$$

В ходе эксперимента мы использовали формулу

$$exp(X) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} X^k,$$

где  $X = -\frac{i}{\hbar}H \ dt$ , и уточняли ее до 4-го порядка, чтобы избежать возможных ошибок, вызванных формулой (4). Сначала мы экспериментировали с фотонной моделью, упомянутой в разделе 3, и получили следующие результаты.



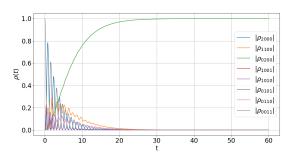


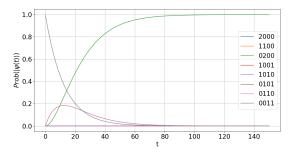
Вычисление с использованием матрицы плотности.  $\gamma = 0.5$ .

Вычисление с использованием векторов состояния

Рис. 1. Случай двух двухуровневых атомов в полости.  $dt=0,01,\hbar=1,g=2,\omega=1$  и начальное состояние  $|\Psi(0)\rangle=|00\rangle|01\rangle$ . Общее количество возможных состояний равно 4.

Очевидно, что мы получили тот же результат (выделение темного состояния  $|D\rangle = \frac{1}{2}|00\rangle \otimes (|01\rangle - |10\rangle)$ , используя расчет методом вектора состояния. Темными называются состояния атомных ансамблей, находясь в которых атомы не могут испустить свет, несмотря на ненулевую энергию возбуждений. Темнота - интерференционный эффект чисто квантовой природы, оказываюший существенное влияние взаимодействие света И вещества (см. [11]-[17]). Для модели Тависа-Каммингса размерность темного подпространства и явный вид темных состояний определены в работах ([18],[19]). Но кривая сходится медленнее, чем при использовании матрицы плотности. Кроме того, если удалить dt во второй итерации метода Эйлера(10) и положить  $\gamma = 1$ , то изображение будет согласоваться c изображением, полученным с помощью вектора состояния.





Вычисление с использованием матрицы плотности.  $\gamma = 0.5$ .

Вычисление с использованием векторов состояния

Рис. 2. Случай двух двухуровневых атомов в полости.  $dt=0,01,\hbar=1,g=2,\omega=1$  и начальное состояние  $|\Psi(0)\rangle=|00\rangle|11\rangle$ . Общее количество возможных состояний равно 8, темных состояний нет.

Затем мы увеличили максимальное число фотонов до двух:  $n + m + atom_1 + atom_2 = 2$ , чтобы убедиться, что наш алгоритм также хорошо работает и для мультифотоных систем.

Мы также рассматривали эксперимент, в котором атомы могут перемещаться в полости подобно фотонам ПОД ДВУМЯ количество атомов постоянно увеличивается. полостями, возможных состояний будет расти экспоненциально. количество Например, базовое состояние для двух атомов в двух связанных полостях имеет вид:

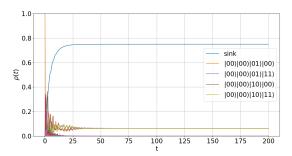
$$|\Psi\rangle = |n_1 n_2\rangle |m_1 m_2\rangle |atom_1, atom_2\rangle |position_1, position_2\rangle, n_1 + n_2 + m_1 + m_2 + atom_1 + atom_2 = 1.$$
 (11)

В общем случае к гамильтониану следует добавить слагаемое, соответствующее перемещениям атомов между полостями:

$$H_{tun} = \sum_{i,1 \le j < q \le k} r_{jq}^{i}(S(i)_{j}^{+}S(i)_{q} + S(i)_{q}^{+}S(i)_{j}), \tag{12}$$

где  $r^i_{jq}$  – неотрицательные интенсивности туннелирования атома i из полости j в полость q,  $S(i)^+_j$ ,  $S(i)_j$  – операторы рождения и уничтожения атома i в полости j:

$$S(i)_{j}^{+}S(i)_{q}:|positon_{i}=q\rangle\rightarrow|positon_{i}=j\rangle.$$
 (13)



Вычисление с использованием матрицы плотности.  $\gamma = 0.5$ .

Вычисление с использованием векторов состояния

Рис. 3. Случай двух двухуровневых атомов в двух полостях.  $dt=0.01, \hbar=1, g_1=g_2=g=2, \mu=0.8, r=0.4, \omega=1$  и начальное состояние  $|\Psi(0)\rangle=|00\rangle|00\rangle|01\rangle|00\rangle$  – в полости нет фотонов, а один из атомов возбужден. Общее количество возможных состояний равно 24.

В этой модели мы получали выделение темного состояния для атомов, допускающих пространственные движения (так называемые черные состояния):

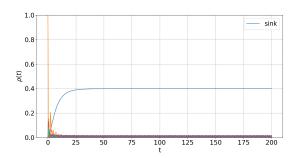
$$|Black\rangle = \frac{1}{4}|00\rangle|00\rangle (|01\rangle|00\rangle - |10\rangle|00\rangle + |01\rangle|11\rangle - |10\rangle|11\rangle). \tag{14}$$

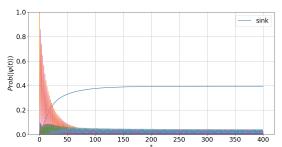
Наш алгоритм согласуется с результатами, рассчитанными с использованием матриц плотности. Для систем с более чем 1000

основных состояний мы не можем использовать матрицу плотности для вычисления результатов за конечное время. Но использование нашего алгоритма может помочь нам найти темные или черные состояния более высокой размерности.

В то же время, по мере увеличения числа атомов в системе, поиск состояний возможных И заполнение гамильтониана представляет собой трудность. Потому что поиск всех возможных состояний, в которые возможен переход из начального состояния требует модификации существующих поиска И использоволи структуру хеш-таблицы И словаря ДЛЯ генерации необходимых данных за короткое время.

Для 4 атомов мы получили следующий результат





Вычисление с использованием матрицы плотности.  $\gamma = 0.5$ .

Вычисление с использованием векторов состояния

Рис. 4. Четыре двухуровневых атомов в двух полостях.  $dt=0.01, \hbar=1, g_1=g_2=g=2, \mu=0.8, r=0.4, \omega=1$  и начальное состояние  $|\Psi(0)\rangle=|00\rangle|00\rangle|0011\rangle|0000\rangle$  – в полости нет фотонов, а два из атомов возбужден. Общее количество возможных состояний равно 512.

Для 6 атомов мы получили следующий результат

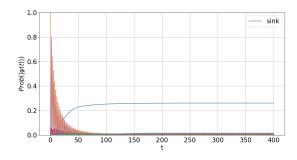


Рис. 5. Шесть двухуровневых атомов в двух полостях.  $dt=0.01, \hbar=1, g_1=g_2=g=2, \mu=0.8, r=0.4, \omega=1$  и начальное состояние  $|\Psi(0)\rangle=|00\rangle|00\rangle|000111\rangle|000000\rangle$  – в полости нет фотонов, а три из атомов возбужден. Общее количество возможных состояний равно 10240.

Во всех случаях наш алгоритм выделил темную компоненту начального состояния в точности так же, как и КОУ. Для сравнения сложности моделирования по нашему алгоритму и по КОУ мы получили следующую сравнительную таблицу

$\overline{N}$	Initial state	Dim	$MC_{\rho}$	time <sub>p</sub>	$MC_{v}$	time <sub>v</sub>
2	$ 01\rangle$	24	4.5 KB	<0.00001 s	192 B	<0.00001 s
4	$ 0011\rangle$	512	2 MB	0.1231 s	4 KB	0.00138 s
6	$ 000111\rangle$	10240	0.78 GB	900.508 s	80 KB	0.04007 s
8	$ 00001111\rangle$	196864	288.75 GB	_	1.5 MB	1.36459 s
10	$ 0000011111\rangle$	3684352	98.76 TB		28.11 MB	>10 s

Табл. 1. Таблица сравнения двух алгоритмов.

Здесь N – число атомов,  $Initial\ state$  – исходное состояние атома, где половина атомов возбуждена, Dim – количество возможных состояний,  $MC_{\rho}$  минимальная память, необходимая для использования матрицы плотности,  $MC_{v}$  – это память, необходимая для использования вычисления вектора состояния,  $time_{\rho}$  – это время, необходимое для однократной итерации с использованием матрицы плотности,  $time_{v}$  – это время, необходимое для однократной итерации с использованием вектора состояния. Гамильтониан хранится в виде разреженной матрицы, что меньше памяти, необходимой для использования плотной матрицы.

Временные результаты одной итерации в таблице 1 – всего 100 итераций в программе, а среднее значение взято из 5 экспериментов. В случае 10 атомов требуется около получаса, чтобы найти все возможные состояния и заполнить гамильтониан. Число возможных состояний достигло ошеломляющих 3 миллионов. В случае с 12 атомами, даже если для поиска использовали структуру хеш-таблицы и словаря, его трудно выполнить за разумное время.

Мы видим, что использовать матрицу плотности в случае 8 атомов невозможно. Но его все еще можно рассчитать с помощью вектора состояния. С помощью параллельных инструментов, таких как MPI, эффективность программы повысится, но для 10 атомов время расчета одной итерации превышает 10 секунд. В случае dt = 0.01 нам вообще нужно повторять тысячи, а то и десятки тысяч раз. Это уже неприемлемо для вычислений на одном компьютере.

Таким образом, предел метода эволюции матрицы плотности может быть увеличен с 4 атомов до 8-10 с использованием метода эволюции вектора состояния. В случае 12 атомов размерность может достигать десятков миллионов. Даже с помощью суперкомпьютера это невозможно сделать за разумное время. Это ограничение означает, что для более чем

10 атомов необходимо применять уже совершенно иные методы для работы уже с вектором чистого состояния.

#### Выводы

Мы построили эффективную замену квантового основного уравнения в виде схемы итерационного алгоритма, задающего изменение во времени вектора чистого состояния  $|\Psi(t)\rangle$ . Эта схема охватывает как случай КЭД в полостях, возможно, неидеальных, так и случай распределенной атомной системы в открытом пространстве.

У нашей алгоритмической схемы имеется два основных достоинства по сравнению с квантовым основным уравнением. Первое состоит в том, что данная схема полностью учитывает возможную память окружения в виде возврата вылетевшего фотона или обмена фотонами между разными локациями. Второе достоинство в том, что наша схема оперирует с чистым состоянием, а не с матрицей плотности, как КОУ. Для сложных систем, состоящих из сотен атомов, это преимущество очень важно, так как компьтерная память, необходимая для хранения матрицы, растет как квадрат длины вектора.

Предложенная схема хорошо приспособлена для распаралеливания и реализации на распределенных вычислительных системах. Наконец, она методологически более проста: вероятность здесь не делится на класическую и квантовую, как при работе с матрицами плотности. Данная алгоритмическая схема не столь универсальна, как КОУ, так как она применима только к случаю обмена фотонами или фононами с окружением, и не охватывает иные типы декогерентности, например, атомные операторы типа  $\sigma^+\sigma$ , встречающиеся в некоторых моделях релаксации. Однако фактор обмена бозонами с окружением - достаточно важен для сложных немарковских процессов с содержательным сценарием, и здесь наша схема имеет неплохую перспективу.

# Литература

- 1. Francesca Fassioli, Kyu Hyung Park, Sarah E. Bard, Gregory D. Scholes. Femtosecond Photophysics of Molecular Polaritons, J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 46, 11444, https://doi.org/10.48550/arXiv.2302.05670
- 2. Li-Bao Fan, Chuan-Cun Shu, Daoyi Dong, Jun He, Niels E. Henriksen, Franco Nori Quantum Coherent Control of a Single Molecular-Polariton Rotation, accepted by Physical Review Letters on 19 December, 2022, https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.11649
- 3. Eric W. Fischer, Janet Anders, Peter Saalfrank Cavity-Altered Thermal Isomerization Rates and Dynamical Resonant Localization in Vibro-Polaritonic Chemistry, J. Chem. Phys. 156, 154305 (2022), https://doi.org/10.48550/arXiv.2109.13574

- 4. *David Wellnitz, Guido Pupillo, Johannes Schachenmayer* Disorder enhanced vibrational entanglement and dynamics in polaritonic chemistry, Commun Phys 5, 120 (2022), https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.06053
- 5. F. Herrera and F. C. Spano Cavity-Controlled Chemistry in Molecular Ensembles, Phys. Rev. Lett. 116, 238301 (2016).
- 6. *J. A. Cwik, S. Reja, P. B. Littlewood, and J. Keeling* Polariton condensation with saturable molecules dressed by vibrational modes, EPL 105, 47009, (2014).
- 7. F. Herrera and F. C. Spano Theory of nanoscale organic cavities: The essential role of vibration-photon dressed states, ACS Photonics 5, 65 (2018).
- 8. *H. Breuer and F. Petruccione* The Theory of Open Quantum Systems, Oxford (2002).
- 9. Ozhigov Y.I., Kulagin A.V., Afanasiev V.Y., Keli Z., Vanshun L., Huihui M., Victorova N.B. About Chemical Modifications of Finite Dimensional QED Models, Nonlinear Phenomena in Complex Systems, vol. 24, N3, pp.230-241, doi:10.33581/1561-4085-2021-24-3-230-241.
- 10. *Yuri Ozhigov*. Quantum computer. 2020. (Rus). ISBN 9785317064037. https://doi.org/10.29003/m1377.978-5-317-06403-7
- 11. Andre A., Duan L.M., Lukin M.D. Coherent atom interactions mediated by dark-state polaritons, Phys Rev Lett. 2002 Jun 17;88(24):243602.
- 12. J. Hansom, C. Schulte, C. Le Gall, C.Matthiesen, E. Clarke, M.Hugues, J. M. Taylor., M.Atatüre Environment-assisted quantum control of a solid-state spin via coherent dark states, Nature Physics 10, 725–730 (2014).
- 13. E. S. Lee, C. Geckeler, J. Heurich, A. Gupta, Kit-Iu Cheong, S. Secrest, and P. Meystre Dark states of dressed Bose-Einstein condensates, Phys. Rev. A 60, 4006, 1999.
- 14. M. Ferretti, R. Hendrikx, E. Romero, J. Southall, R. J. Cogdell, Vladimir I. Novoderezhkin, G. D. Scholes, and R. van Grondelle Dark States in the Light-Harvesting complex 2 Revealed by Two-dimensional Electronic Spectroscopy, Sci Rep. 2016; 6: 20834, Published online 2016 Feb 9. doi: 10.1038/srep20834.
- 15. C. Pöltl, C. Emary, T. Brandes Spin entangled two-particle dark state in quantum transport through coupled quantum dots, Phys. Rev. B 87, 045416 (2013).
- 16. T.Tanamoto, K. Ono, F. Nori, Steady-state solution for dark states using a three-level system in coupled quantum dots, Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 51, 02BJ07 (2012).

- 17. H. Rose, D. V. Popolitova, O. V. Tikhonova, T. Meier, P. R. Sharapova Dark-state and loss-induced phenomena in the quantum-optical regime of Lambda -type three-level systems, Phys. Rev. A 103, 013702 (2021).
- 18. *Ozhigov Y.I.* О размерности пространства темных состояний в модели Тависа–Каммингса, Математические заметки, издательство МИАН (Москва), том 111, № 3, с. 433-442.
- 19. *Ozhigov Y.I.* Space of dark states in Tavis-Cummings model, Современные информационные технологии и ИТ-образование, издательство Фонд содействия развитию интернет-медиа, ИТ-образования, человеческого потенциала Лига интернет-медиа (Москва), том 15, № 1, с. 13-26.