



МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

Факультет вычислительной математики и кибернетики
Кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики

Выпускная квалификационная работа

**«Компьютерная химия малых
ансамблей одновалентных
искусственных атомов в модели
Борна-Оппенгеймера»**

Выполнил:

Студент 423 группы
Грабовский Максим Михайлович

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., профессор
Ожигов Юрий Игоревич

Москва, 2022

Содержание

| | | |
|----------|--------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | Введение | 3 |
| 1.1 | Введение | 3 |
| 2 | Постановка задачи | 3 |
| 2.1 | Постановка задачи | 3 |
| 3 | Математические модели и методы | 3 |
| 3.1 | Уравнение Шредингера | 3 |
| 3.2 | Уравнение Горини — Коссаковского — Сударшана (Линдблада) | 4 |
| 4 | Компьютерное моделирование | 5 |
| 4.1 | Задача | 5 |
| 4.2 | Численный расчёт неунитарной динамики | 5 |
| 4.3 | Тёмные состояния | 6 |
| 5 | Полученные результаты | 8 |
| 5.1 | Без прилёта фоонов | 8 |
| 5.2 | С прилётом фоонов | 10 |
| 5.3 | Тороидные решетки | 11 |
| 6 | Вычислительная сложность алгоритма | 12 |
| 6.1 | Тороид | 12 |
| 7 | Выводы | 12 |
| 8 | Список использованной литературы | 12 |
| 9 | Приложения | 13 |
| 9.1 | Приложение 1 | 13 |
| 9.2 | Приложение 2 | 14 |

1 Введение

1.1 Введение

Ансамбль одновалентных искусственных атомов в модели Борна-Оппенгеймера - это система, состоящая из нескольких искусственных атомов, каждый из которых имеет способен связаться с одним из атомов образовав молекулу.

В такой системе можно изучать различные явления, связанные с квантовой механикой, такие как квантовые фазовые переходы, колебания и распространение волн в кристаллических структурах и т.д. Такие системы используются в квантовых вычислениях, где квантовые свойства ансамбля искусственных атомов могут быть использованы для решения определенных вычислительных задач.

2 Постановка задачи

2.1 Постановка задачи

В данной работе проведено исследование неунитарной динамики квантовых состояний ансамблей одновалентных искусственных атомов в решетках в модели Борна-Оппенгеймера.

3 Математические модели и методы

3.1 Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера - главное уравнение квантовой механики, описывающее унитарную динамику квантовой системы, в данной работе будет моделироваться преимущественно неунитарная динамика, об этом далее.

Уравнение Шредингера имеет вид:

$$i\hbar |\dot{\Psi}\rangle = H |\Psi\rangle$$

Где:

H - Оператор полной энергии системы,

Ψ - Вектор состояния,

\hbar - Приведённая постоянная Планка $= \frac{h}{2\pi i}$, где h - постоянная Планка,

$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi(x)}{\partial t}$.

Выведем уравнение Шредингера для матрицы плотности:

Для этого возьмём сопряжение уравнения и применим формулу дифференцирования произведения.

$$\langle \Psi(t) | H = i\hbar \langle \dot{\Psi}(t) |$$

$$\dot{\rho} = \langle \dot{\Psi} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \dot{\Psi} \rangle$$

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [H, \rho]$$

Где:

ρ - матрица плотности,

Коммутатор $[H, \rho] = H\rho - \rho H$.

Уравнение Шредингера позволяет моделировать исключительно унитарную динамику, для изучения неунитарной (неэрмитовой, без требования к обратимости) динамики системы введём оператор декогеренции $\mathcal{L}(\rho)$ имеющий вид:

$$\mathcal{L}(\rho) = \sum_{j=1}^N \gamma_j (A_j \rho A_j^* - \frac{1}{2} \{\rho, A_j^* A_j\})$$

Где:

\mathcal{L} - оператор Линдблада,

A_j - факторы декогерентности,

ρ - матрица плотности,

A_j^* - сопряженный A_j ,

Антикоммутатор $\{\rho, A^* A\} = \rho A^* A + A^* A \rho$.

Прибавив к уравнению Шредингера оператор декогеренции домноженный на i получим уравнение вида:

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [H, \rho] + i\mathcal{L}(\rho)$$

называемое уравнением Горини — Коссаковского — Сударшана (уравнением Линдблада) численное решение данного уравнение является основным методом моделирования в данной работе.

3.2 Уравнение Горини — Коссаковского — Сударшана (Линдблада)

Уравнение Линдблада вида:

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [H, \rho] + i\mathcal{L}(\rho)$$

Является одним из основных инструментов в квантовых вычислениях. Оно описывает динамику квантовых систем при взаимодействии с окружающей средой, с наличием факторов декогеренции.

Уравнение Линдблада моделирует изменение квантовой системы со временем через вектор состояния, который задает вероятность нахождения системы в одном из возможных состояний. Взаимодействие с окружающей средой описывается через оператор Линдблада который моделирует действие окружающей среды на систему.

4 Компьютерное моделирование

4.1 Задача

В данной работе будем исследовать эволюцию системы M искусственных атомов в трёхмерной решётке $N * N * N$, в модели атомы туннелируют внутри решетки, строго по прямоугольным рёбрам решетки, причём узел туннелирования должен быть не занят. При приближении двух атомов друг к другу с некой вероятностью может образоваться молекула. Расчёт квантовой ассоциации и диссоциации будем производить с допущением что в течении промежутка моделирования атомы неподвижны, рассматривать ассоциацию-диссоциацию будем как для системы двух неподвижных атомов. При ассоциации энергия связи будет выделяться в виде фонона возбуждения и уноситься им, что и является фактором декогеренции. Фонон - квант механического колебания среды, в нашем случае решетки.

Закодируем состояния в виде вектора следующим образом:

$$|at_0x \ at_0y \ at_0z\rangle \dots |at_{(M-1)x} \ at_{(M-1)y} \ at_{(M-1)z}\rangle |ph_x \ ph_y \ ph_z\rangle |cov_{0,1} \dots cov_{0,M-1}\rangle$$

Где:

$at_{n(x/y/z)}$ - координата n -го атома по оси, $at_{n(x/y/z)} \in [0, N - 1]$,

$at_{x/y/z}$ - фононы соответствующих осей,

$cov_{(x,y)}$ - ковалентная связь между атомами $x, y \in [0, M - 1]$

Число состояний такой системы будет превышать $M^4 N^3$, что трудновычислимо, сократим число состояний системы зафиксировав позиции некоторых частиц и исключив недостижимые, пример (рис.1),

Рассмотрим область размера $3*3$ решётки, рассмотрим систему координат относительно этой области, зафиксируем позицию атома at_0 в точке $(1, 1, 1)$, тогда образование молекулы возможно только при появлении атома в любой из отмеченных точек. Например:

$$|at_0x \ at_0y \ at_0z\rangle \dots |at_nx \ at_ny \ at_nz\rangle \dots |cov_{0,n}\rangle = |1 \ 1 \ 1\rangle \dots |0 \ 0 \ 0\rangle \dots |0\rangle \Rightarrow |1 \ 1 \ 1\rangle \dots |0 \ 0 \ 1\rangle \dots |0\rangle \Rightarrow |1 \ 1 \ 1\rangle \dots |0 \ 1 \ 1\rangle \dots |0\rangle \Rightarrow |1 \ 1 \ 1\rangle \dots |0 \ 0 \ 0\rangle \dots |1\rangle$$

Далее удалим все недостижимые состояния, что составляет до половины из всех кортежей чисел соответствующих нашим интервалам, например:

$$|1 \ 1 \ 1\rangle \dots |0 \ 0 \ 0\rangle \dots |1\rangle, |0 \ 0 \ 0\rangle \dots |0 \ 0 \ 0\rangle \dots |0\rangle$$

Програмная реализация удаления недостижимых состояний указана в коде (см. приложение 1). Такая редукция числа состояний позволит снизить вычислительную сложность задачи.

4.2 Численный расчёт неунитарной динамики

-

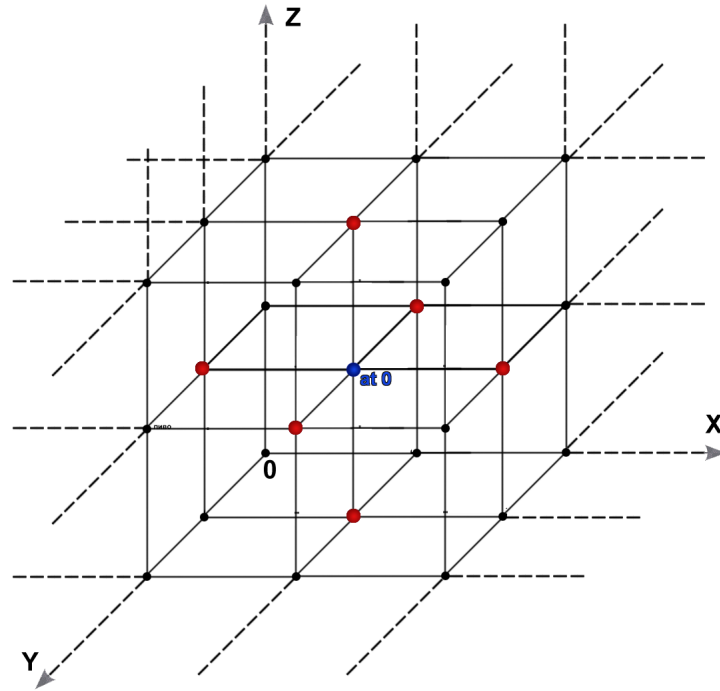


Рис. 1:

4.3 Тёмные состояния

Для получения не единичной вероятности возникновения молекулы в процессе неунитарной эволюции системы. Найдём полутёмное состояние. Зададим его качестве начального состояния системы в виде линейной комбинации базисных состояний в соответствии со схемой ниже (Рис. 2), где указан элемент размера 3×1 , базисные состояния из развёрток которого в правой части рисунка входят с соответствующими знаками и коэффициентами из левой части, итоговое состояние получено замощением всей решетки этим элементом, указанным на (Рис. 3) образом. Такое состояние является тёмным только на бесконечных решетках. Введём тороидную решетку для получения тёмных состояний на конечной решетке
Закодируем координаты атомов в состояниях следующим образом (Рис. 4):

$$|at_0x \ at_0y\rangle \dots$$

Где:

$at_{n(x)}$ - координата n-го атома в сечении тороида

$at_{n(y)}$ - координата сечения в котором находится n-й атом

Остальная часть состояния кодируется аналогично случаю кубической решетки.

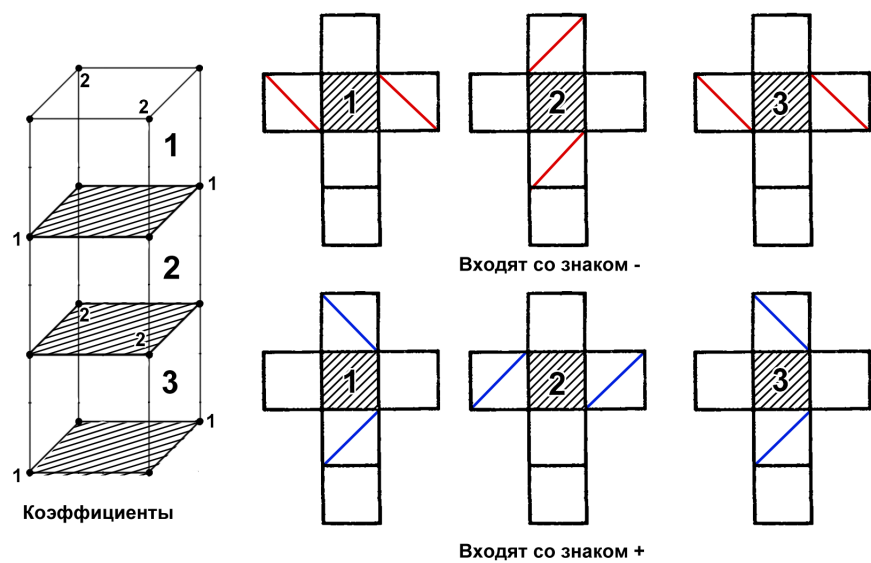


Рис. 2:

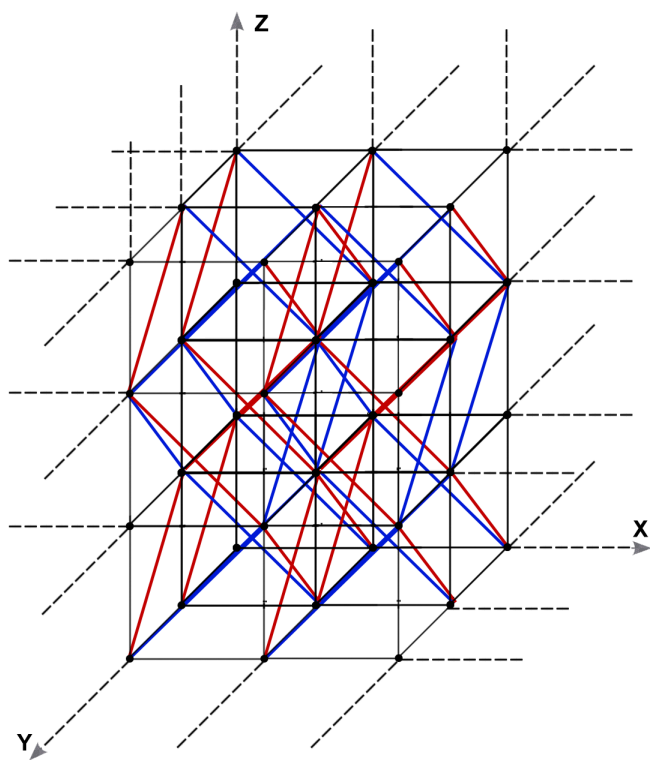


Рис. 3:

Пример обозначения координат атомов

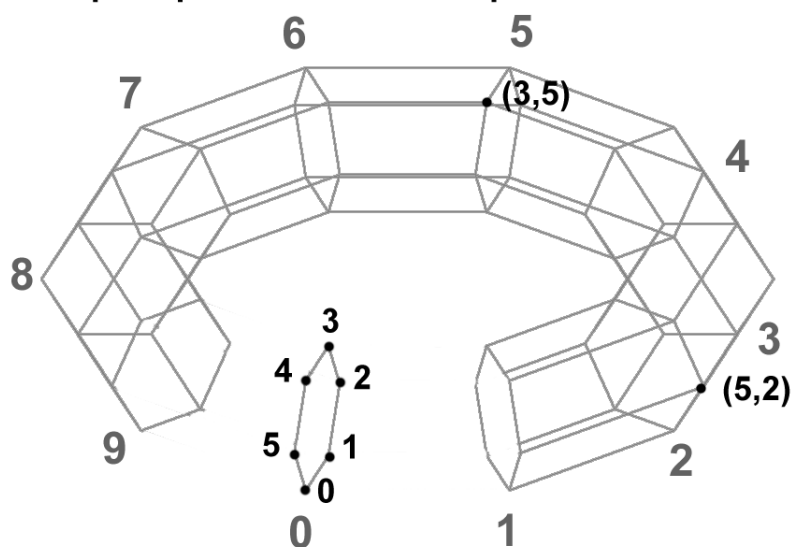


Рис. 4:

5 Полученные результаты

5.1 Без прилёта фононов

Графики 4,5:

$N = 4$

$M = 2$

Вероятности:

$\rho_{000cov+}/\rho_{mol}$ - состояние образованной молекулы

$\rho_{001cov-}, \rho_{101cov-}$ - произвольные достижимые состояния

$\sum \rho_{n/d}$ - недостижимые состояния

ρ_{cov-} - состояния без ковалентной связи

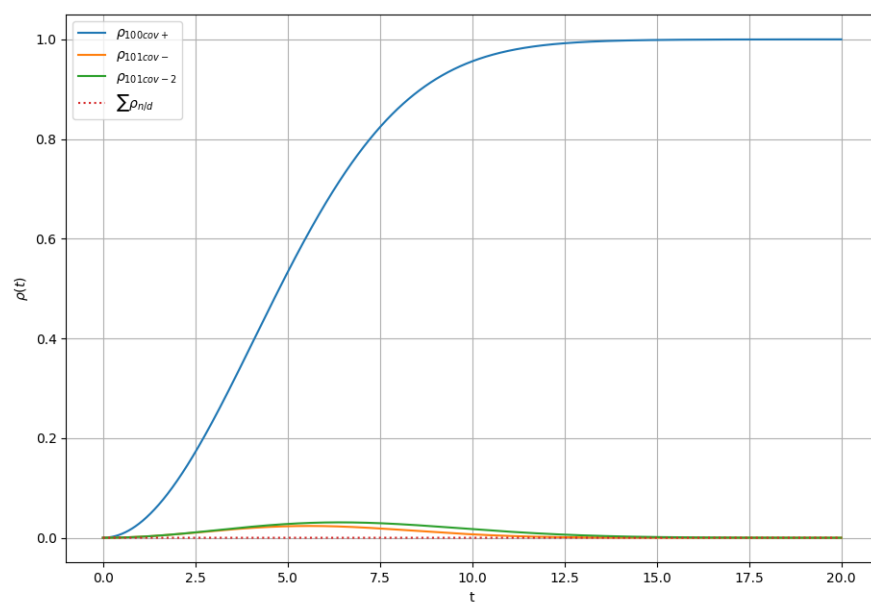


Рис. 5:

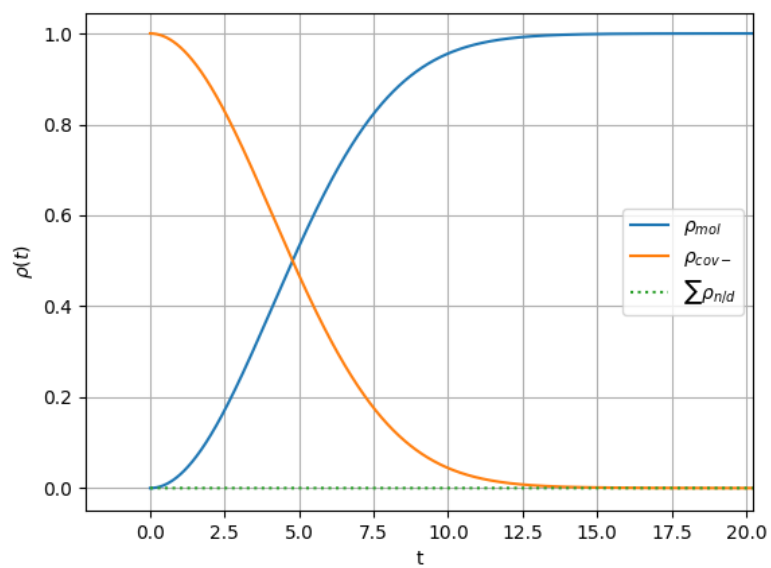


Рис. 6:

5.2 С прилётом фононов

Графики 6(7):

$$N = 4(5)$$

$$M = 2(2)$$

Вероятности:

$cov+$ - состояния с ковалентной связью

$cov-$ - состояния без ковалентной связи

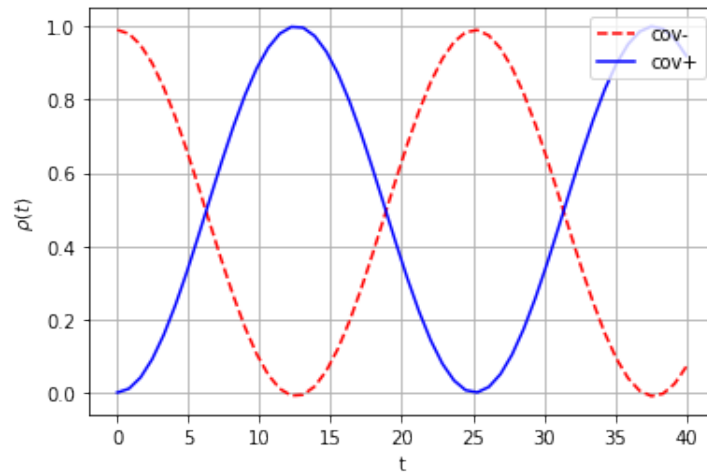


Рис. 7:

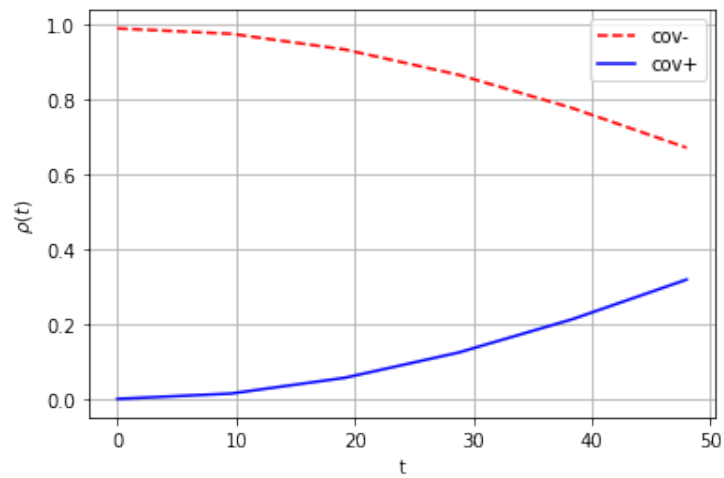


Рис. 8:

5.3 Тороидные решетки

График 9:

Тороид 4x5

Вероятности:

ρ_{mol} - начальное состояние [219]*1 (лексикографический порядок)

ρ_{molD} - начальное состояние из (Рис. 10)

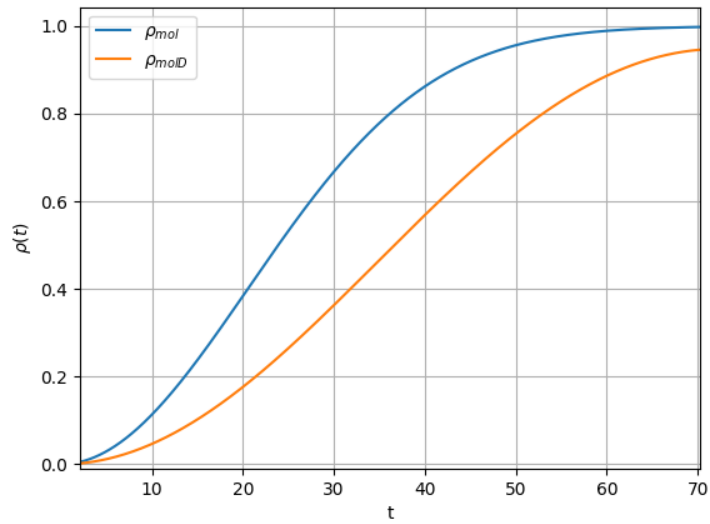


Рис. 9:

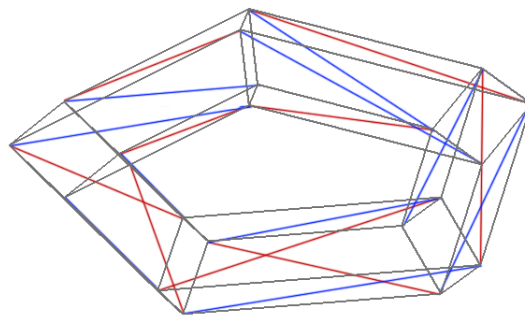


Рис. 10:

6 Вычислительная сложность алгоритма

6.1 Тороид

| Размер тороида | Время полное (с) | Время генерации гамильтониана (с) |
|----------------|------------------|-----------------------------------|
| 6*3 | 40,1 | 0,066 |
| 6*4 | 150,42 | 0,279 |
| 6*5 | 503,72 | 0,705 |
| 6*6 | 1246,89 | 1,443 |
| 6*7 | 2808,97 | 2,736 |
| 6*8 | 7202,63 | 4,578 |

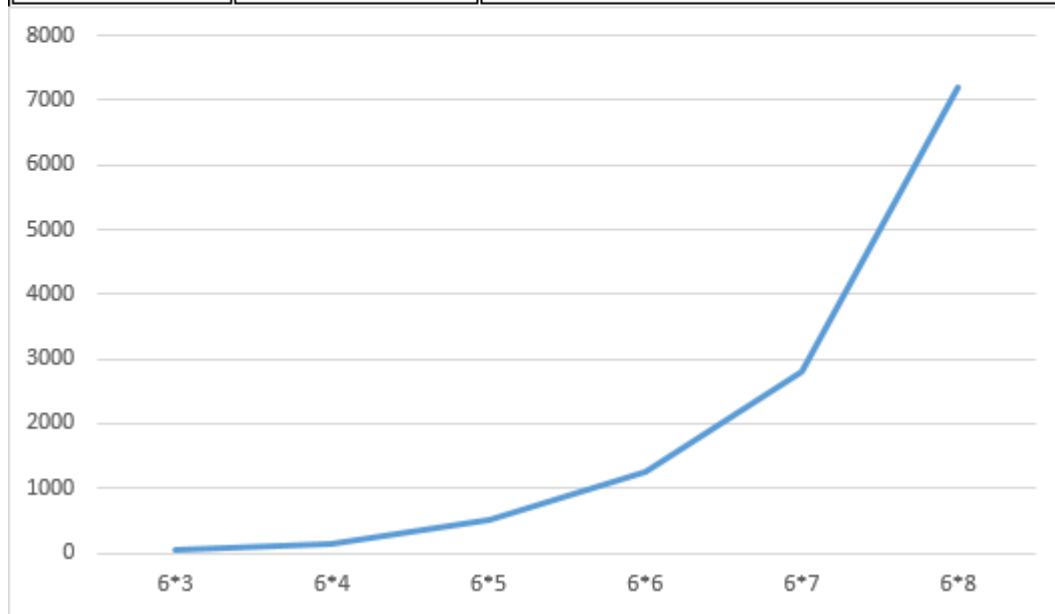


Рис. 11:

7 Выводы

Полученные данные свидетельствуют об адекватности используемой модели расчёта неунитарной динамики, данные о вычислительной сложности свидетельствуют об экспоненциальном росте сложности расчёта при линейном росте размерности решетки.

8 Список использованной литературы

1. Квантовый компьютер / Ю.И. Ожигов. 2020. - 172 с.
2. Фейнмановские лекции по физике / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. 1963.
3. Quantum computations (course of lectures) / Yuri I. Ozhigov
4. Gorini V., Kossakowski A., Sudarshan E. C. G. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems // J. Math. Phys. — 1976
5. Lindblad G. On the generators of quantum dynamical semigroups, // Commun. Math. Phys. — 1976
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — Издание 4-е. — М.: Наука — 1989.
7. Schrödinger, E. "An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules"— 1926
8. H. H. Rosenbrock, "Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations The Computer Journal — 1963
9. H. Padé. Sur la représentation approchée d'une fonction par des fractions rationnelles Thèse de Doctorat présentée à l'Université de la Sorbonne — 1892

9 Приложения

9.1 Приложение 1

Функция проверки валидности состояний, вызывая её в цикле нумеруем все достижимые состояния и передаём в другую программу для расчёта динамики (Приложение 2).

```
{  
  
    if (i==j) return (states[i].phx+states[i].phy+  
        states[i].phz+states[i].cov)*hW;  
    if ((states[i].phx+states[i].phy+states[i].phz)  
        <(states[j].phx+states[j].phy+states[j].phz))  
        return 0;  
    if ((states[j].cov==1)&&((abs(states[i].ax)  
+abs(states[i].ay)+abs(states[i].az))==1))  
        if (((states[j].phx<states[i].phx)&&states[i].cov  
==0&&states[j].ax==1)  
            ||((states[j].phy<states[i].phy)&&states[i].cov  
==0&&states[j].ay==1)  
            ||((states[j].phz<states[i].phz)&&states[i].cov  
==0&&states[j].az==1))  
            {
```

```

        return Gpho;
    }

    if ((abs(states[i].ax-states[j].ax)
        +abs(states[i].ay-states[j].ay)
        +abs(states[i].az-states[j].az)
        +abs(states[i].phx-states[j].phx)
        +abs(states[i].phy-states[j].phy)
        +abs(states[i].phz-states[j].phz)
        +abs(states[i].cov-states[j].cov))!=1)
        return 0;
    if (((abs(states[i].ax-states[j].ax)+
        abs(states[i].ay-states[j].ay)+
        abs(states[i].az-states[j].az))==1)&&
        ((states[i].cov==states[j].cov)&&states[i].cov==0))
        return Gtun;
    if (states[i].cov!=states[j].cov)
    {
        if ((states[j].cov==1)&&((abs(states[i].ax)+
            abs(states[i].ay)+abs(states[i].az))==1))
        {
            if((abs(states[i].ax==1)&&(states[i].phx==0)))
                return Gcov;
            if((abs(states[i].ay==1)&&(states[i].phy==0)))
                return Gcov;
            if((abs(states[i].az==1)&&(states[i].phz==0)))
                return Gcov;
        }
        if (states[j].cov==0){
            return 0;
        }
    }
}
return 0;

```

9.2 Приложение 2

Представлен фрагмент программы без улёта фононов

```

rho_ev = []
rho = np.copy(rho_0)
rho_ev.append(rho)

for i in range(1000):
    rho = np.dot(exp_H_m, np.dot(rho, exp_H_p))
    rho = rho + L(rho) * d_tau
    rho_ev.append(rho)

rho_0_ev = []
rho_12_ev = []
....
rho_204_ev = []
rho_212_ev = []

x_mesh = np.linspace(0, (len(rho_ev)-1) * d_tau, len(rho_ev))
for i in range(len(rho_ev)):

```

```

rho_0_ev.append(np.abs(rho_ev[i][0,0]))
rho_12_ev.append(np.abs(rho_ev[i][12,12]))
...
rho_204_ev.append(np.abs(rho_ev[i][204,204]))
rho_212_ev.append(np.abs(rho_ev[i][212,212]))

```

Выбраны 0,12..204,214 - состояния в которых ковалентная связь образована, далее вычисляется вероятность нахождения в этих состояниях