

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего
профессионального образования
«Московский физико-технический институт (государственный университет)»

На правах рукописи
УДК 539.12

Федоров Глеб Петрович

Моделирование квантового взаимодействия излучения и вещества
с использованием массивов сверхпроводниковых искусственных
атомов

Специальность 03.04.01 —
«Прикладная математика и физика»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
д. ф.-м. н., проф.
Рязанов Валерий Владимирович

Москва
2021 г.

Оглавление

Введение	2
1 Проектирование квантовых сверхпроводниковых устройств	10
1.1 Квантование электрических цепей	10
1.1.1 Классические уравнения движения	10
1.1.2 Преобразование Лежандра и гамильтониан	13
1.1.3 Матричная механика Гейзенберга	14
1.1.4 Волновая механика Шредингера	18
1.1.5 Понятия современной квантовой механики	22
1.1.6 Квантование планковского осциллятора	24
1.1.7 Квантование произвольных электрических цепей по Деворе	26
1.2 Сверхпроводимость	33
2 Экспериментальные методы	34
3 Взаимодействие двухатомной искусственной молекулы и излучения	35
4 Квантовый фотонный транспорт в модели Бозе-Хаббарда	36
5 Заключение	37

Введение

Актуальность работы

История развития сверхпроводниковых искусственных атомов, или кубитов, как инструмента для наблюдения макроскопических квантовых эффектов берет своё начало в 1997 году, когда в группе проф. Накамуры в Японии была впервые показана [1] когерентность суперпозиции зарядовых состояний одно-электронного транзистора. Этот эксперимент стал толчком к развитию новой области физики, интерес к которой обеспечивался как открывшимися возможностями изучать фундаментальные физические явления, так и потенциальной применимостью для квантовых вычислений.

Несмотря на относительно недавнее появление, сверхпроводниковые, или джозефсоновские кубиты, как их также называют, прошли много стадий в своем развитии. Системы, использовавшиеся в первых экспериментах, имели очень низкие времена когерентности: например, в работе [2] время затухания Раби-осцилляций в зарядовом кубите составило около 1 нс, в то время как сейчас рекордные времена когерентности составляют порядка 100 микросекунд [3]. Наиболее далеко в области квантовых вычислений продвинулись американские учёные, работающие теперь в компаниях Google и IBM. В частности, в 2019 году Google продемонстрировали [4] квантовое превосходство своего процессора из 53 кубитов над мощнейшим существующим классическим компьютером. Однако даже этот результат пока ещё далёк от реальных практических применений, так как количество ошибок, происходящих в устройстве, пока еще очень велико, и решаемая задача была создана искусственно для минимизации чувствительности результата к декогеренции. Как было показано еще Шором в XX веке [5], практические квантовые вычисления потребуют реализации алгоритмов коррекции ошибок, что неминуемо требует существенного увеличения числа физических кубитов, требующихся для обеспечения работы небольшого

числа логических. Увеличение числа кубитов более, чем на порядок, непременно натолкнётся на трудности масштабирования контролирующей электроники и криогенной аппаратуры [6], алгоритмов калибровки системы [4, 7], а также проектирования самих сверхпроводящих интегральных схем [8]. Отсюда следует, что сегодня нельзя назвать даже примерных сроков реализации полезных квантовых алгоритмов [4].

Однако острый интерес к потенциальным применениям в области квантовых вычислений помог мотивировать исследования со сверхпроводящими кубитами и по другим направлениям [3]. В частности, чрезвычайно большое количество экспериментов было проведено в области квантовой электродинамики цепей [9], вдохновленной нобелевскими исследованиями Гароша [10] по стандартной квантовой электродинамике полостей. Впервые сверхпроводниковый искусственный атом был сильно связан (*strongly coupled*) с квантованным полем в резонаторе в 2004 году в Йельском университете [11], что стало первым в истории экспериментальным подтверждением возможности связать одиночную квантовую систему с полем так, чтобы сила связи превысила диссипацию. С развитием технологии производства алюминиевых сверхпроводниковых чипов, открытием новых схем расположения их элементов, а также удешевлением электроники все больше групп в мире стали включаться в работу и вести собственные исследования. В Йельском университете работают проф. Деворе (Michel Devoret) и проф. Шелькопф (Robert Schoelkopf), занимающиеся в основном экспериментами с неклассическими состояниями света в микроволновых резонаторах, которые они готовят, используя связанные с ними искусственные атомы (см. [12, 13]). В этой группе также берут начало известные работы компании IBM (см. [14]), а также стартапа Rigetti, по фамилии одного из защитившегося в Йеле аспирантов [15]. В группе проф. Мартиниса (John Martinis) в университете Калифорнии, Санта Барбара, помимо обширной работы по развитию квантовых алгоритмов [4], проводились исследования многочастичной локализации [16, 17], квантового хаоса. В группе проф. Сиддики (Irfan Siddiqi), университет Калифорнии, Бёркли, проводятся эксперименты по наблюдению и изучению отдельных квантовых траекторий и квантовых скачков, которые испытывает кубит под воздействием сильных или слабых измерений (см. [18] и ссылки там же). Проф. Астафьев, работавший в Японии и затем в Англии, провёл первые эксперименты по взаимодействию свободного излучения в вол-

новодах с джозефсоновскими кубитами [19]. В Дельфтском университете под руководством проф. Ди Карло (Leonardo Di Carlo) проводились одни из первых экспериментов по реализации квантовых алгоритмов на двухкубитных схемах, а затем изучалась возможность цифрового моделирования произвольных гамильтонианов [20]. Наконец, в группе проф. Волрафа (Andreas Wallraff) проводятся эксперименты с одиночными микроволновыми фотонами, например, по созданию источника последовательности перепутанных друг с другом фотонов [21] или использовать одиночные летящие фотоны для перепутывания удаленных кубитов [22].

Как можно видеть, с течением времени обнаружился обширный перечень областей применения сверхпроводниковых квантовых систем, без которых все приведенные выше эксперименты были бы невозможны. Исследования, описанные в данной диссертации, посвящены экспериментальной реализации взаимодействия излучения и вещества в квантовом режиме при помощи сверхпроводниковых искусственных атомов. Данная тема лежит за пределами области цифровых квантовых вычислений и скорее оказывается ближе к аналоговому моделированию одних квантовых систем другими в духе изначального предложения Фейнмана [23]. Известно, что системы связанных кубитов позволяют экспериментально реализовывать симуляторы спиновых массивов в квантовом режиме, что пытается использовать в своих машинах компания DWave (см, например, [24]): однозначное отображение спинowego гамильтониана на экспериментальный образец дает надежду на то, что измерение параметров физической системы позволит найти положение минимума энергии в пространстве конфигураций модельного гамильтониана. Подобным образом в ходе мировых исследований было выявлено, что системы связанных многоуровневых трансмонов подходят для аналогового моделирования гамильтониана Бозе-Хаббарда [25–30]. Такое соответствие открывает целое направление экспериментальных исследований, так как по сути соединяет сверхпроводниковые системы с различными областями теоретической и экспериментальной физики, использующими одну и ту же математическую модель.

Цель работы

Целью диссертационной работы является исследование возможности аналогового моделирования взаимодействия излучения и вещества при помощи квантовых сверхпроводниковых устройств, теоретическое и экспериментальное, а также поиск и описание новых эффектов возникающих при таком взаимодействии.

Для достижения поставленной цели в ходе исследований были сформулированы следующие задачи:

1. создание экспериментальной базы для исследования сверхпроводниковых систем
2. измерение однокубитных образцов с целью контроля и улучшения их характеристик при фабрикации
3. численное моделирование системы двух связанных трансмонов, создание технологических чертежей
4. экспериментальное исследование образца, изготовленного по созданным чертежам, сопоставление результатов с теоретической моделью
5. численное моделирование цепочки, состоящей из пяти трансмонов, создание технологических чертежей
6. экспериментальное исследование образца, сопоставление предсказаний модели и полученных данных

Методы исследования

Работа со сверхпроводниковыми квантовыми устройствами требует использования комплекса методик. Основной экспериментальной установкой является рефрижератор растворения, в котором устанавливаются образцы. В нашей лаборатории используется аппарат финнской фирмы BlueFors. Он необходим не столько для обеспечения перехода материалов образца в сверхпроводящее состояние (достижение температуры перехода алюминия в 1.3 К, например, не требует такого типа рефрижераторов), сколько потому, что рабочие частоты

переходов системы составляют всего лишь несколько ГГц: для того, чтобы система постоянно находилась в основном энергетическом состоянии, требуются температуры ниже 100 мК. Рефрижератор должен быть соответствующим образом укомплектован, чтобы к образцу возможно было подключить коаксиальные выводы и осуществлять подачу на него микроволновых сигналов. В нашей лаборатории для этих целей используются оригинальные системы держателей образцов, изготовленных из бескислородной меди и немагнитные кабельные сборки. Помимо этого, требуется обеспечить магнитное экранирование образцов магнитомягким материалам с высокой магнитной проницаемостью.

Сами образцы обычно представляют собой кремниевые кристаллы, на которых напылен методом электронно-лучевого осаждения тонкий слой алюминия. Структуры в металле создаются при помощи фото или электронной литографии, в зависимости от требуемого размера элементов. Например, джозефсоновские переходы формируются на резистивной маске электронным лучом, а резонаторы и конденсаторы кубитов методами фотолитографии. Далее происходит проявление и, например, травление в плазме металла через образовавшиеся окна. В целом, изготовление образцов – это сложный многоступенчатый процесс с большим числом вариаций процессов и комбинаций используемых материалов, не ограничивающихся, конечно, лишь алюминием и кремнием. Автор не занимался производством образцов в рамках данной диссертационной работы, поэтому более подробное описание всех технологических процессов здесь приводиться не будет.

Измерение образцов производится при помощи коммерческого сверхвысокочастотного оборудования. Одним из главных элементов являются малошумящие усилители на двумерном электронном газе, обладающие минимальным добавленным шумом порядка 1.5 К в широкой полосе частот. Такие устройства позволяют регистрировать сигналы на уровне одного фотона по мощности используя разумное число усреднений (производитель – шведская фирма Low Noise Factory). Превосходят их по этому параметру только джозефсоновские параметрические усилители, добавленный шум которых примерно в 10 раз меньше и лимитируется уже квантовыми флуктуациями электромагнитного поля на входе. Однако, это гораздо более редкие устройства, которые пока что коммерчески недоступны и изготавливаются в каждой лаборатории самостоятельно. Другими приборами, используемыми в эксперименте, являются вектор-

ные анализаторы цепей, микроволновые генераторы СВЧ, спектральные анализаторы (фирмы-производители немецкая Rohde & Schwartz и американская Keysight). Помимо СВЧ устройств, работающих с непрерывными сигналами, для получения СВЧ импульсов применяется квадратурная модуляция с одной боковой полосой и подавлением несущей при помощи ВЧ устройств, генерирующих и снимающих сигналы на промежуточной частоте. Это также коммерческие цифровые приборы, с частотой дискретизации как минимум 1 ГВыб/с и аналоговой полосой 1 ГГц (производители немецкая Spectrum, американская Keysight). Работа с оборудованием осуществляется при помощи программного кода на языке Python, код находится в открытом доступе.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Разработана программно-инструментальная база для работы со сверхпроводниковыми квантовыми устройствами с использованием автоматизации измерений при помощи методов компьютерного зрения.
2. Разработана и исследована экспериментально система из двух связанных трансмонов, построена квантовомеханическая модель, объясняющая наблюдаемые спектральные линии и предсказывающая эффекты взаимодействия системы и падающего на нее излучения
3. Разработана и экспериментально исследована цепочка из пяти трансмонов, моделирующая фотонный транспорт через гамильтониан Бозе-Хаббарда, связанный с резервуарами на его краях; построена теоретическая модель, позволяющая численно рассчитать неравновесную динамику с учетом диссипации и внешнего вынуждения и предсказывающая спектральные свойства системы; показан переход от классического линейного режима к нелинейному, квантовому режиму работы системы с увеличением мощности падающего излучения

Научная новизна исследований

1. Впервые были применены методы машинного зрения к задаче автоматизации измерений сверхпроводниковых квантовых устройств, что позволило

проводить полный цикл экспериментов с однокубитными образцами без участия оператора

2. Впервые проведен полный и подробный анализ спектральных переходов в системе двух связанных трансмонов, впервые были обнаружены необычные проявления гибридизации излучения и вещества в составной системе, значительно изменяющие структуру энергетических уровней системы
3. Впервые был продемонстрирован транспорт фотонов в квантовом режиме через цепочку из пяти связанных трансмонов, впервые показан переход от классического режима транспорта к квантовому режиму фотонной блокады; продемонстрированы многофотонные переходы на многочастичные возбужденные состояния, точно предсказанные теоретическим расчетом.

Практическая значимость работы

Исследование сложных квантовых систем представляет огромную значимость для современной науки и техники. Находясь на переднем крае физики, исследования по созданию и контролю многочастичных квантовых систем могут в конечном итоге привести к созданию практически полезных макроскопических квантовых устройств, которые найдут применение в решении задач материаловедения, машинного обучения, оптимизации и криптографии. Принципиальная сложность численного расчета квантовой системы, выражающаяся в экспоненциальном росте гильбертова пространства состояний с увеличением числа её подсистем, является с одной стороны проблемой, а с другой стороны – возможностью, которую современной науке требуется использовать в своих целях. Эксперименты, проведенные автором в рамках данной диссертации подтверждают, что контроль небольших по размеру систем возможен, и применение их для моделирования известных гамильтонианов действительно имеет перспективы. Исследования и методики, описанные в диссертации, будут служить основой для дальнейшего увеличения числа кубитов на образце, совершенствования архитектуры чипов, масштабирования измерительных установок и поиска новых применений и задач, для которых возможно будет использовать сверхпроводниковые квантовые технологии.

Личный вклад автора

Основные результаты, изложенные в данной диссертации, получены лично автором. Соискатель проводил численные расчёты и экспериментальные исследования образцов, также автор принимал участие в их изготовлении и анализировал полученные результаты. Во всех случаях заимствования материалов других авторов в диссертации приведены ссылки на литературные источники.

Аппробация работы

Основные теоретические и практические результаты диссертации опубликованы в **5** статьях в научных журналах, входящих в перечень ВАК РФ.

1 Проектирование квантовых сверхпроводниковых устройств

1.1 Квантование электрических цепей

Процесс создания образца начинается прежде всего с расчета его характеристик. Для определения энергетической структуры системы применяется стандартная процедура квантования, берущая начало в классической механике: сначала составляется лагранжиан, который через преобразование Лежандра трансформируется в Гамильтониан, содержащий только обобщенные координаты и импульсы, и, наконец, производится переход к операторному представлению.

1.1.1 Классические уравнения движения

Проведем эту процедуру сначала для простейшей электрической цепи, представляющей параллельно соединенные катушку с индуктивностью L и конденсатором емкости C . Известно, что напряжение U_L на катушке пропорционально скорости изменения протекающего через нее тока $I_L(t)$: $U_L(t) = -L\dot{I}_L(t)$, а напряжение $U_C(t)$ на конденсаторе пропорционально заряду Q на нем: $U_C(t) = Q(t)/C$. Из сохранения заряда следует, что $I_L(t) = I_C(t) \equiv \dot{Q}(t)$. Приравняв оба напряжения, мы получаем уравнение движения:

$$L\ddot{Q} + Q/C = 0. \quad (1.1.1)$$

Подставляя в это уравнение заряд, гармонически зависящий от времени, $Q(t) = Q^0 \cos(\omega_r t)$, мы получаем стандартное выражение для собственной (ре-

зонансной) частоты LC осциллятора:

$$\omega_r = \sqrt{1/LC}. \quad (1.1.2)$$

Теперь введем вместо заряда другую переменную, которая для элемента цепи будет рассчитываться как интеграл по времени от напряжения, возникающего на нем:

$$\Phi(t) = \int_{-\infty}^t U(\tau) d\tau. \quad (1.1.3)$$

Напряжение на конденсаторе теперь может быть математически выражено как производная по времени от этой величины, причем в данном случае она не имеет физического смысла. Напротив, для катушки $\Phi(t) = \int_{-\infty}^t L \dot{I}_L(\tau) d\tau = LI_L(t)$ легко вычисляется и совпадает по смыслу с магнитным потоком, проходящим через нее, откуда и проистекает выбор обозначения данной величины. Теперь запишем для тока через конденсатор: $I_C(t) = \dot{Q}_C(t) = C\dot{U}_C(t)$, откуда с использованием равенства $U_C(t) = U_L(t)$ получаем альтернативное уравнение движения уже на магнитный поток:

$$C\ddot{\Phi}(t) + \Phi(t)/L = 0. \quad (1.1.4)$$

Подставляя в это уравнение гармоническую временную зависимость, мы получим ту же самую резонансную частоту, что и ранее для заряда.

Наличие двух эквивалентных уравнений движения, записанных в разных координатах, означает возможность составления, соответственно, двух эквивалентных лагранжианов:

$$\mathcal{L}_Q = \frac{L\dot{Q}^2}{2} - \frac{Q^2}{2C}, \quad (1.1.5)$$

$$\mathcal{L}_\Phi = \frac{C\dot{\Phi}^2}{2} - \frac{\Phi^2}{2L}. \quad (1.1.6)$$

Напомним, что такие лагранжианы могут быть выбраны, поскольку позволяют получить требуемые уравнения движения при решении соответствующей вариационной задачи с помощью уравнения Эйлера-Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}_X}{\partial \dot{X}} - \frac{\partial \mathcal{L}_X}{\partial X} = 0, \quad (1.1.7)$$

где $X = Q, \Phi$. Читатель может заметить, что выбор из двух лагранжианов представляет собой ни что иное, как выбор ролей емкостной и индуктивной энергий в качестве кинетической либо потенциальной.

Для понимания полезно также рассмотреть, как альтернативное описание может быть создано для привычной механической системы, например, для шарика массы m на пружинке с коэффициентом жесткости k . Второй закон Ньютона для системы записывается как

$$m\ddot{x}(t) + kx(t) = 0, \quad (1.1.8)$$

где $x(t)$ обозначает смещение шарика относительно положения равновесия. Теперь введем новую переменную

$$p(t) = \int_{-\infty}^t -kx(\tau) d\tau, \quad (1.1.9)$$

имеющую физический смысл импульса, накопленного шариком под действием силы со стороны пружины к моменту времени t . Для интересующего нас колебательного движения шарика этот импульс всегда ограничен и колеблется вокруг нуля. Скорость шарика будет выражаться как $v(t) = p(t)/m$, а уравнение движения станет выглядеть как (с учетом того, что $x(t) = -\dot{p}(t)/k$)

$$\ddot{p}(t)/k + p(t)/m = 0. \quad (1.1.10)$$

Как видим, имеется полная взаимозаменяемость двух описаний в координатах или импульсах, причем лагранжианы выглядят следующим образом:

$$\mathcal{L}_x = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{kx^2}{2}, \quad (1.1.11)$$

$$\mathcal{L}_p = \frac{\dot{p}^2}{2k} - \frac{p^2}{2m}. \quad (1.1.12)$$

Показанный дуализм связан как с понятием канонически сопряженных координат и каноническими преобразованиями, так и с теорией представлений и принципом неопределенности в квантовой механике.

1.1.2 Преобразование Лежандра и гамильтониан

Концепция импульса в теоретической механике переходит к обобщенному импульсу, определяемому как

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}_x}{\partial \dot{x}_i}, \quad (1.1.13)$$

где \mathcal{L}_x - это Лагранжиан системы, записанный через набор обобщенных координат $\{x_i\}$. В уравнении Эйлера-Лагранжа можно видеть корень такого определения: временная производная от определенной таким образом величины оказывается приравнена производной Лагранжиана по обобщенной координате. Сравнивая эту форму со вторым законом Ньютона, можно ввести и понятие обобщенной силы, как градиента потенциальной энергии в пространстве q_i . Аналогично, если лагранжиан записан в форме (1.1.12), то обобщенный импульс будет определен как

$$x_i = \frac{\partial \mathcal{L}_p}{\partial \dot{p}_i}. \quad (1.1.14)$$

Как видим, математический аппарат теоретической механики вполне допускает, что обобщенным импульсом может оказаться пространственная координата. Общая теория подобного рода канонических преобразований изложена, например, в [31].

Часто в аналитической механике используется координатный базис, в котором обобщенные импульсы связаны именно с физическим движением тел. Однако для электрических же систем лагранжиан может быть с равной убедительностью записан как в потоковом базисе, так и в зарядовом базисе, и невозможно отдать предпочтение ни одному из двух вариантов. К примеру, в базисе зарядов “обобщенный импульс” записывается как $\Phi = \partial \mathcal{L}_Q / \partial \dot{Q}$, причем здесь для него опять выбрано обозначение магнитного потока. Для гармонического осциллятора

$$\Phi = L\dot{Q} = LI_L. \quad (1.1.15)$$

Когда обобщенный импульс выбран, для получения гамильтониана используется преобразование Лежандра. Приведем его для механической системы в координатном базисе:

$$\mathcal{H} = \sum_i p_i \dot{x}_i - \mathcal{L}_x. \quad (1.1.16)$$

Проводя соответствующее преобразование для электрического осциллятора в базисе зарядов получим, подставляя \dot{Q} , выраженное через Φ :

$$\mathcal{H} = \frac{\Phi^2}{2L} + \frac{Q^2}{2C}. \quad (1.1.17)$$

Отметим, что гамильтониан содержит уже обе канонически сопряженные переменные и не зависит от выбора первоначальной координаты так, как ранее зависел лагранжиан.

1.1.3 Матричная механика Гейзенберга

С 1900 по 1925 год единственной теорией, позволявшей описывать линейчатые спектры простейших одноэлектронных атомов была так называемая “старая квантовая механика”, так или иначе использовавшая модель Бора-Зоммерфельда, предполагающая квантование интеграла. В 1925 году Вернер Гейзенберг, Макс Борн и Паскуаль Йордан создали матричную квантовую механику, которая без изменений существует и используется до сих пор в нерелятивистском пределе; более широкое распространение, однако, сейчас имеет эквивалентная теория – волновая механика Эрвина Шредингера, опубликованная им в 1926 году. Матричная механика впервые сводит задачу определения экспериментальных спектров квантовых систем к задаче поиска собственных значений матрицы, которой заменяется оператор Гамильтона.

Для того, чтобы увидеть исток матричной механики, прежде всего полезно вспомнить правило Бора-Зоммерфельда из старой квантовой механики:

$$\oint p_i dx_i = n_i \hbar, \quad (1.1.18)$$

определяющее дискретный набор классических траекторий, доступных системе. Это правило связано с классическим адиабатическим (квазистатическим) инвариантом $I = \oint p_i dx_i$, берущемся по одному периоду движения системы, и, фактически, указывает на квантование именно его значений.

Открытие правила Бора-Зоммерфельда было предопределено установлением знаменитой формулы $E = \hbar\omega$, впервые выдвинутой Максом Планком в 1900 году для решения ультрафиолетовой катастрофы и примененной также Альбертом Эйнштейном в 1905 для свободного излучения в фотоэффекте. В 1911 году

на Солвеевской конференции Хендриком Лоренцом был задан вопрос: как же может зависеть энергия осциллятора от его частоты в классической механике? Ведь для классических осцилляций частота и энергия не связаны напрямую. Также было неясно, как энергия квантового маятника может измениться при очень медленном изменении длины его подвеса, которое заведомо не может вызвать переходы между энергетическими уровнями системы из-за отсутствия необходимых для этого частотных компонент. Именно этот вопрос и привел к понятию адиабатического инварианта: выяснилось, что для так называемого осциллятора Рэлея-Лоренца при медленном изменении длины подвеса частота и энергия изменяются пропорционально друг другу, а отношение их как раз и равняется I . Таким образом выяснилось, как квантовомеханическая формула может быть увязана с классическими понятиями.

Триумфом уравнения (1.1.18) стала модель атома Нильса Бора, предложенная в 1913 году и описавшая, наконец, линейчатую структуру спектра атомов водорода и других одноэлектронных атомов, используя правило квантования адиабатического инварианта по классическим круговым орбитам. Арнольд Зоммерфельд продолжил развитие этой модели, введя эллиптические орбиты и расширив сферу ее правильных предсказаний. Однако, несмотря на это, старая квантовая механика все равно не смогла описать системы с более чем одним электроном. В частности, для атома гелия, представляющего систему трех тел, классические траектории могут быть хаотическими и, следовательно, апериодическими, что принципиально не дает возможности рассчитать адиабатический инвариант [32]. Исследования в направлении квазиклассического описания классических хаотических систем ведутся до сих пор. Более того, старая квантовая теория не объясняла, как именно происходят переходы между состояниями и как рассчитывать наблюдаемые интенсивности спектральных линий.

Итак, на смену старой квантовой механике, основанной на правиле Бора-Зоммерфельда, пришла матричная механика Гейзенберга. Естественно, основой теории по-прежнему служило понятие о квантовании энергетических уровней и дискретности разрешенных состояний. Однако путь к новому законченному формализму, занявший более 10 лет, был очень труден [33], и мы приведем его лишь кратко. Прежде всего, Гейзенберг использовал знание того, что любой процесс с периодом T можно представить в виде ряда Фурье. Например, мы

можем записать разложение для координаты механической системы:

$$x(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} x_n e^{2\pi i n t / T}. \quad (1.1.19)$$

Следующее соображение состоит в том, что квантовая система может излучать энергию лишь дискретными порциями при переходе с уровня n на уровень m , испуская фотон на частоте $(E_n - E_m)/\hbar$. Гейзенберг утверждал, что согласно принципу соответствия, такое излучение в классическом пределе должно определяться компонентой соответствующей частоты в разложении (1.1.19). Иными словами, если излучение на частоте $(E_n - E_m)/\hbar$ присутствует, значит, должно быть и что-то в физической системе, на такой частоте осциллирующее. Такая формулировка при всей своей поверхностности и, казалось бы, натянутости приводит нас к совершенно точному уравнению для эволюции так называемых “матричных элементов” x_{nm} :

$$x_{nm}(t) = e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} x_{nm}(0). \quad (1.1.20)$$

По Гейзенбергу связь матричных элементов и классических величин в том, что в классическом пределе $x_{nm}(t)$ при $n, m \gg 1$ переходит к Фурье-компоненте соответствующей частоты $(E_n - E_m)/\hbar$, выбранной из разложения (1.1.19).

Посмотрим, как эта логика работает в случае гармонического осциллятора. В классическом пределе, используя формулу Эйлера,

$$x(t) = \sqrt{E/2k}(e^{-i\omega_r t} + e^{i\omega_r t}), \quad (1.1.21)$$

$$p(t) = i\sqrt{E/2m}(e^{-i\omega_r t} - e^{i\omega_r t}), \quad (1.1.22)$$

где E – это классическая полная энергия. Можно видеть, что в динамике осциллятора имеются только компоненты на частоте $\pm\omega_r$. Поэтому принцип соответствия требует, чтобы матричные элементы $x_{nm}(0)$ были ненулевыми только для соседних значений индексов n и m , а энергетические уровни – эквидистантными, $E_n = \hbar\omega_r \cdot n$. Значения же этих матричных элементов обуславливаются энергиями состояний, между которыми происходят переходы – в классическом пределе амплитуда колебаний однозначно связана с их энергией. Таким образом, можно сразу же изобразить, например, $x_{nm}(0)$ осциллятора в матричном

виде:

$$x_{nm}(0) = \sqrt{\frac{2\hbar\omega_r}{k}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (1.1.23)$$

Также легко можно записать матрицу и для импульса $p_{nm}(0)$. Далее, легко проверить, что задание сопряженных переменных таким образом доставит диагональный вид матрице гамильтониана $\mathcal{H}_{nm} = \delta_{nm}\hbar\omega_r n$.

Из установленного матричного вида для координаты и импульса следует также и их некоммутативность:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar, \quad (1.1.24)$$

где шапочки над буквами обозначают их матричную природу.

Далее, эволюция во времени матрицы \hat{A} некоей физической наблюдаемой в гейзенберговском подходе описывается дифференциальным уравнением в матричной форме:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}], \quad (1.1.25)$$

которое следует из (1.1.20) и диагонального вида матрицы гамильтониана. Отметим здесь поразительное сходство этого уравнения с классическим уравнением Лиувилля на некую функцию обобщенных координат $A(x, p)$:

$$\frac{dA}{dt} = \{\mathcal{H}, A\} \equiv \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}. \quad (1.1.26)$$

В принципе, уравнения (1.1.25) уже достаточно для описания всех изолированных квантовых систем. Единственной проблемой, которую требуется решить, является нахождение матричных элементов в момент времени $t = 0$. Для гармонического осциллятора сделать это достаточно просто, однако для более сложных нелинейных систем установленного рецепта теория не дает.

1.1.4 Волновая механика Шредингера

Практически одновременно со статьей Гейзенберга, Борна, Йордана австриец Эрвин Шрёдингер впервые вывел своё знаменитое уравнение, основанное на гипотезе Луи Де Бройля о “волнах материи” (корпускулярно-волновом дуализме), выдвинутой им в своей докторской работе в 1924 году. Интересен тот факт, что опыты по дифракции электронов были проведены лишь позднее, и гипотеза, не имея реального экспериментального подтверждения, была основана лишь на аналогии с понятием о корпускулярно-волновых свойствах света, введенными Альбертом Эйнштейном для объяснения фотоэффекта. Публикация, содержащая уравнение Шредингера и названная “Квантование как задача о собственных значениях”, увидела свет лишь в начале 1926 года [34], уже после работы о матричной механике. Вот что писал об этой статье Гейзенберг в письме к своему ровеснику Вольфгангу Паули в том же году:

“The more I reflect on the physical portion of Schrödinger’s theory the more disgusting I find it. What Schrödinger writes on the visualizability of his theory, I consider trash. The greatest result of his theory is the calculation of the matrix elements.”

Как видим, возникла некоторая соревновательность между двумя подходами к описанию квантовых систем. Однако история показала, что на самом деле два подхода эквивалентны. Уравнение Шрёдингера оказалось более удобно для расчета спектров квантовых систем, а гейзенберговские уравнения движения чаще используются в квантовой оптике для описания динамики наблюдаемых величин в простых системах.

Итак, гипотеза Де Бройля состояла в том, что частица на самом деле может проявлять свойства волны с волновым вектором $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ и частотой $\omega = E/\hbar$. Значит, математически можно записать для амплитуды этой волны следующее выражение:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0 e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{x})} = \psi_0 e^{i(Et - \mathbf{p}\mathbf{x})/\hbar}. \quad (1.1.27)$$

Каким же должно быть уравнение, чтобы его решение не только давало правильное выражение для волны свободной частицы, но и описывало дискретные спектры частиц в произвольном потенциале, да еще и удовлетворяло принципу соответствия, воспроизводя правильные законы движения для систем в классическом пределе?

Несмотря на кажущуюся трудность вопроса, надежда получить из такого подхода правильные результаты была сильна. Например, в задачах, связанных с волнами, дискретные частотные спектры оказываются повсеместным явлением, если рассматриваются нормальные колебательные моды. Напомним, что нормальной модой или стоячей волной называется факторизованное решение волнового уравнения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad (1.1.28)$$

вида

$$u_n(x, t) = u_n(x) e^{i\omega_n t}, \quad (1.1.29)$$

где ω_n как раз и является набором дискретных собственных частот. Аналогично, если частица проявляет волновые свойства, то и стоячие волны материи с дискретными частотами должны быть возможны.

Шредингер начинает свой вывод с классического уравнения Гамильтона-Якоби на действие $\mathcal{S} = \mathcal{S}(x, t)$ [34]. Мы для простоты запишем его для частицы массой m с одной степенью свободы:

$$\mathcal{H}\left(x, \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial x}\right) = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} = E, \quad (1.1.30)$$

где последнее равенство достигается за счет отсутствия явной зависимости от времени в потенциальной энергии [31]. Далее совершается подстановка

$$\mathcal{S} = K \log \psi, \quad (1.1.31)$$

где неизвестная функция $\psi(x, t)$ пока что не имеет определенного физического смысла. Подставляя это выражение в (1.1.30), получим

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \frac{2m}{K^2}(U(x) - E)\psi^2 = 0. \quad (1.1.32)$$

Далее предлагается решить вариационную задачу на $\psi(x, t)$:

$$\delta J = \delta \int dx \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \frac{2m}{K^2}(U(x) - E)\psi^2 \right] = 0. \quad (1.1.33)$$

Отсюда из уравнения Эйлера-Лагранжа [35] сразу же получаем стационарное

уравнение Шредингера уже практически в современном виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x)\psi = E\psi. \quad (1.1.34)$$

Единственным, что требовалось установить, была величина константы \hbar , имеющей размерность действия. Естественным образом, для совпадения с экспериментом она должна быть положена равной \hbar .

Отметим, что в этом выводе (первая часть работы Шредингера) ничего не говорится о явной форме временной зависимости функции $\psi(x, t)$. Шредингер говорит, что был неправ, когда поначалу называл уравнение (1.1.34) волновым. На самом деле, это уравнение амплитудное, или уравнение вибрации. Его главная проблема в том, что оно содержит обязательный параметр E и не содержит производных по времени. Таким образом, оно не может описать неконсервативную систему, взаимодействующую, например, с излучением. Для того, чтобы получить настоящее волновое уравнение Шредингер попытался добавить производные по времени в свое уравнение, используя тот факт, что для гармонического решения $\psi(x, t) \propto \exp[-iE/\hbar t]$ выполнено

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2} = -\frac{E^2}{\hbar^2} \psi(x, t). \quad (1.1.35)$$

Для того, чтобы получить истинное волновое уравнение, не содержащее параметра E и дающее уравнение (1.1.34) в случае гармонической зависимости от времени функции $\psi(x, t)$, Шредингер дифференцирует уравнение (1.1.36) по координате еще два раза, выражает $\partial^2 \psi / \partial x^2$ и $E\psi$ через прежнее стационарное уравнение, а затем разрешает всё относительно $E^2 \psi$. Получившееся выражение подставляется в правую часть (1.1.35) и получается новое уравнение:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - U(x) \right)^2 \psi + \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0. \quad (1.1.36)$$

Это Шредингер и называет однородным и общим волновым уравнением на скалярное поле ψ . Однако оно уже не имеет такой простой формы, как (1.1.28): здесь мы видим четвертый порядок производной по координате, что походит на задачу о собственных колебаниях твердых тел. Например, для колебаний упругой пластины волновое уравнение действительно содержит два лапласиана [35].

Далее в предположении независимости $U(x)$ от времени уравнение (1.1.36) при обратной подстановке гармонической зависимости от времени для ψ , может быть разложено на множители следующим образом:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - U(x) + E \right) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - U(x) - E \right) \psi = 0, \quad (1.1.37)$$

возвращаясь таким образом к исходному стационарному уравнению (1.1.34). Шредингер в своей статье пишет, что такое разделение выглядит неубедительным, но часто встречается в решении дифференциальных уравнений в частных производных и действительно может быть строго обосновано через полноту базиса собственных функций. Однако, к сожалению, уравнение (1.1.36) не может быть разделено таким образом в случае зависимости потенциала от времени и, таким образом, не годится для нестационарных задач. Более того, вывод этого уравнения удастся строго повторить только если предполагать, что $U(x)$ – константа (читателю также предлагается проверить это).

Поэтому далее Шредингер отказывается от соблюдения обычной формы волнового уравнения и для удаления свободного параметра E выбирает другую, более простую, подстановку:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm \frac{i}{\hbar} E \psi. \quad (1.1.38)$$

Тогда нестационарное уравнение Шредингера запишется уже в совершенно современном виде:

$$\pm \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x, t) \psi. \quad (1.1.39)$$

Именно о такой, и только о такой подстановке Шредингер пишет в своей обзорной статье, опубликованной уже в конце 1926 года и названной “Колебательная теория механики атомов и молекул” [36].

Несмотря на успешность уравнения Шредингера, физический смысл понятий, лежащих в его основе, в его работах полностью не раскрывается, и классическая интерпретация волн материи как стоячих волн не выдерживает подробного анализа. К примеру, квантование частот стоячих волн в классической механике совершенно не сопряжено с квантованием энергий: амплитуда каждой стоячей волны может быть произвольной. Далее, понятие нормальных колебаний определено только в линейных системах, а в таких системах переходы

между различными модами под действием излучения на разности их частот происходить не могут: для этого необходимы нелинейные процессы смешивания. Для нелинейных же систем понятие нормальных мод строго не определено [37]. В рамках сказанного непротиворечивая интерпретация физического смысла волновой функции как стоячей волны всё-таки невозможна, и, вероятно, именно эти пробелы вызвали отторжение у Гейзенберга. Поэтому прежде, чем переходить к расчету волновых функций для гармонического электрического осциллятора, мы введем современную аксиоматику и будем далее использовать только её.

1.1.5 Понятия современной квантовой механики

На момент создания волнового уравнения для частиц еще не существовало понятия о гильбертовом пространстве векторов состояний, дираковского формализма бра-кет векторов, теории представлений, а также понятия об импульсе как о дифференциальном операторе. Также не существовало и интерпретации квадрата абсолютного значения *волновой функции* $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ как вероятности обнаружить частицу в той или иной точке пространства. Современная квантовая механика, наоборот, строит свою аксиоматику изначально основываясь на этих понятиях и принципе соответствия, а уравнение Шредингера оказывается выводимым следствием.

Сейчас в университетских программах главный шаг в процедуре квантования (получения уравнения Шредингера) состоит в замене обобщенного импульса дифференциальным оператором:

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla. \quad (1.1.40)$$

Насколько возможно было установить общность этого правила в 1926 году? В принципе, ключевые открытия уже были сделаны. В первую очередь, вспомним важнейшее соотношение из классической теоретической механики:

$$\mathbf{p} = \nabla\mathcal{S}. \quad (1.1.41)$$

С учетом очевидной связи волновой функции и действия через выражение (1.1.31), а также того, что именно кинетическая энергия дает все члены с произ-

водными в стационарном уравнении Шредингера, вывод о замене физической наблюдаемой оператором не заставил себя долго ждать. Уже в августе 1926 года Поль Дирак в докторской статье явно использует замену (1.1.40) [38]. Дополнительно принятие сообществом перехода к операторному виду было облегчено и матричной механикой Гейзенберга, о выведении которой из уравнения Шредингера, кстати, было тоже сказано Дираком в его статье.

Математический аппарат для квантовой механики был сформирован практически в одиночку гениальным математиком Джоном фон Нейманом в 1927-1929 годах [39]. Он объединял матричную и волновую механики под общим названием теории трансформаций. Центральной идеей фон Неймана стало абстрактное гильбертово пространство, векторами которого описываются состояния квантовых систем: к линейным динамическим уравнениям квантовой механики такой формализм подходил идеально.

Гильбертово пространство определяется тремя признаками:

1. Скалярное произведение $\langle a|b \rangle = \langle b|a \rangle^*$
2. Линейность $\langle \alpha a + \beta b|c \rangle = \alpha \langle a|c \rangle + \beta \langle b|c \rangle$
3. Положительная определенность $\langle a|a \rangle > 0 \ \forall |a \rangle \neq 0$.

Здесь мы сразу вводим дираковские обозначения для векторов-столбцов и векторов-строк. Модуль скалярного произведения в квадрате $|\langle a|b \rangle|^2$ показывает вероятность обнаружить систему в состоянии $|a \rangle$, если перед измерением она была в состоянии $|b \rangle$. Отсюда сразу следует, что волновая функция в координатном представлении может быть определена как

$$\psi_a(x) = \langle x|a \rangle. \quad (1.1.42)$$

Здесь $\langle x|$ - вектор-строка состояния, в котором частица имеет строго заданную координату x . Волновая функция такого состояния, если его подставить вместо произвольного вектора-столбца $|a \rangle$ представляет собой дельта-функцию Дирака.

1.1.6 Квантование планковского осциллятора

С использованием современного формализма стационарное уравнение Шредингера для электрического осциллятора с гамильтонианом (1.1.17) может быть записано следующим образом:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2L}\frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{Q^2}{2C}\right)\psi_n = E_n\psi_n, \quad (1.1.43)$$

где $\psi_n = \psi_n(Q) = \langle Q|E_n\rangle$ является энергетической волновой функцией, записанной в базисе зарядов.

В качестве примера, мы решим это уравнение численно. Для этого мы введем дискретную сетку зарядов с шагом ΔQ и заменим дифференциальный оператор разностной схемой, например, четвертого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2\psi_n}{\partial Q^2}(Q) \approx \frac{1}{\Delta Q^2} \left[-\frac{1}{12}\psi_n(Q - 2\Delta Q) + \frac{4}{3}\psi_n(Q - \Delta Q) \right. \\ \left. -\frac{5}{2}\psi_n(Q) + \frac{4}{3}\psi_n(Q + \Delta Q) - \frac{1}{12}\psi_n(Q + 2\Delta Q) \right] \end{aligned} \quad (1.1.44)$$

В задаче также ставятся нулевые граничные условия, так как рассматривается локализованная волновая функция; иными словами, в численной модели заряд на конденсаторе не может превышать определенного значения, что не влияет на результаты расчета до тех пор, пока волновая функция имеет там близкую к нулю амплитуду. С использованием разностной схемы оператор производной приводится к виду квадратной матрицы, действующей на столбец, хранящий значения волновой функции. Второе слагаемое левой части уравнения (1.1.43) записывается как диагональная матрица той же размерности. Итоговый оператор затем численно диагонализуется библиотекой *scipy*.

Полученные собственные векторы и уровни энергии показаны на Рис. 1.1. Как можно видеть, волновые функции дают ненулевую вероятность обнаружить заряд конденсатора больший, чем классически разрешенный при заданной энергии. Можно также заметить, что энергия основного состояния (нулевых колебаний) несколько больше нуля и составляет $\hbar\omega_r/2$.

Идентичный результат был бы получен при использовании потокового базиса. Однако интересно также рассмотреть энергетический базис, в котором

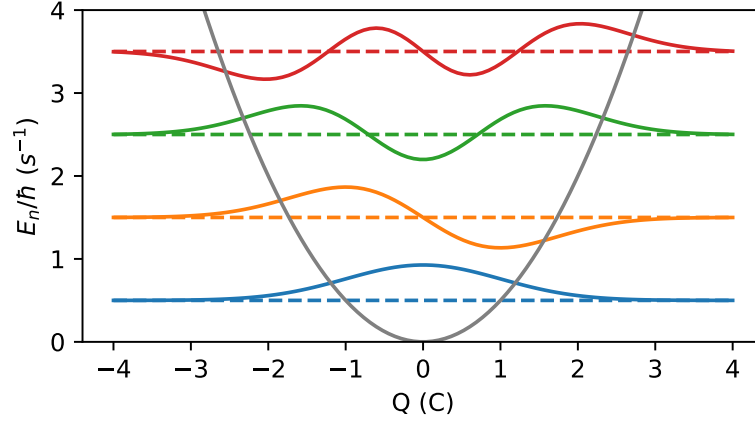


Рис. 1.1: Численное решение стационарного уравнения Шредингера для гармонического осциллятора: изображены низшие четыре собственных энергетических уровня (штриховые линии) и состояния гамильтониана (цветные сплошные линии, не в масштабе, за ноль принят соответствующий уровень энергии). Серая сплошная линия показывает потенциальную энергию системы. Параметры $L = 1$ Гн, $C = 1$ Ф дают циклическую частоту перехода в 1 рад/с.

оператор Гамильтона будет диагональным. Для перехода в него будет использоваться так называемое “вторичное квантование”, использующее операторы рождения и уничтожения фотонов в осцилляторе \hat{a}^\dagger и \hat{a} , $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. Произведением замены

$$\hat{Q} \rightarrow \sqrt{\frac{\hbar\omega_r C}{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad (1.1.45)$$

$$\hat{\Phi} \rightarrow i\sqrt{\frac{\hbar\omega_r L}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (1.1.46)$$

гамильтониан приводится к диагональному виду:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega_r(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2). \quad (1.1.47)$$

Ненулевая энергия флуктуаций заряда в основном состоянии оказывается проблемой в случае квантования электромагнитного излучения в вакууме: свободное излучение после преобразования Фурье может представляется квантовомеханически как набор квантовых осцилляторов с непрерывным спектром всевозможных частот. Если учесть, что в основном состоянии энергия каждого равна $\hbar\omega/2$, интеграл полной энергии флуктуаций вакуума окажется расходящимся. Даже если взять в интеграле некоторую верхнюю отсечку по частоте, как часто делается в квантовой электродинамике, энергия пустого простран-

ства окажется на 120 порядков больше, чем предсказывается космологической постоянной в общей теории относительности; в то же время, гравитационного эффекта, который был бы вызван энергией нулевых флуктуаций, действительно не наблюдается. С другой стороны, действие вакуумных флуктуаций однозначно проявляется в так называемом эффекте Казимира, измеренном сейчас с большой точностью [40]. Подобно ультрафиолетовой катастрофе конца 19 века, эта проблема названа вакуумной катастрофой и до сих пор не разрешена [41].

1.1.7 Квантование произвольных электрических цепей по Деворе

На заре экспериментов с макроскопическими квантовыми системами Мишелем Деворе была создана методика для квантования произвольных электрических цепей, которая отразилась в его методичке 1995 года “Квантовые флуктуации в электрических цепях” [42]. По большому счету, в этой работе не содержится ничего, чего не было бы в стандартных аналитической и квантовой механиках, однако есть несколько практических замечаний, которые пригодятся нам в дальнейшем при рассмотрении более сложных электрических цепей, содержащих джозефсоновские переходы.

Подход Деворе – квантовать цепи в потоковом базисе, учитывая возможное наличие петель, через которые может проходить внешний магнитный поток. Такой поток оказывается важен, так как его изменение может создавать ЭДС в замкнутом контуре и явно входить во второй закон Кирхгофа. Если работать в потоковом базисе (проинтегрировать все напряжения во втором законе Кирхгофа по времени), такой поток окажется просто включенным в уравнения, и, следовательно, в Лагранжиан.

Поучительным в данном случае является пример гармонического осциллятора, который формально представляет собой кольцо, в котором можно записать второй закон Кирхгофа. Представим, что в через данное кольцо физически проходит некий поток Φ_e . Тогда в потоковом базисе второй закон Кирхгофа запишется как

$$-L\dot{I}_L - Q_C/C = \dot{\Phi}_e. \quad (1.1.48)$$

Интегрируя по времени и подставляя в первый закон Кирхгофа, получим:

$$\Phi_L/L = -(\ddot{\Phi}_L + \ddot{\Phi}_e)C. \quad (1.1.49)$$

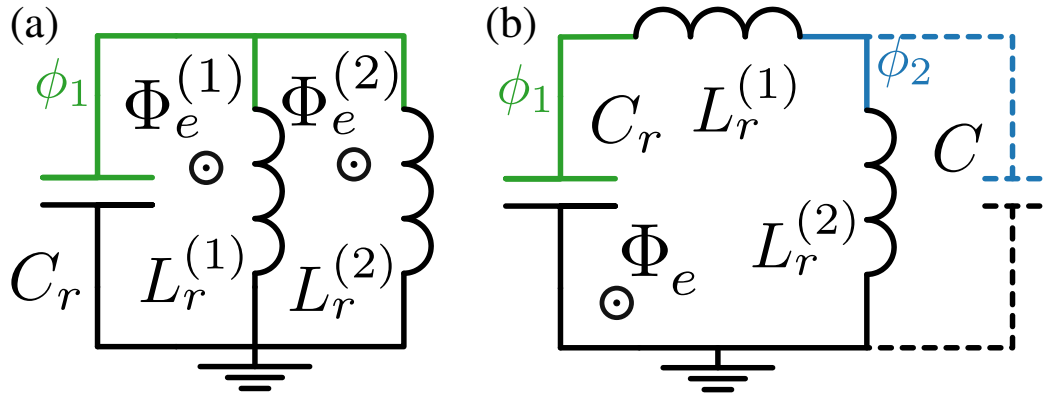


Рис. 1.2: Две конфигурации осциллятора с добавленными индуктивностями: параллельно (а) и последовательно (б). Узловые фазовые переменные (степени свободы) обозначены буквами ϕ и соответствующим цветом.

Как можно видеть, в случае электрического осциллятора в уравнение движения входит вторая производная от внешнего потока. Таким образом, если он является постоянным или даже линейно меняющимся во времени, никакого эффекта на динамику он не оказывает. В противном же случае его надо учитывать в явном виде.

Посмотрим теперь, как подходит к этой проблеме Деворе. В формуле (2.13) из [42] мы обнаруживаем, как второй закон Кирхгофа учитывается при определении потоковой переменной на элементе, заканчивающем неустраиваемый контур. Такой элемент не создает новой степени свободы в системе, а лишь использует старые степени свободы (узловые потоки, см. определение там же [42]). Для демонстрации подхода несколько усложним контур электрического осциллятора, добавив в него новую индуктивность параллельно или последовательно со старой, см. Рис. 1.2.

Для параллельного соединения обе индуктивности являются элементами, закрывающими свой контур. Поэтому для катушек мы записываем:

$$\Phi_L^{(1)} = \phi_1 - 0 + \Phi_e^{(1)}, \quad (1.1.50)$$

$$\Phi_L^{(2)} = \phi_1 - 0 + \Phi_e^{(2)}, \quad (1.1.51)$$

где мы использовали тот факт, что “земля” имеет по определению нулевое значение узлового потока. В таком случае лагранжиан в потоковом базисе запишется как

$$\mathcal{L}_{L||L||C} = \frac{C_r \dot{\phi}_1^2}{2} - \frac{(\phi_1 + \Phi_e^{(1)})^2}{2L_r^{(1)}} - \frac{(\phi_1 + \Phi_e^{(2)})^2}{2L_r^{(2)}}. \quad (1.1.52)$$

Как видим, внешние потоки явно входят в лагранжиан, и, очевидно, будут присутствовать и в гамильтониане системы. Однако при ближайшем рассмотрении потенциала выясняется, что его форма остается неизменной параболической для любых конфигураций значений индуктивностей и потоков сквозь петли; единственным эффектом внешних потоков является постоянное смещение минимума потенциальной энергии относительно параметра ϕ_1 . Колебания же будут определяться квадратичным членом с эффективной индуктивностью $L_r = L_r^1 || L_r^2$ параллельно соединенных катушек. Тот же результат мы получили бы, если бы заранее объединили катушки согласно правилу сложения индуктивностей и применяли процедуру к уже упрощенному контуру (предварительное упрощение часто применяется для сложных цепей, см., например, [43]).

Рассмотрим теперь последовательное соединение катушек, Рис. 1.2 (b) (без штрихованного конденсатора). В отличие от предыдущего случая, мы обнаруживаем, что число степеней свободы увеличилось с добавлением новой индуктивности, а единственный контур сохранился. Лагранжиан такой системы:

$$\mathcal{L}_{LL||C} = \frac{C_r \dot{\phi}_1^2}{2} - \frac{(\phi_2 - \phi_1)^2}{2L_r^{(1)}} - \frac{(\phi_2 + \Phi_e)^2}{2L_r^{(2)}}. \quad (1.1.53)$$

Из вида лагранжиана становится очевидно, что переменная ϕ_2 оказывается зависимой. Действительно, уравнение Лагранжа-Эйлера на нее запишется следующим образом:

$$\phi_2/L_r^{(1)} + \phi_2/L_r^{(2)} + \Phi_e/2L_r^{(2)} = \phi_1/L_r^{(1)}. \quad (1.1.54)$$

Подставляя выраженное отсюда ϕ_2 в оставшееся уравнение Эйлера-Лагранжа, мы получим уравнение колебаний на ϕ_1 с эффективной индуктивностью $L_r^{(1)} + L_r^{(2)}$. Очевидно, именно так и должно было получиться, если бы мы опять применили правило сложения теперь уже последовательных индуктивностей. Магнитный поток, конечно, также войдет в уравнения движения, но не будет влиять на динамику системы при условии независимости его от времени.

Но каковы же будут решения уравнения Шредингера, составленного с использованием лагранжиана (1.1.53)? Из-за отсутствия обобщенного импульса по ϕ_2 ($\partial \mathcal{L}_{LL||C} / \partial \dot{\phi}_2 = 0$) в операторе Гамильтона не будет второй производной по этой координате. Это приведет к тому, что собственные функции в направле-

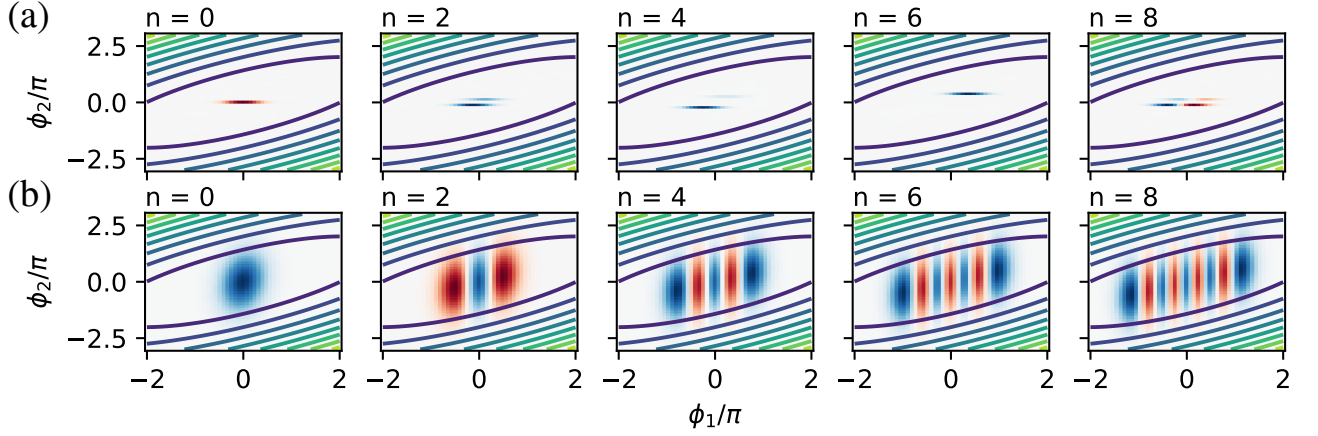


Рис. 1.3: Собственные состояния модели Рис. 1.2 (b) при $C = 0$ (a) и $C = C_r/100$ (b) (показаны чётные номера). В обоих случаях $C_r = 1$, $L_r^{(1)} = L_r^{(2)} = 0.5$. При $C = 0$ численные собственные значения зависят от шага сетки и оказываются неверными. В другом случае же ответ получается верным: спектр эквидистантный с шагом $\omega_r \approx 1 \text{ s}^{-1}$. Контурными линиями показана потенциальная энергия из (1.1.53). В каждом направлении пространство разбито на 50 ячеек.

нии ϕ_2 окажутся дельта-функциями и суперпозициями дельта-функций. Также это будет означать, что в силу соотношения неопределенностей узловой заряд q_2 на острове, отмеченном синим на Рис. 1.2 (b), окажется полностью делокализованным, так как является канонически сопряженным бесконечно локализованному дельта-функцией узловому потоку ϕ_2 . Численное решение такого уравнения Шрёдингера оказывается невозможным, так как спектр задачи является непрерывным и не может быть воспроизведен диагонализацией конечномерных матриц. Результаты такого наивного решения приведены на Рис. 1.3 (a). Как можно видеть, алгоритм воспроизводит дискретные дельта-функции по оси ϕ_2 и правильно определяет структуру собственного состояния гармонического осциллятора по оси ϕ_1 , однако рассчитанный энергетический спектр системы оказывается в целом неверным. Физически полная делокализация узлового заряда также невозможна, так как означала бы ненулевую вероятность обнаружения произвольно большого заряда на соответствующем острове.

Как видим, в классическом случае схема Рис. 1.2 (b) без штрихованного конденсатора допускает физически осмысленное решение. Однако в квантовом случае для получения осмысленного результата требуется учитывать малый конденсатор C для освобождения потоковой переменной ϕ_2 (для простоты будем считать, что в новом кольце поток равен нулю). На практике такая емкость всегда будет существовать из-за конечных размеров проводника, отмеченного

синим цветом. Интересно также, что переход от локализации к делокализации ϕ_2 происходит скачком при непрерывном уменьшении емкости конденсатора до нуля. Пример состояний, получающихся при правильной диагонализации изображен на Рис. 1.3 (b). Как видим, структура волновой функции в направлении ϕ_2 предполагает основное состояние нового дополнительного осциллятора.

Для полноты картины требуется также определить, какая структура колебаний будет у классической модели с дополнительным конденсатором. При добавлении новой степени свободы для нахождения нормальных мод колебаний потребуется решить вековое уравнение:

$$\det(\Pi - \lambda T) = 0, \quad (1.1.55)$$

где T – квадратичная форма потенциальной энергии, а Π – квадратичная форма кинетической энергии системы. Лагранжиан с учётом добавленной емкости:

$$\mathcal{L}_{LL||C+C} = \frac{C_r \dot{\phi}_1^2}{2} + \frac{C \dot{\phi}_2^2}{2} - \frac{(\phi_2 - \phi_1)^2}{2L_r^{(1)}} - \frac{\phi_2^2}{2L_r^{(2)}}. \quad (1.1.56)$$

Используя модифицированный лагранжиан, получаем следующие выражения:

$$\Pi = \begin{pmatrix} \frac{1}{L_r^{(1)}} & -\frac{1}{L_r^{(1)}} \\ -\frac{1}{L_r^{(1)}} & \frac{L_r^{(1)} + L_r^{(2)}}{L_r^{(1)} L_r^{(2)}} \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} C_r & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix}. \quad (1.1.57)$$

Разложение в ряд Тейлора решений векового уравнения вблизи $C = 0$ дает два решения:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{C_r (L_r^{(1)} + L_r^{(2)})}, \quad \frac{L_r^{(1)} + L_r^{(2)}}{C L_r^{(1)} L_r^{(2)}}. \quad (1.1.58)$$

Видно, что колебания дополнительного осциллятора в случае малой емкости его острова происходят на очень высокой частоте $\sqrt{\lambda_2}$. На языке импедансов можно сказать, что реактивное сопротивление большого конденсатора C_r в этом режиме стремится к нулю, и он может быть заменен короткой. Тогда сразу становится понятна и форма ответа для частоты колебаний побочного осциллятора: эффективная индуктивность складывается из параллельно подключенных $L_r^{(1)}$ и $L_r^{(2)}$. Таким образом, мы определили, как корректно работать с последовательно подключаемыми индуктивностями и в квантовом случае, и в классическом.

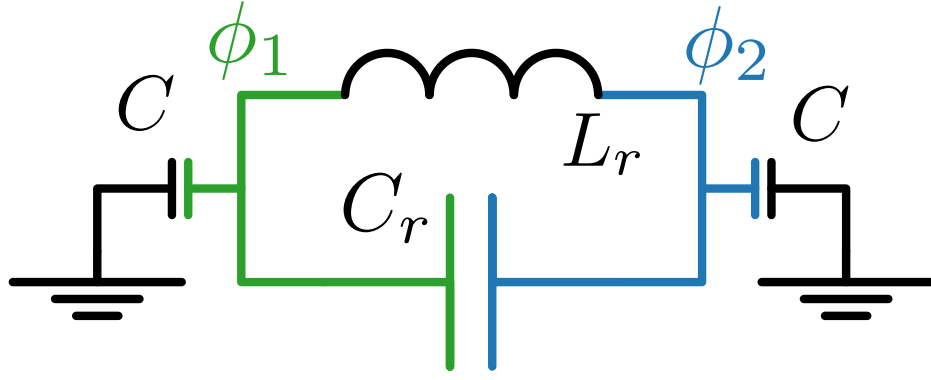


Рис. 1.4: Осциллятор, заземленный через конденсаторы малой ёмкости.

Добавление малых емкостей на землю параллельно уже существующим большим конденсаторам может привести к подобным проблемам в случае решения задач в зарядовом базисе. Рассмотрим пример такой проблемы для еще одной электрической схемы, изображенной на Рис. 1.4. Лагранжиан системы запишется как

$$\mathcal{L}_{LCg} = \frac{C\dot{\phi}_1^2}{2} + \frac{C\dot{\phi}_2^2}{2} + \frac{C_r(\dot{\phi}_1 - \dot{\phi}_2)^2}{2} - \frac{L_r(\phi_1 - \phi_2)^2}{2}. \quad (1.1.59)$$

Как видим, квадратичная форма кинетической энергии (коэффициенты её также называются матрицей ёмкостей) здесь не приведена к диагональному виду. Поэтому чтобы получить гамильтониан через преобразование Лежандра, потребуется решить систему линейных уравнений на $\phi_{1,2}$ относительно $q_{1,2}$. После этого гамильтониан запишется как

$$\mathcal{H}_{LCg} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C + C_r & -C_r \\ -C_r & C + C_r \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} q_1 & q_2 \end{pmatrix} + \frac{L_r(\phi_1 - \phi_2)^2}{2}. \quad (1.1.60)$$

Проблема здесь заключается главным образом в том, что потенциальная энергия не имеет роста по направлению $\phi_1 + \phi_2$, и волновые функции окажутся де-локализованными. Очевидно, что такая проблема не возникла бы, если бы мы изначально исключили энергии малых конденсаторов из лагранжиана и осуществили бы замену координат $\phi_1 - \phi_2 \rightarrow \phi$, уменьшив реальное число степеней свободы. Проанализируем, насколько эта ситуация сходна с предыдущей.

Для начала попробуем решить вековое уравнение, задаваемое (1.1.59). Его

решениями окажутся

$$\lambda_{1,2} = 0, \quad \frac{1}{L_r (C/2 + C_r)}. \quad (1.1.61)$$

Нулевое решение сразу говорит нам о том, что система может существовать в состоянии безразличного равновесия когда $\phi_1 = \phi_2$. Физически это означает, что потенциалы на островах равны во все моменты времени, а заряды их, соответственно, должны быть одинаковыми, но могут быть произвольными. Ненулевое решение отвечает осцилляциям, в которых малые конденсаторы складываются последовательно друг с другом, а затем параллельно с конденсатором C_r . Выражение легко понять, если вместо соединения конденсаторов C землей соединить их друг с другом, а землю вообще исключить из схемы. В целом мы видим, что классическое решение, основанное на вековом уравнении, не встречает трудностей, связанных с вырождением матрицы емкостей.

Решение уравнения Шрёдингера численно методом конечных разностей в такой постановке невозможно. Частица в заданном потенциале будет иметь непрерывный энергетический спектр, для которого, как уже обсуждалось ранее, дискретизовать задачу в принципе нельзя. Поэтому для успешного численного решения в подобных ситуациях требуется сначала провести аналитическую замену координат:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \frac{\phi_+ + \phi_-}{2}, \\ \phi_2 &= \frac{\phi_+ - \phi_-}{2}. \end{aligned} \quad (1.1.62)$$

Тогда лагранжиан запишется в виде

$$\mathcal{L}_{LCg} = \frac{(C_r + C/2)\dot{\phi}_-^2}{2} + \frac{C\dot{\phi}_+^2}{4} - \frac{L_r\phi_-^2}{2}. \quad (1.1.63)$$

Фактически, был произведен переход к нормальным координатам, и уравнения на степени свободы разделились. Нахождение обратной матрицы емкости теперь не представляет трудности, и гамильтониан запишется как

$$\mathcal{H}_{LCg} = \frac{q_-^2}{2(C_r + C/2)} + \frac{q_+^2}{C} + \frac{L_r\phi_-^2}{2}. \quad (1.1.64)$$

Переходя к операторному виду, будем искать решения уравнения Шрёдингера в виде $\psi(\phi_+, \phi_-) = \psi_+(\phi_+)\psi_-(\phi_-)$, а общую энергию в виде $E = E_1 + E_2$. После

разделения переменных по методу Фурье, получим два уравнения

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{C} \frac{\partial^2}{\partial \phi_+^2} \psi_+ - E_1 \psi_+ &= -\lambda \psi_+, \\ -\frac{\hbar^2}{2(C_r + C/2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi_-^2} \psi_- + \frac{L_r \phi_+^2}{2} \psi_- - E_2 \psi_- &= \lambda \psi_-. \end{aligned} \quad (1.1.65)$$

Обозначая собственные энергии как $E^+ = E_1 - \lambda$, $E_n^- = E_2 + \lambda$, получим для исходных энергий $E = E^+ + E_n^-$. Первое уравнение решается аналитически и дает непрерывный спектр, второе же воспроизводит задачу для одномерного гармонического осциллятора с эффективной емкостью $C_r + C/2$. Таким образом, после замены разделения переменных решение задачи численно становится возможным.

В заключение, обозначим дуализм между двумя проблемными случаями, описанными выше. В первом случае дополнительная степень свободы не давала вклад в кинетическую энергию системы, а во втором случае – в потенциальную. С учетом того, что роль кинетической и потенциальной энергии выбирается при выборе обобщенных координаты и импульса, разницы между двумя этими ситуациями на самом деле нет. В обоих случаях проблемы с численным решением были вызваны непрерывностью спектра системы. Однако в первом случае, в отличие от второго, нельзя разделить переменные в уравнения Шрёдингера и получить аналитическое решение для степени свободы с непрерывным спектром. Поэтому для успешного численного решения необходимо ввести дополнительный элемент, локализуя заряд на острове. Точно также можно было бы ввести большие по величине индуктивности во втором примере параллельно с малыми конденсаторами для локализации узлового потока.

1.2 Сверхпроводимость

2 Экспериментальные методы

3 Взаимодействие двухатомной искусственной молекулы и излучения

4 Квантовый фотонный транспорт в модели Бозе-Хаббарда

5 Заключение

Список литературы

- [1] Nakamura Y, Chen CD, Tsai Jaw Shen. Spectroscopy of energy-level splitting between two macroscopic quantum states of charge coherently superposed by Josephson coupling // Physical review letters. — 1997. — Vol. 79, no. 12. — P. 2328. (referenced on p. [2])
- [2] Nakamura Yu, Pashkin Yu A, Tsai Jaw Shen. Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box // nature. — 1999. — Vol. 398, no. 6730. — P. 786–788. (referenced on p. [2])
- [3] Superconducting qubits: Current state of play / Morten Kjaergaard, Mollie E Schwartz, Jochen Braumüller et al. // Annual Review of Condensed Matter Physics. — 2020. — Vol. 11. — P. 369–395. (referenced on p. [2 and 3])
- [4] Quantum supremacy using a programmable superconducting processor / Frank Arute, Kunal Arya, Ryan Babbush et al. // Nature. — 2019. — Vol. 574, no. 7779. — P. 505–510. (referenced on p. [2 and 3])
- [5] Shor Peter W. Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory // Physical review A. — 1995. — Vol. 52, no. 4. — P. R2493. (referenced on p. [2])
- [6] Engineering cryogenic setups for 100-qubit scale superconducting circuit systems / Sebastian Krinner, Simon Storz, Philipp Kurpiers et al. // EPJ Quantum Technology. — 2019. — Vol. 6, no. 1. — P. 2. (referenced on p. [3])
- [7] Physical qubit calibration on a directed acyclic graph / Julian Kelly, Peter O'Malley, Matthew Neeley et al. // arXiv preprint arXiv:1803.03226. — 2018. (referenced on p. [3])
- [8] Tunable superconducting qubits with flux-independent coherence /

- MD Hutchings, Jared B Hertzberg, Yebin Liu et al. // Physical Review Applied. — 2017. — Vol. 8, no. 4. — P. 044003. (referenced on p. [3])
- [9] Blais Alexandre, Girvin Steven M, Oliver William D. Quantum information processing and quantum optics with circuit quantum electrodynamics // Nature Physics. — 2020. — P. 1–10. (referenced on p. [3])
- [10] Haroche Serge. Nobel Lecture: Controlling photons in a box and exploring the quantum to classical boundary // Reviews of Modern Physics. — 2013. — Vol. 85, no. 3. — P. 1083. (referenced on p. [3])
- [11] Strong coupling of a single photon to a superconducting qubit using circuit quantum electrodynamics / Andreas Wallraff, David I Schuster, Alexandre Blais et al. // Nature. — 2004. — Vol. 431, no. 7005. — P. 162–167. (referenced on p. [3])
- [12] Deterministically encoding quantum information using 100-photon Schrödinger cat states / Brian Vlastakis, Gerhard Kirchmair, Zaki Leghtas et al. // Science. — 2013. — Vol. 342, no. 6158. — P. 607–610. (referenced on p. [3])
- [13] Dynamically protected cat-qubits: a new paradigm for universal quantum computation / Mazyar Mirrahimi, Zaki Leghtas, Victor V Albert et al. // New Journal of Physics. — 2014. — Vol. 16, no. 4. — P. 045014. (referenced on p. [3])
- [14] Demonstration of quantum volume 64 on a superconducting quantum computing system / Petar Jurcevic, Ali Javadi-Abhari, Lev S Bishop et al. // arXiv preprint arXiv:2008.08571. — 2020. (referenced on p. [3])
- [15] Demonstration of universal parametric entangling gates on a multi-qubit lattice / Matthew Reagor, Christopher B Osborn, Nikolas Tezak et al. // Science advances. — 2018. — Vol. 4, no. 2. — P. eaao3603. (referenced on p. [3])
- [16] Emulating weak localization using a solid-state quantum circuit / Yu Chen, P Roushan, D Sank et al. // Nature communications. — 2014. — Vol. 5, no. 1. — P. 1–6. (referenced on p. [3])
- [17] Spectroscopic signatures of localization with interacting photons in superconducting qubits / Pedram Roushan, C Neill, J Tangpanitanon et al. // Science. — 2017. — Vol. 358, no. 6367. — P. 1175–1179. (referenced on p. [3])

- [18] Quantum dynamics of simultaneously measured non-commuting observables / Shay Hacoheh-Gourgy, Leigh S Martin, Emmanuel Flurin et al. // Nature. — 2016. — Vol. 538, no. 7626. — P. 491–494. (referenced on p. [3])
- [19] Resonance fluorescence of a single artificial atom / O Astafiev, Alexandre M Zagoskin, AA Abdumalikov et al. // Science. — 2010. — Vol. 327, no. 5967. — P. 840–843. (referenced on p. [4])
- [20] Experimentally simulating the dynamics of quantum light and matter at deep-strong coupling / NK Langford, R Sagastizabal, M Kounalakis et al. // Nature communications. — 2017. — Vol. 8, no. 1. — P. 1–10. (referenced on p. [4])
- [21] Realizing a Deterministic Source of Multipartite-Entangled Photonic Qubits / Jean-Claude Besse, Kevin Reuer, Michele C Collodo et al. // arXiv preprint arXiv:2005.07060. — 2020. (referenced on p. [4])
- [22] Deterministic quantum state transfer and remote entanglement using microwave photons / Philipp Kurpiers, Paul Magnard, Theo Walter et al. // Nature. — 2018. — Vol. 558, no. 7709. — P. 264–267. (referenced on p. [4])
- [23] Feynman Richard P. Simulating physics with computers // Int. J. Theor. Phys. — 1982. — Vol. 21, no. 6/7. (referenced on p. [4])
- [24] Phase transitions in a programmable quantum spin glass simulator / R Harris, Y Sato, AJ Berkley et al. // Science. — 2018. — Vol. 361, no. 6398. — P. 162–165. (referenced on p. [4])
- [25] Probing the many-body localization phase transition with superconducting circuits / Tuure Orell, Alexios A. Michailidis, Maksym Serbyn, Matti Silveri // Physical Review B. — 2019. — Vol. 100, no. 13. — P. 1–19. — 1907.04043. (referenced on p. [4])
- [26] A dissipatively stabilized Mott insulator of photons / Ruichao Ma, Brendan Saxberg, Clai Owens et al. // Nature. — 2019. — Vol. 566, no. 7742. — P. 51–57. — 1807.11342. (referenced on p. [4])
- [27] Cooling and Autonomous Feedback in a Bose-Hubbard Chain with Attractive Interactions / S. Hacoheh-Gourgy, V. V. Ramasesh, C. De Grandi et al. //

- Physical Review Letters. — 2015. — Vol. 115, no. 24. — P. 1–5. — 1506.05837. (referenced on p. [4])
- [28] Deng Xiu Hao, Lai Chen Yen, Chien Chih Chun. Superconducting circuit simulator of Bose-Hubbard model with a flat band // Physical Review B. — 2016. — Vol. 93, no. 5. — P. 1–12. — 1602.01559. (referenced on p. [4])
- [29] Propagation and Localization of Collective Excitations on a 24-Qubit Superconducting Processor / Yangsen Ye, Zi Yong Ge, Yulin Wu et al. // Physical Review Letters. — 2019. — Vol. 123, no. 5. — P. 1–6. (referenced on p. [4])
- [30] Strongly correlated quantum walks with a 12-qubit superconducting processor / Zhiguang Yan, Yu Ran Zhang, Ming Gong et al. // Science. — 2019. — Vol. 756, no. May. — P. 753–756. (referenced on p. [4])
- [31] Шмутцер Э. Основные принципы классической механики и классической теории поля:(Канонический аппарат). — Мир, 1976. (referenced on p. [13 and 19])
- [32] Wintgen Dieter, Richter Klaus, Tanner Gregor. The semiclassical helium atom // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. — 1992. — Vol. 2, no. 1. — P. 19–33. (referenced on p. [15])
- [33] Van Der Waerden Bartel Leendert. Sources of quantum mechanics. — Courier Corporation, 2007. (referenced on p. [15])
- [34] Schrödinger Erwin. Collected papers on wave mechanics. — American Mathematical Soc., 2003. — Vol. 302. (referenced on p. [18 and 19])
- [35] Hilbert David, Courant Richard. Methods of mathematical physics, Vol. 1. — Wiley, 1966. (referenced on p. [19 and 20])
- [36] Schrödinger Erwin. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules // Physical review. — 1926. — Vol. 28, no. 6. — P. 1049. (referenced on p. [21])
- [37] Nonlinear normal modes, Part I: A useful framework for the structural dynamicist / Gaëtan Kerschen, Maxime Peeters, Jean-Claude Golinval,

- Alexander F Vakakis // Mechanical systems and signal processing. — 2009. — Vol. 23, no. 1. — P. 170–194. (referenced on p. [22])
- [38] Dirac Paul Adrien Maurice. On the theory of quantum mechanics // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. — 1926. — Vol. 112, no. 762. — P. 661–677. (referenced on p. [23])
- [39] Von Neumann John. Mathematical foundations of quantum mechanics: New edition. — Princeton university press, 2018. (referenced on p. [23])
- [40] Casimir forces on a silicon micromechanical chip / Jianping Zou, Zsolt Marcet, Alejandro W Rodriguez et al. // Nature communications. — 2013. — Vol. 4, no. 1. — P. 1–6. (referenced on p. [26])
- [41] Adler Ronald J, Casey Brendan, Jacob Ovid C. Vacuum catastrophe: An elementary exposition of the cosmological constant problem // American Journal of Physics. — 1995. — Vol. 63, no. 7. — P. 620–626. (referenced on p. [26])
- [42] Devoret Michel H et al. Quantum fluctuations in electrical circuits // Les Houches, Session LXIII. — 1995. — Vol. 7, no. 8. (referenced on p. [26 and 27])
- [43] Charge-insensitive qubit design derived from the Cooper pair box / Jens Koch, M Yu Terri, Jay Gambetta et al. // Physical Review A. — 2007. — Vol. 76, no. 4. — P. 042319. (referenced on p. [28])