

Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского
Национальный исследовательский университет
Учебно-научный и инновационный комплекс
"Новые многофункциональные материалы и нанотехнологии"

А.М.Сатанин, С.М. Кашин, А.И. Гельман

Вычислительная физика на суперкомпьютерах

(Учебно-методический комплекс по вычислительной физике на суперкомпьютерах)

Мероприятие 2.2. Развитие сетевой интеграции с ведущими университетами страны, научно-исследовательскими институтами Российской академии наук, предприятиями-партнерами, создание новых форм взаимодействия

Учебные дисциплины: «Информатика», «Численные методы», Специальности, направления: «Физика», «Нанотехнология», «Нанотехнология в электронике», «Микроэлектроника и полупроводниковые приборы», «Электроника и наноэлектроника», Физика наноструктур», «Численные методы моделирования физических процессов на суперкомпьютерах»

Оглавление

I. Лекция: «Применение суперкомпьютеров для моделирования физических процессов»

1. Компьютеры в физике
2. Моделирование
3. Суперкомпьютеры
4. Методы параллельного программирования. CUDA
5. Некоторые проекты
6. Новые классы задач и перспективы

II. Курс лекций: «Моделирование наноструктур»

Часть 1: Наноструктуры

Нанотехнология

Наноструктуры

Резонансы в наноструктурах

Квантовые точки

Часть 2: Объемные полупроводники

Характеристики объемных полупроводниковых материалов

Зонный спектр типичных полупроводников

Метод эффективной массы

Метод Кона-Латтинжера

Гамильтониан Диммока

Часть 3: Многоэлектронные эффекты в нанструктурах

Методы Томаса-Ферми и Хартри-Фока

Теорема Кона-Хоэнберга

Метод Кона-Шэма

Почему метод эффективен?

Примеры

Квантовые точки. Новые проблемы

Обмен и корреляции

Молекулярная динамика (Car-Parrinello)

Пакет SIESTA

III. Пособия: «Применение технологий параллельного программирования для решения задач квантовой механики» и «Параллельные вычисления и современные технологии параллельного программирования: OpenMP»

Параллельные вычисления

Классификация вычислительных систем

Интерфейс OpenMP программирования SMP-систем

Основные директивы и функции OpenMP

IV. Курс лекций: «Квантовая информация. Применение суперкомпьютерных технологий для расчета квантовых приборов»

1. Квантовые компьютеры. Современное состояние и перспективы
2. Квантовый метод Монте-Карло
3. Численное моделирование квантовой релаксации в атомных системах методом Монте-Карло
4. Диссипативная динамика сверхпроводящего кубита
5. Описание программного комплекса. Библиотека MPI



Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Суперкомпьютерные методы в физике

А.М.Сатанин

*ННГУ им. Н.И.Лобачевского (Национальный
исследовательский университет),
Лаборатория «Теория наноструктур» НИФТИ, Н.Новгород,
Россия*

План

Компьютеры в физике

Моделирование

Суперкомпьютеры

Методы параллельного программирования

Некоторые проекты

Новые классы задач и перспективы

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

ФИЗИКА И ЭВМ

КОМПЬЮТЕРЫ В ФИЗИКЕ: ОБЩИЙ ОБЗОР

Д. Р. Хаманн

Physics Today - May 1983

Computers in physics: an overview

[Donald R. Hamann](#)

Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey

Две школы в вопросе использования ЭВМ:

- 1) Численного анализа. Физическая модель -> численный анализ.
Цель – получение количественных результатов, согласие с экспериментом;
- 2) Имитации (simulation). Численный эксперимент из первых принципов.

Производительность ЭВМ «Крэй-1» оценивается в 150 млн опер/с, т. е. примерно в 150 раз больше ЭВМ «БЭСМ-6»

Примеры подходов первой школы:

1. Решение Мак-Милланом уравнений БКШ
2. Модель Изинга. Теория РГ (Вильсон)
3. Электронная структура поверхности металлов и полупроводников методом псевдопотенциала (Хаманн)

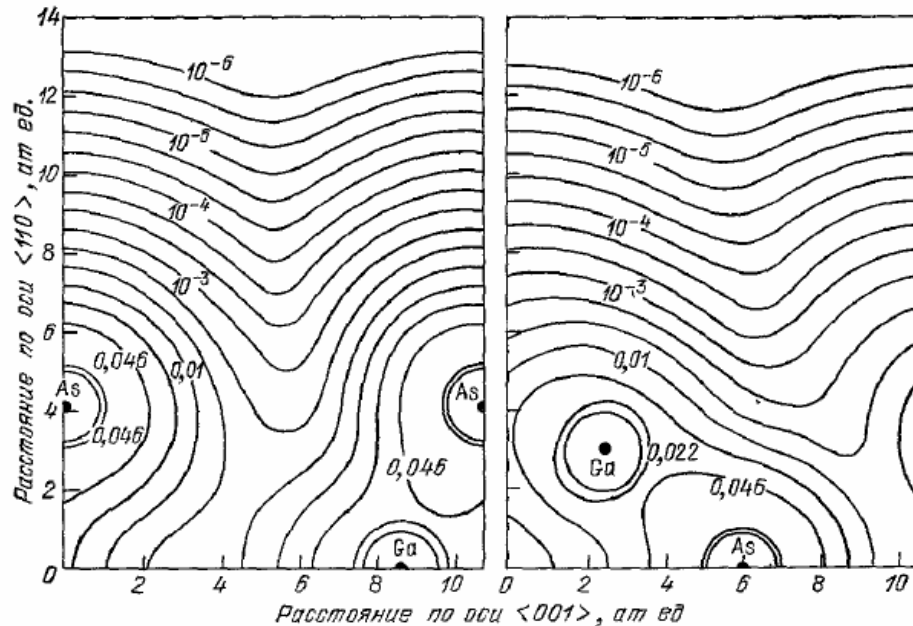


Рис. 2. Плотность заряда на поверхности арсенида галлия в двух плоскостях ⁶.
Изображены логарифмические линии равной электронной плотности, по три на каждый порядок, в отношении 1 : 2,2 : 4,6. Плотность заряда в электронах/ат. ед. ³. Классическая точка поворота атома галлия с энергией 20 МэВ соответствует контуру 10^{-4} . Эксперименты по дифракции атомов подтверждают форму этого контура.

Пример имитации

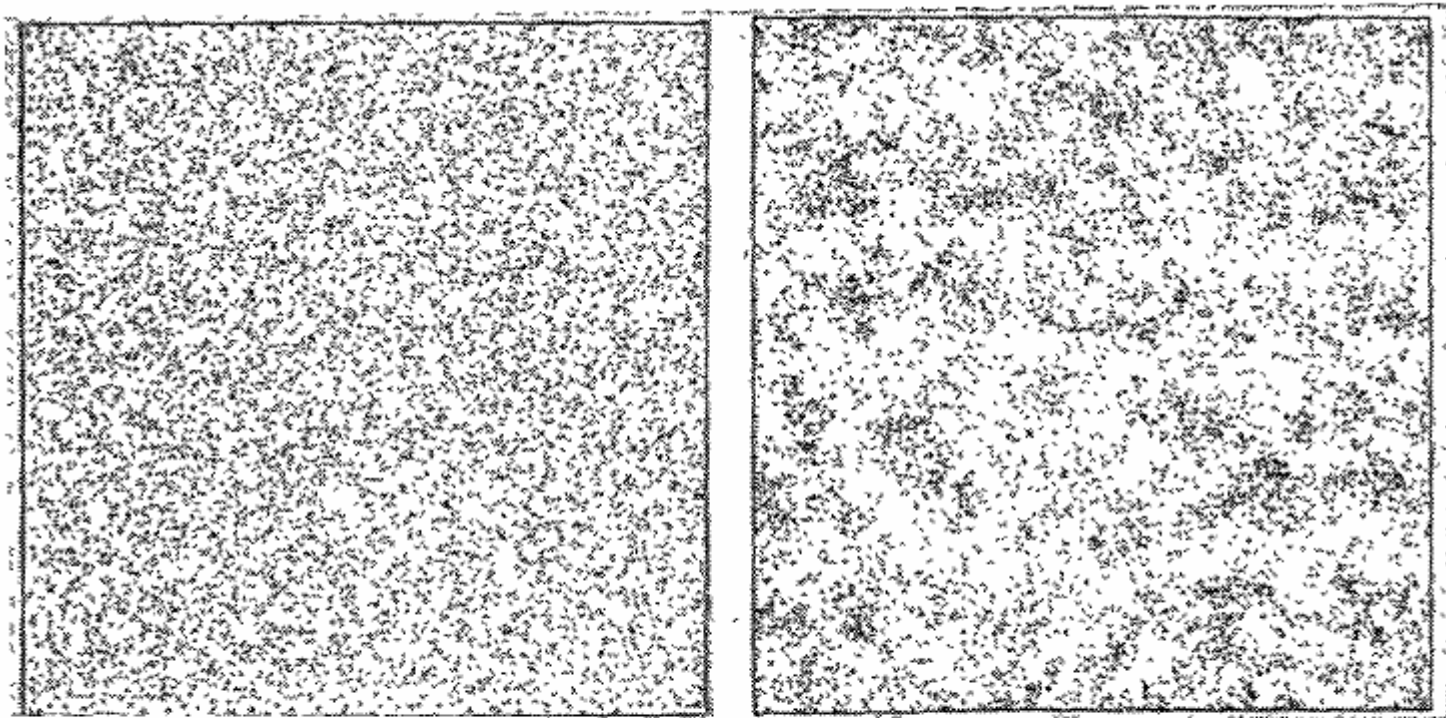
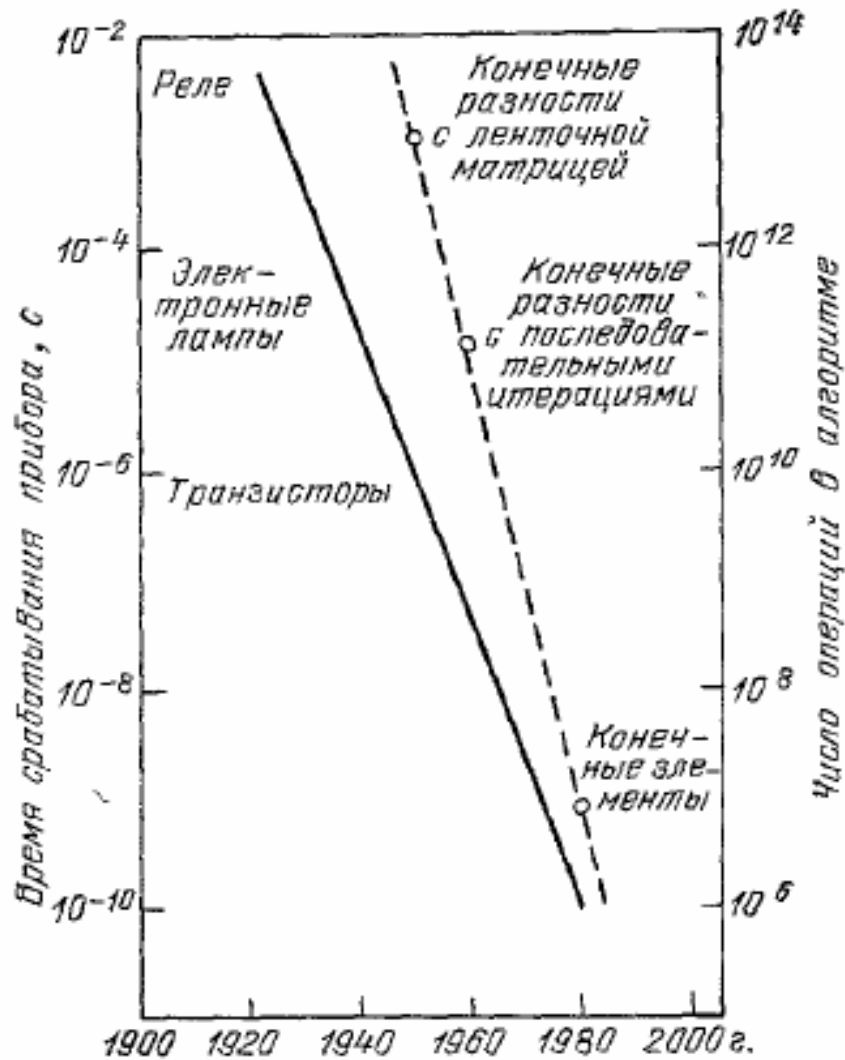


Рис. 6. Кластеризация галактики¹⁵.

Показаны результаты имитации эволюции хаотического распределения 10 000 галактик (слева) и распределению, характеризующемуся образованием заметных кластеров справа. Это — двумерная проекция реальной трехмерной модели. Плотность масс бралась минимально возможной в закрытой Вселенной согласно общей теории относительности. Релятивистское увеличение масштаба длин за время эволюции было равно 7,1.

Эволюция вычислительной техники и математического обеспечения



Некоторые физические проблемы

- Молекулярная динамика
- Статистическая физика
- Квантовая механика многочастичных систем
- Кубиты

Численный эксперимент



Этапы численного эксперимента

Выбор алгоритмов решения физических задач

- Скорость выполнения матричных операций зависит от размерности матриц. Алгоритм решения можно считать эффективным, если он требует минимального числа операций. Будем иметь в виду одномерные задачи. Пусть размер матрицы равен N .
- Например, в случае задачи рассеяния размер матрицы во внутренней области определяется числом узлов сетки. При этом метод решения задачи рассеяния требует выполнения операций $\sim N$, т.е. данный метод является быстрым.
- В случае задачи на собственные значения мы имеем дело с матрицей, представляющей гамильтониан на дискретном числе узлов. Методы диагонализации заполненной матрицы требуют выполнения операций N^3 . Такие методы являются медленными.

В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

уменьшение числа экспериментов
при **дизайне** и **оптимизации**
новых материалов



Молекулярная динамика

Численное решение системы классических уравнений движения:

$$m_i \frac{d\vec{v}_i(t)}{dt} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N),$$

$$\frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} = \vec{v}_i(t),$$

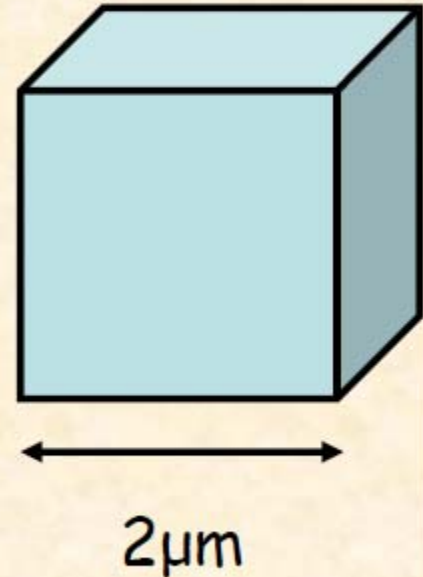
$$\vec{r}_i(t=0) = \vec{r}_i^0, \quad \vec{v}_i(t=0) = \vec{v}_i^0 \quad i = 1, \dots, N$$

Свойства системы определяются выбором потенциала взаимодействия:

$$\vec{F}_i = - \frac{\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i}$$

Рост числа частиц в МД

1964	1.000	Rahman
1984	200.000	Abraham
1990	1.000.000	Swope, Anderson
1994	100.000.000	Beazley, Lomdahl
1997	1.213.857.792	Stadler
1997	1.399.440.000	Müller
1999	5.180.116.000	Roth
2000	8.500.000.000	Vashishta
2003	19.000.416.964	Kadau, Germann, Lomdahl
2005	160.000.000.000	Kadau, Germann, Lomdahl
2006	320.000.000.000	Kadau, Germann, Lomdahl
2008	1.000.000.000.000	Kadau, Germann

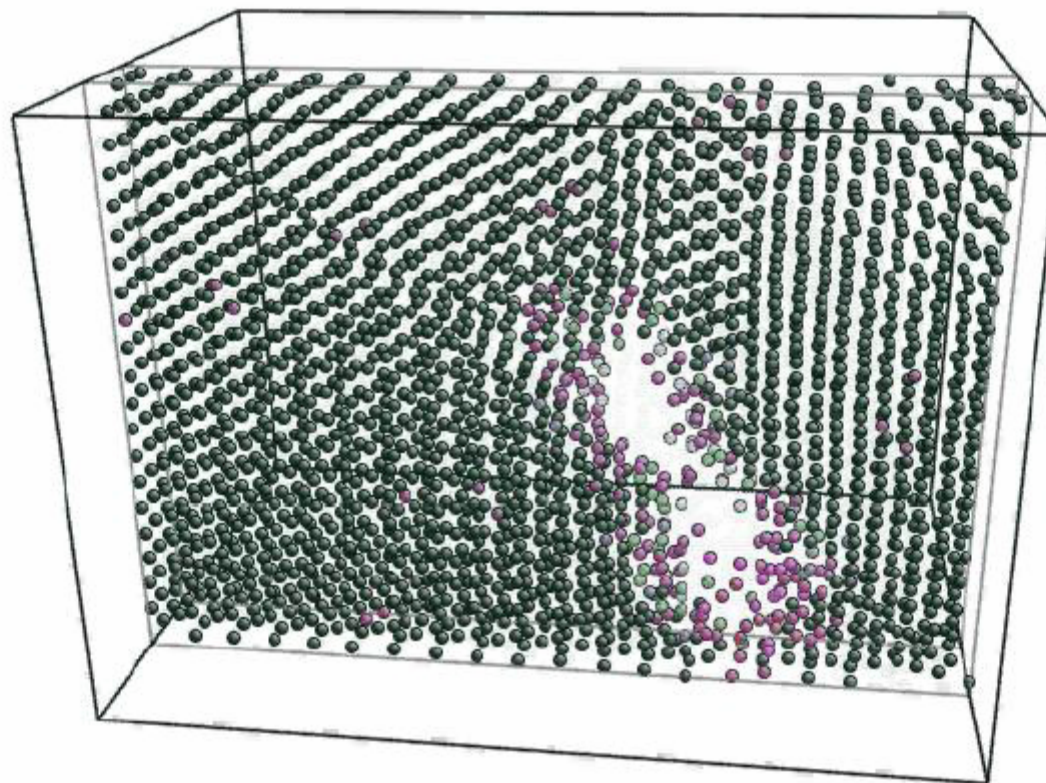


Структурные превращения решетки Fe при высокоскоростном одноосном растяжении

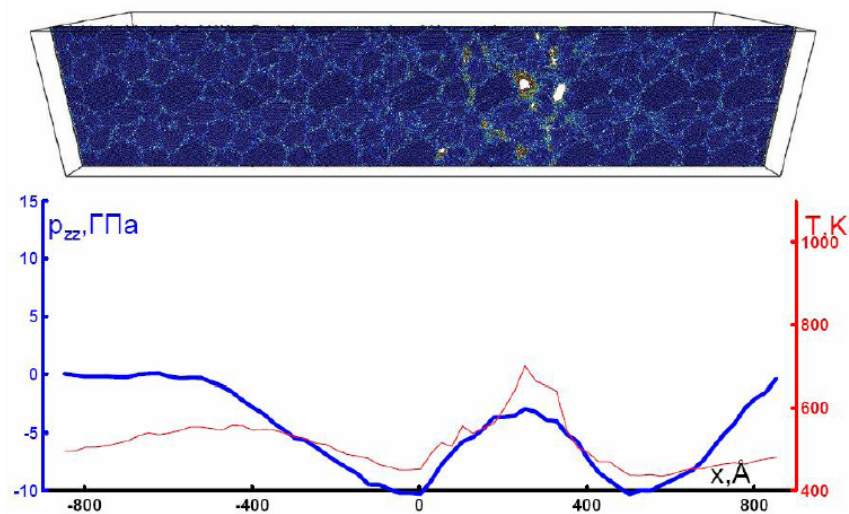
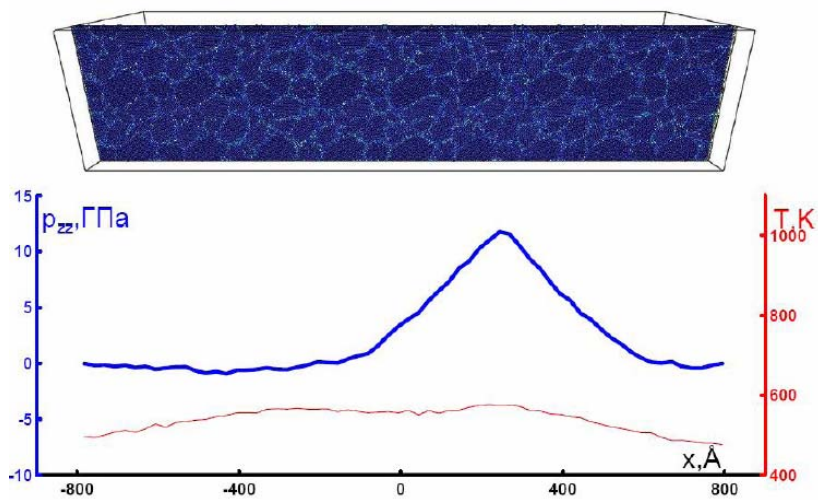
$$\frac{1}{V_0} \frac{dV}{dt} = 1.38 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$$

$N=16000$

$T=300\text{K}$



Модель откола с 17 миллионами атомов Si

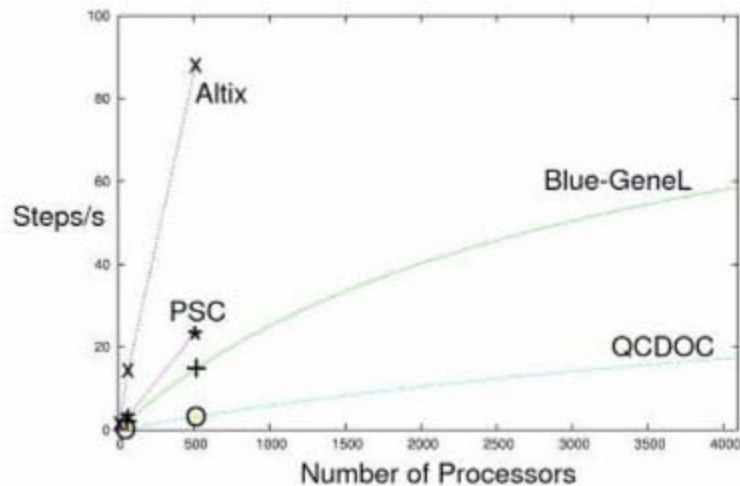


Программа моделирования:
LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov>)

Модель Изинга

$$-\frac{H}{k_B T} = \sum_{[i,j]} K s_i s_j + h \sum_i s_i,$$

16,777,216 atomic grid points



Bennett, R. and McGuigan, M. Parallel Heisenberg spin model performance on supercomputer architectures. ACM 2006 Symposium on Principles and Practice of Parallel Programming, Sept 2005, submitted.

Многоэлектронные системы

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1} \nabla_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{M_\alpha} \nabla_\alpha^2 - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \Psi = E\Psi$$

Метод Хартри-Фока

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det|\mathbf{A}|$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \psi_1(\rho_1) & \psi_1(\rho_2) & \dots & \psi_1(\rho_N) \\ \psi_2(\rho_1) & \psi_2(\rho_2) & \dots & \psi_2(\rho_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_N(\rho_1) & \psi_N(\rho_2) & \dots & \psi_N(\rho_N) \end{pmatrix}$$

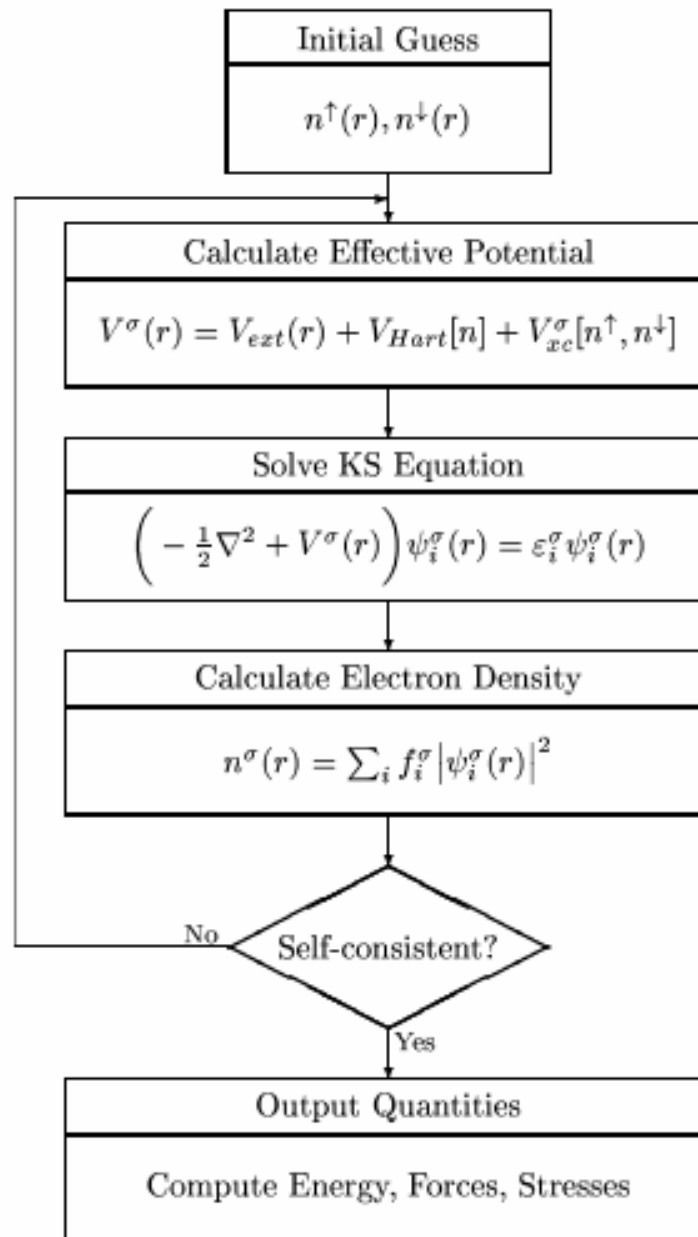
$$T = -\frac{1}{2} \sum_{\lambda s} \int \psi_\lambda^*(\mathbf{r}, s) \nabla^2 \psi_\lambda(\mathbf{r}, s) d\mathbf{r},$$

$$V_{\text{ext}} = \int n(\mathbf{r}) H^{e-n} d\mathbf{r},$$

$$V_c = \frac{1}{2} \int \frac{n(\mathbf{r}_1) n(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

$$V_x = -\frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} \sum_{s_1 s_2} \int \frac{\psi_\lambda^*(\mathbf{r}_1, s_1) \psi_\mu^*(\mathbf{r}_2, s_2) \psi_\mu(\mathbf{r}_1, s_1) \psi_\lambda(\mathbf{r}_2, s_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

Self-Consistent Kohn-Sham Equations



xc -potential

$$\epsilon_{xc}^l(r_s) = \epsilon_x^l(r_s) + \epsilon_c^l(r_s), \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

$$\epsilon_x^l(r_s) = \frac{-a^l}{r_s}$$

$$\epsilon_c^l(r_s) = \begin{cases} \frac{y^l}{1 + \alpha^l \sqrt{r_s} + \beta^l} & r_s > 1 \\ A^l + B^l \ln r_s + C^l r_s + D^l r_s \ln r_s & r_s \leq 1 \end{cases}$$

Here $l = p$ or np , and values for $a^l, \alpha^l, \beta^l, A^l, B^l, C^l$, and D^l can be found in [8]. Referring to the last section the single particle potential can be expressed,

$$\mathbf{v}_s^{xc} = \epsilon_{xc}^l - \frac{r_s}{3} \frac{\partial \epsilon_{xc}^l}{\partial r_s}$$

Quantum Molecular Dynamics

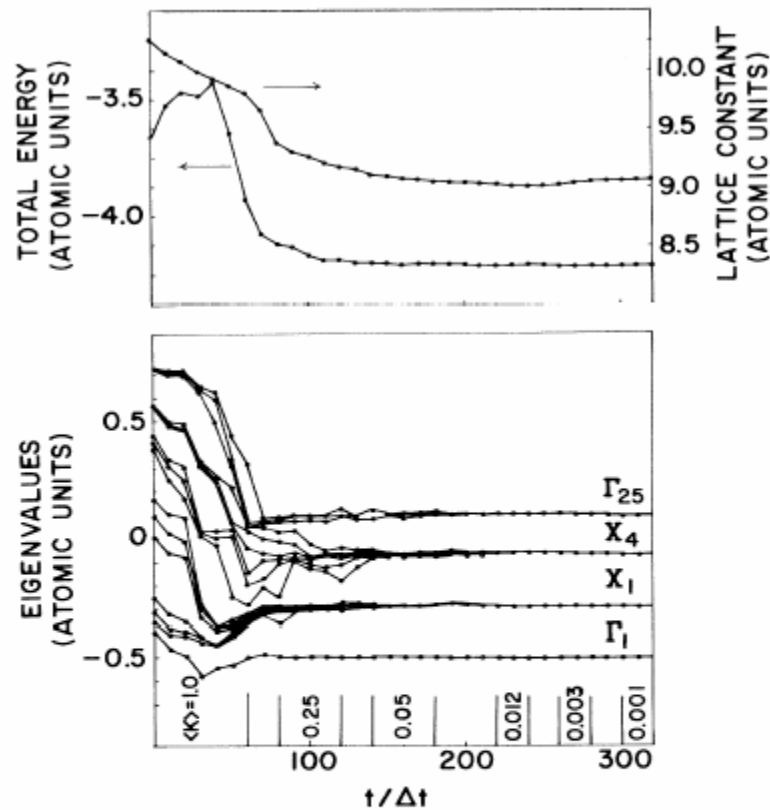


FIG. 1. Evolution of total energy per atom, lattice constant, and eigenvalues of the Λ matrix, during a typical dynamical annealing run. The partial averages of the classical kinetic energy K during each subsection of the run are indicated in the lower part of the picture. For $K \rightarrow 0$ the eigenvalues of the Λ matrix tend to the KS eigenvalues. The various multiplets are labeled according to the symmetry of the diamond lattice.

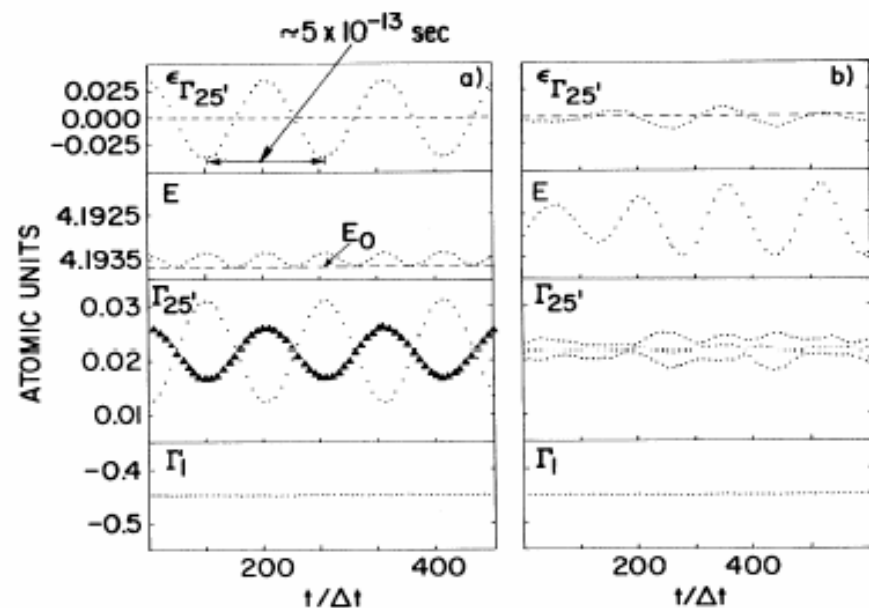
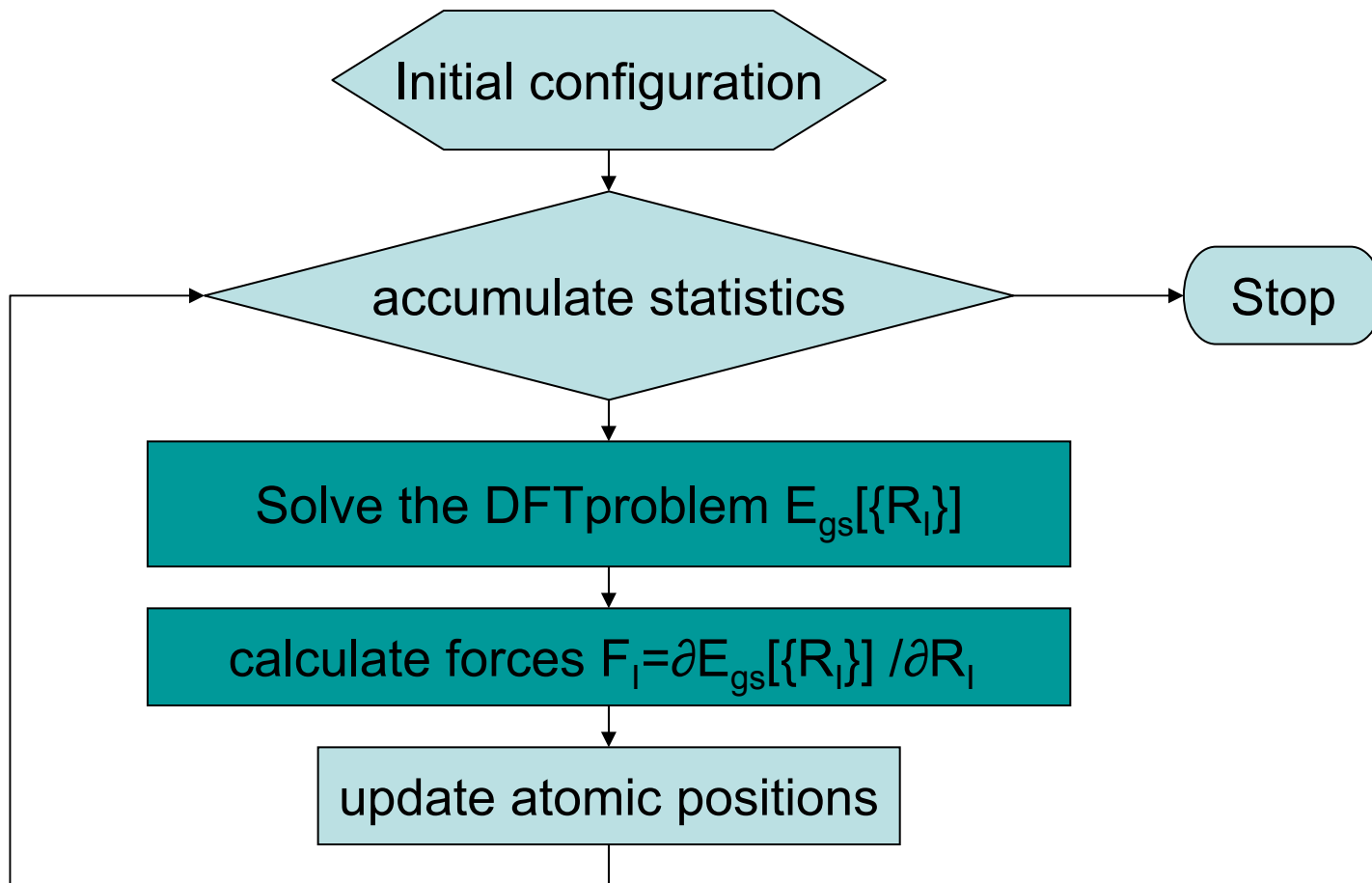


FIG. 2. From top to bottom, temporal evolution of average atomic displacement along $\epsilon_{\Gamma_{25}'}$, potential energy per atom, and Γ_{25}' and Γ_1 multiplets for two different MD runs. The lattice constant was taken to be equal to the experimental value of 10.26 a.u.; Δt and μ were taken to be 10 and 300 a.u., respectively. The dashed line in the second panel from the top indicates the $T=0$ ground-state energy. The triangles indicate a doubly degenerate level.

Born-Oppenheimer Molecular Dynamics



Self-Healing of CdSe Nanocrystals: First-Principles Calculations

Aaron Puzder,* A. J. Williamson,† François Gygi, and Giulia Galli
Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California 94550, USA
(Received 8 September 2003; published 25 May 2004)

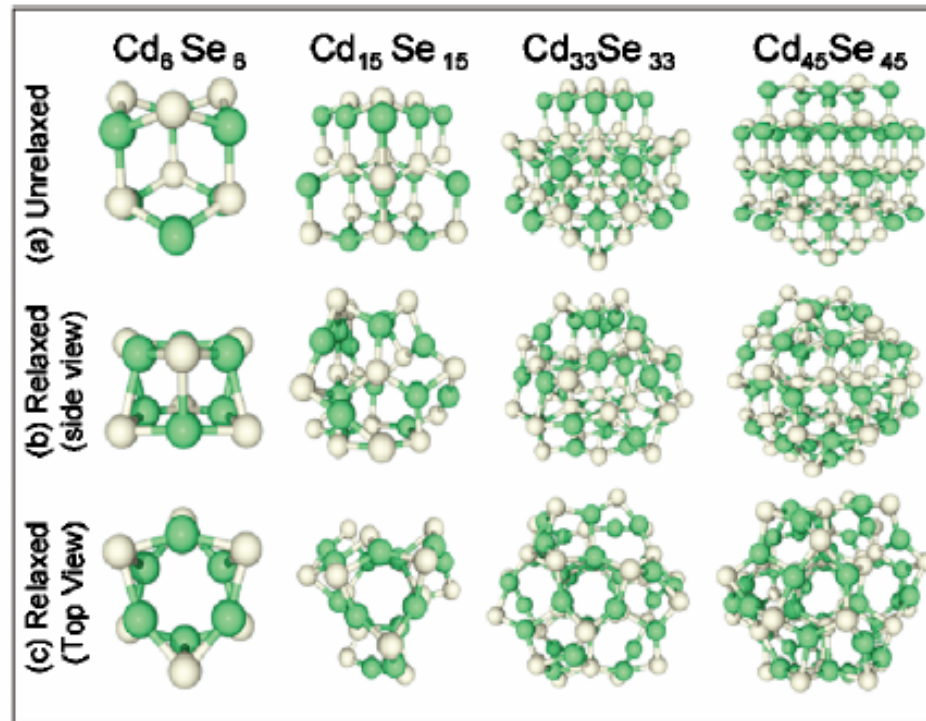
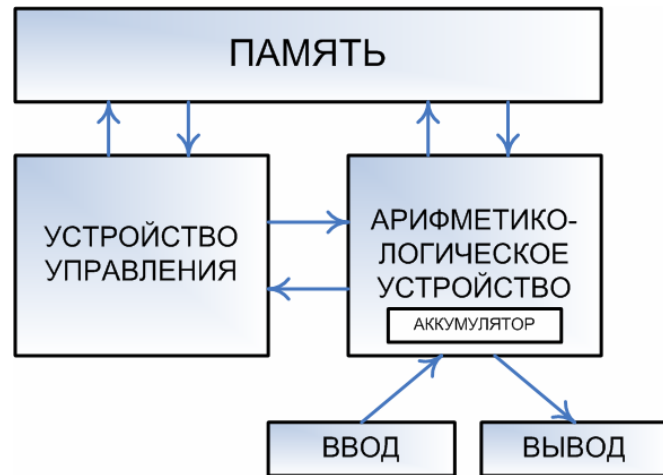


FIG. 1 (color). Unrelaxed (a) and relaxed (b),(c) wurtzite structures of Cd_xSe_x , $x = 6, 15, 33,$ and 45 . The Cd is green and the Se is yellow in the ball and stick models. The side (top) view is parallel (along) the c axis.

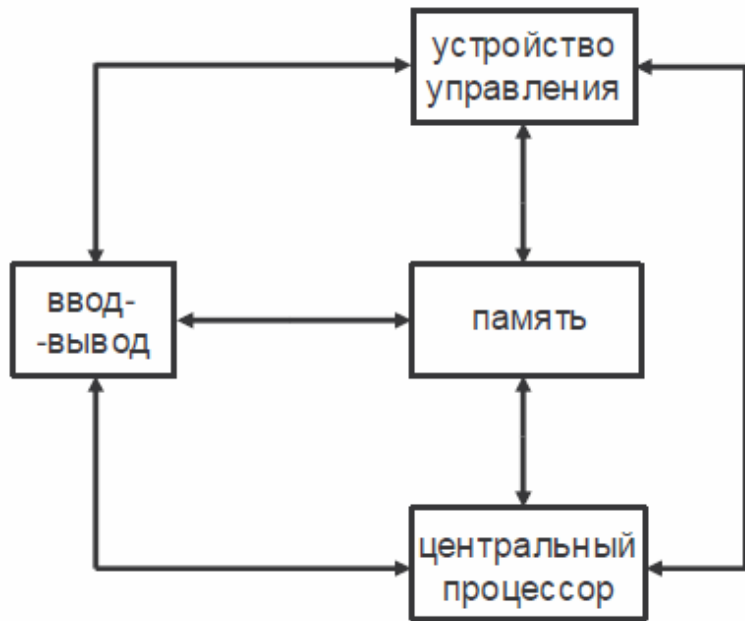
Методы параллельного программирования

- 1) компьютеры
- 2) машина фон Неймана
- 2) кластеры и **str**-машины
- 3) **GPU (NVIDIA)**
- 3) средства программирования: **MPI, OpenMP, CUDA**

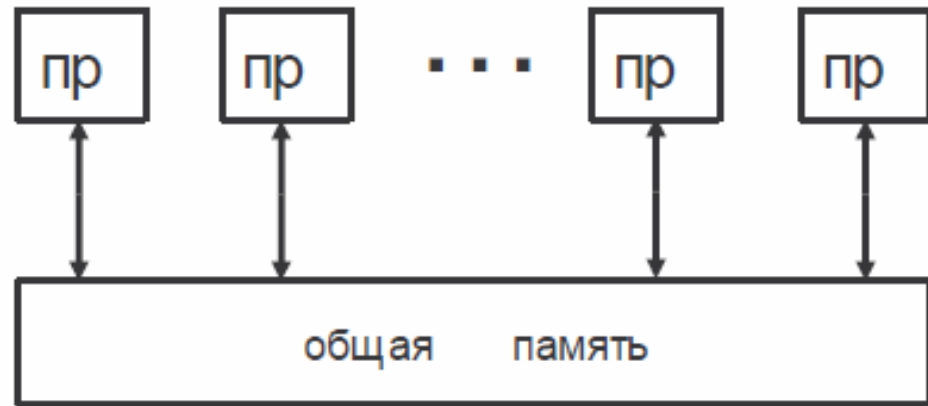
Классическая машина фон Неймана



Параллельные системы



Абстрактная модель последовательного компьютера



Абстрактная модель параллельной системы

Чтобы найти *пиковую производительность* ЭВМ **R**, терафлопс, нужно [тактовую частоту](#) **F**, МГц, умножить на число процессоров (процессорных ядер) **n**, домножить на количество инструкций с плавающей запятой на такт (4 для процессоров [Core2](#) — 2 операции [Float Multiple Add](#)) и поделить на 1000000:

$$F \times n \times 4 \times 10^{-6} = R$$

Структура программ. Кэш

CRAY Y-MP C90 , Пиковая производительность 960 Mflop/s.

FORTRAN

```
DO k = 1, 1000
  DO j = 1, 40
    DO i = 1, 40
      A(i,j,k) = A(i-1,j,k)+B(j,k)+B(j,k)
    END DO
  END DO
END DO
```

Реально 20 Mflop/s.

```
DO i = 1, 40, 2
  DO j = 1, 40
    DO k = 1, 1000
      A(i,j,k) = A(i-1,j,k)+2*B(j,k)
      A(i+1,j,k) = A(i,j,k)+2*B(j,k),
    END DO
  END DO
END DO
```

700 Mflop/s !!!

Пример эффективного использования кэш

Законы Амдала

- 1-й закон Амдала. Производительность вычислительной системы, состоящей из связанных между собой устройств, в общем случае определяется самым непроизводительным ее устройством
- 2-й закон Амдала. Пусть система состоит из s - одинаковых простых универсальных устройств и пусть все s полностью загружены. Тогда максимально возможное ускорение равно

- где
$$R = \frac{s}{\beta s + (1 - \beta)} \quad \beta = n/N$$

- n – число последовательных операций, N – общее число операций.
- 3-й закон Амдала. Пусть система состоит из одинаковых простых устройств. Тогда ее ускорение не может превзойти обратной величины доли последовательных вычислений.

Джин Амдал был главным конструктором и разработчиком таких легендарных компьютеров, как IBM 704, 709, 7030, 7090 и архитектором компьютерного семейства третьего поколения IBM/360

Многоядерные системы

- 2004 г. -Pentium 4, 3.46 GHz
 - 2005 г. -Pentium 4, 3.8 GHz
 - 2006 г. -Core Duo T2700, 2333 MHz
 - 2007 г. -Core 2 Duo E6700, 2.66 GHz
 - 2007 г.-Core 2 Duo E6800, 3 GHz
 - 2008 г.-Core 2 Duo E8600, 3.33 Ghz
 - 2009 г. -Core i7 950, 3.06 GHz
-
- Роста частоты практически нет!
 - Энерговыведение ~ четвертой степени частоты
 - Ограничения техпроцесса
 - Одноядерные системы зашли в тупик!!!

Вице-президент NVIDIA: «Закон Мура мертв»



- Вице-президент NVIDIA Билл Дэлли в гостевой колонке журнала «Форбс» [написал](#), что знаменитый закон Мура больше не работает и «мертв». По его словам, современные многопроцессорные решения становятся все менее эффективными, и простое увеличение числа ядер уже не дает результата. «Это как строить самолет путем прикрепления крыльев к поезду», — говорит он.

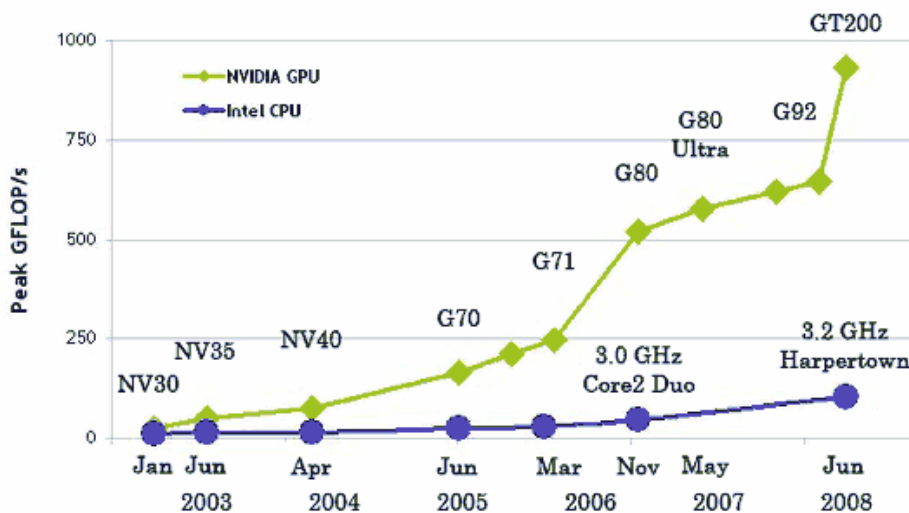
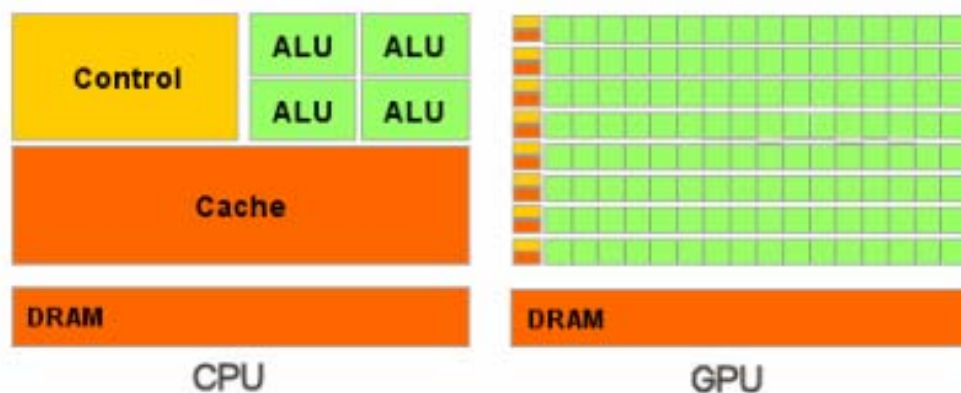
Решением проблемы Дэлли считает энергоэкономичные параллельные системы типа CUDA. «Сейчас нужно создавать энергоэффективные параллельные компьютеры, они же пропускные компьютеры (throughput computers). В них будет много процессорных ядер, оптимизированных не на последовательную скорость, а на эффективность решения определенной проблемы».

О технологии CUDA

- Технология NVIDIA CUDA™ - это единственная среда разработки на C, которая позволяет программистам и разработчикам писать программное обеспечение на порядки ускоряющее сложные вычислительные задачи благодаря многоядерной вычислительной мощности графических процессоров. В мире уже установлены миллионы GPU с поддержкой CUDA, и тысячи программистов уже бесплатно пользуются инструментами CUDA для ускорения приложений – от кодирования видео и аудио до поисков нефти и газа, моделирования продуктов, вывода медицинских изображений и научных исследований.
-
- Возможности технологии CUDA:
 - Стандартный язык C для параллельной разработки приложений на GPU
 - Стандартные библиотеки численного анализа для быстрого преобразования Фурье и базового пакета программ линейной алгебры
 - Специальный драйвер CUDA для вычислений с быстрой передачей данных между GPU и CPU
 - Драйвер CUDA взаимодействует с графическими драйверами OpenGL и DirectX
 - Поддержка операционных систем Linux 32/64-bit, Windows XP 32/64-bit и Mac

NVIDIA & ADM

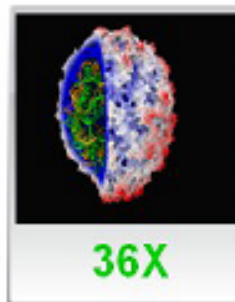
CUDA (Compute Unified Device Architecture) и
CTM (Close To Metal или AMD Stream Computing),



Speedups Using GPU vs CPU



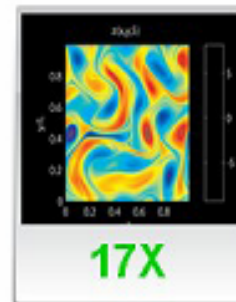
Interactive visualization of volumetric white matter connectivity¹



Ionic placement for molecular dynamics simulation on GPU²



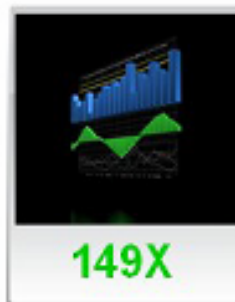
Transcoding HD video stream to H.264 for portable video³



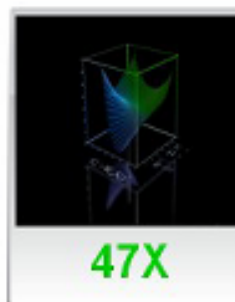
Simulation in Matlab using .mex file CUDA function⁴



Astrophysics N-body simulation⁵



Financial simulation of LIBOR model with swaptions⁶



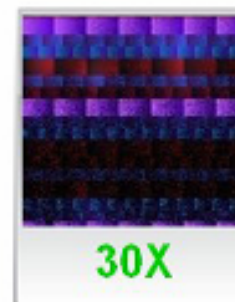
GLAME@lab: M-script API for linear Algebra operations on GPU⁷



Ultrasound medical imaging for cancer diagnostics⁸

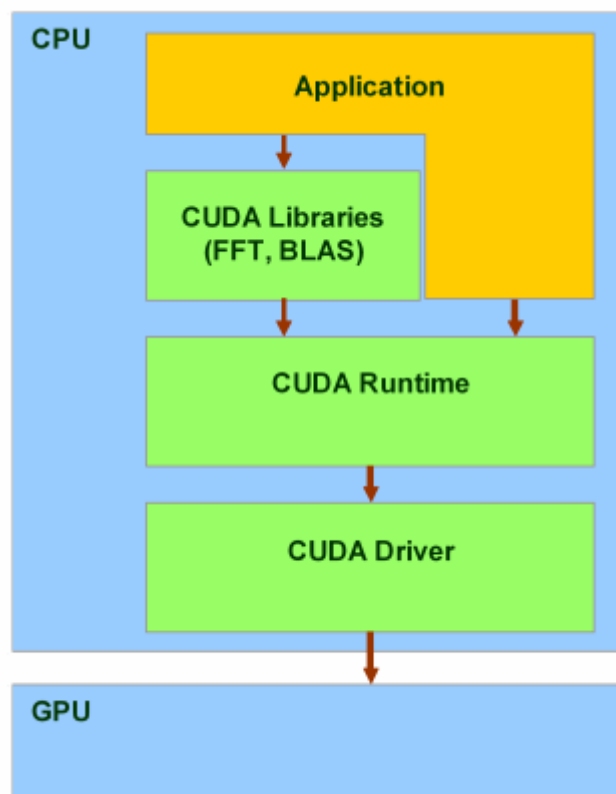


Highly optimized object oriented molecular dynamics⁹



Cmatch exact string matching - find similar proteins & gene sequences¹⁰

Состав NVIDIA CUDA

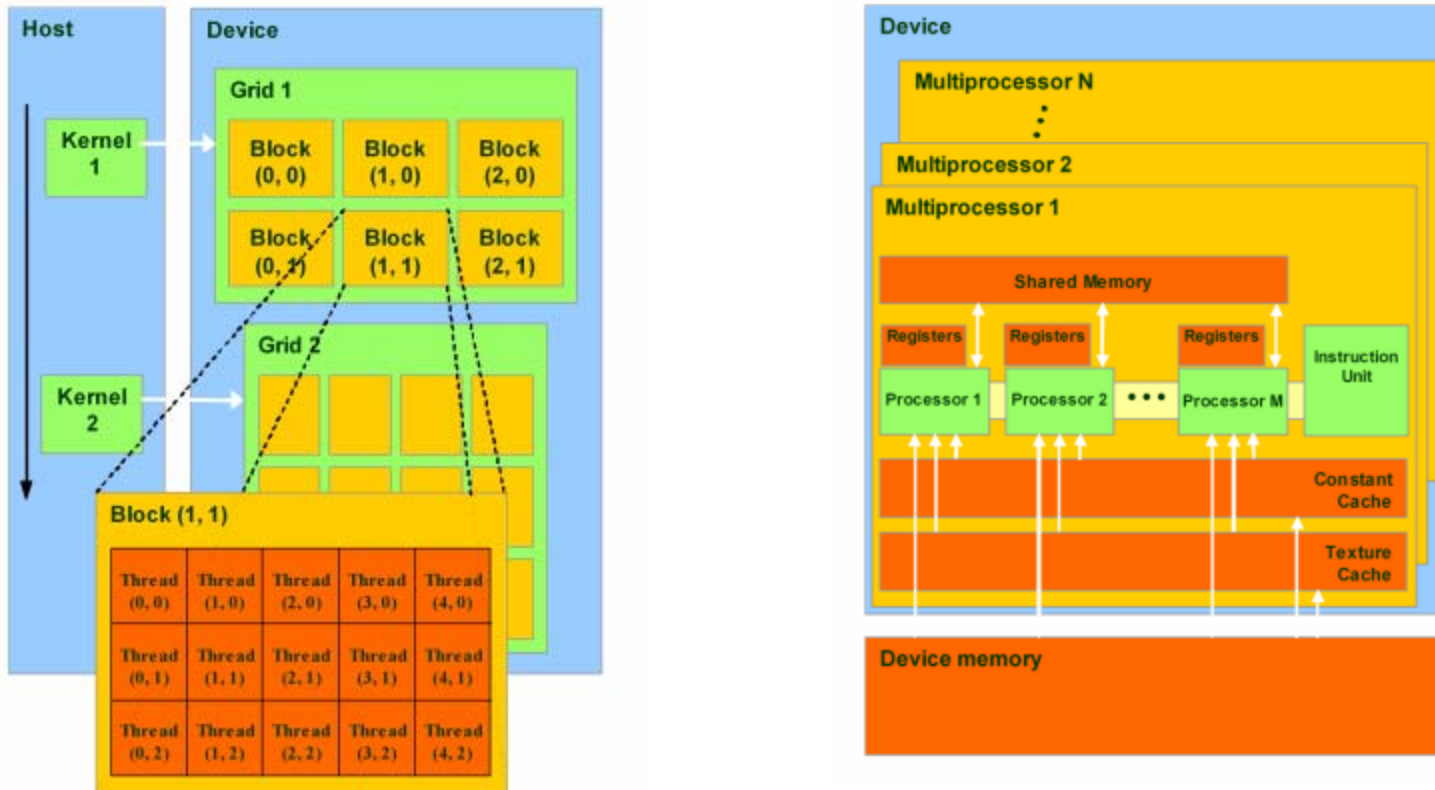


CUBLAS — CUDA вариант BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms), предназначенный для вычислений задач линейной алгебры и использующий прямой доступ к ресурсам GPU;

CUFFT — CUDA вариант библиотеки Fast Fourier Transform для расчёта быстрого преобразования Фурье, широко используемого при обработке сигналов. Поддерживаются следующие типы преобразований: complex-complex (C2C), real-complex (R2C) и complex-real (C2R).



Модель программирования CUDA



An application programming interface (API)

Сложение векторов

```
//Размер вектора в элементах
const int N = 1048576;
//размер вектора в байтах
const int dataSize = N * sizeof(float);

//Выделение памяти CPU
float *h_A = (float *)malloc(dataSize);
float *h_B = (float *)malloc(dataSize);
float *h_C = (float *)malloc(dataSize);

//Выделение памяти GPU
float *d_A, *d_B, *d_C;
cudaMalloc((void **)&d_A, dataSize);
cudaMalloc((void **)&d_B, dataSize);
cudaMalloc((void **)&d_C, dataSize);

//Инициализировать h_A[], h_B[]...

//Скопировать входные данные в GPU для обработки
cudaMemcpy(d_A, h_A, dataSize, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(d_B, h_B, dataSize, cudaMemcpyHostToDevice);

//Запустить ядро из N / 256 блоков по 256 потоков
//Предполагая, что N кратно 256
vectorAdd<<<N / 256, 256>>>(d_C, d_A, d_B);

//Считать результаты GPU
cudaMemcpy(h_C, d_C, dataSize, cudaMemcpyDeviceToHost);
```

Рейтинг суперкомпьютеров по состоянию на июнь 2010

- **Tianhe-1A** China's National University of Defense Technology (с 2010.11)
- **Cray Jaguar** (с 2009.11 - 2010.10)
- **IBM Roadrunner** (с 2008.06 - 2009.11)
- **IBM Blue Gene/L** (2004.11 - 2008.06)
- **NEC Earth Simulator** (2002.06 — 2004.11)
- **IBM ASCI White** (2000.11 — 2002.06)
- **Intel ASCI Red** (1997.06 — 2000.11)
- **Hitachi CP-PACS** (1996.11 — 1997.06)
- **Hitachi SR2201** (1996.06 — 1996.11)
- **Fujitsu Numerical Wind Tunnel** (1994.11 — 1996.06)
- **Intel Paragon XP/S140** (1994.06 — 1994.11)
- **Fujitsu Numerical Wind Tunnel** (1993.11 — 1994.06)
- **TMC CM-5** (1993.06 — 1993.11)

Тяньхэ-1А



2,5 петафлопс

Используется 7168 графических процессоров типа Nvidia Tesla M2050, каждый из которых имеет в своем составе 448 вычислительных ядер CUDA.

Кроме вычислительных систем Nvidia, суперкомпьютер работает на 14336 шестиядерных процессорах Intel Xeon.

Общая мощность суперкомпьютера приближается к цифре 4,04 мегаватт.



«Ломоносов»

Группа компаний «Т-Платформы», ведущий поставщик систем, программного обеспечения, услуг и решений для высокопроизводительных вычислений, выиграла открытый конкурс на поставку и наладку оборудования для второй очереди расширения суперкомпьютера «Ломоносов» в Московском Государственном Университете им. М.В.Ломоносова. Контракт на сумму 770 млн. руб. предусматривает наращивание суммарной производительности суперкомпьютера до 1,3 Петафлопс (квадриллионов операций в секунду).

Smp-сервер (8x6 ядер) лаб “Теория наноструктур” НИФТИ



Сервер (STSS Flagman QD820) в составе:

Процессоры: 8 процессоров AMD® Opteron™
2.10GHz 8425 HE SixCore 4800MHz System Bus,
6x512Kb L2 cache, 6144Kb L3 cache

Чипсет: nVidia® nForce® Pro 2200 / 2050 Server
chipset

ОЗУ: 16 x DIMM 4096Mb DDR-II PC2-6400 ECC
Registered

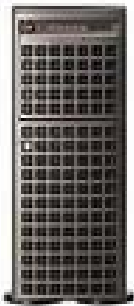
Жесткие диски: 4 x HDD 300Gb SerialATA
10000rpm

ОС: Microsoft Windows Server Enterprise 2008
32/64bit



Станции с NVIDIA Tesla ускорителями: 3 КТФ

и 4+1 лаб “Теория наноструктур” НИФТИ и Тв. отд НИФТИ



2 станции (STSS Flagman WX240T.2) в составе:

Процессоры: 2 процессора Intel® Xeon® 2.66GHz X5550 Nehalem Quad Core w/HyperThreading 6.4GT/s FSB, 8192Kb L3 cache

Чипсет: Dual Intel® 5520 Server chipset

ОЗУ: 12 x DIMM 2048Mb DDR-III PC3-10600 ECC Registered

Видеоадаптер: nVidia® Quadro® FX 380 PCI-Express x16 256Mb DDR-3 Dual DVI

Ускорители: 4 вычислителя nVidia® Tesla® C1060 PCI-Express x16 4096Mb DDR-3

ОС: Microsoft Windows Vista Ultimate 64bit



6 станций (STSS Flagman WP120N.2) в составе:

Процессор: 3.06GHz Intel® Core™ i7 I7-950 EM64T QuadCore Hyper-Threading 4.8GT/s FSB, 8192Kb L3 cache

Чипсет: Intel® X58 + 2 x Nvidia® nForce200 chipset

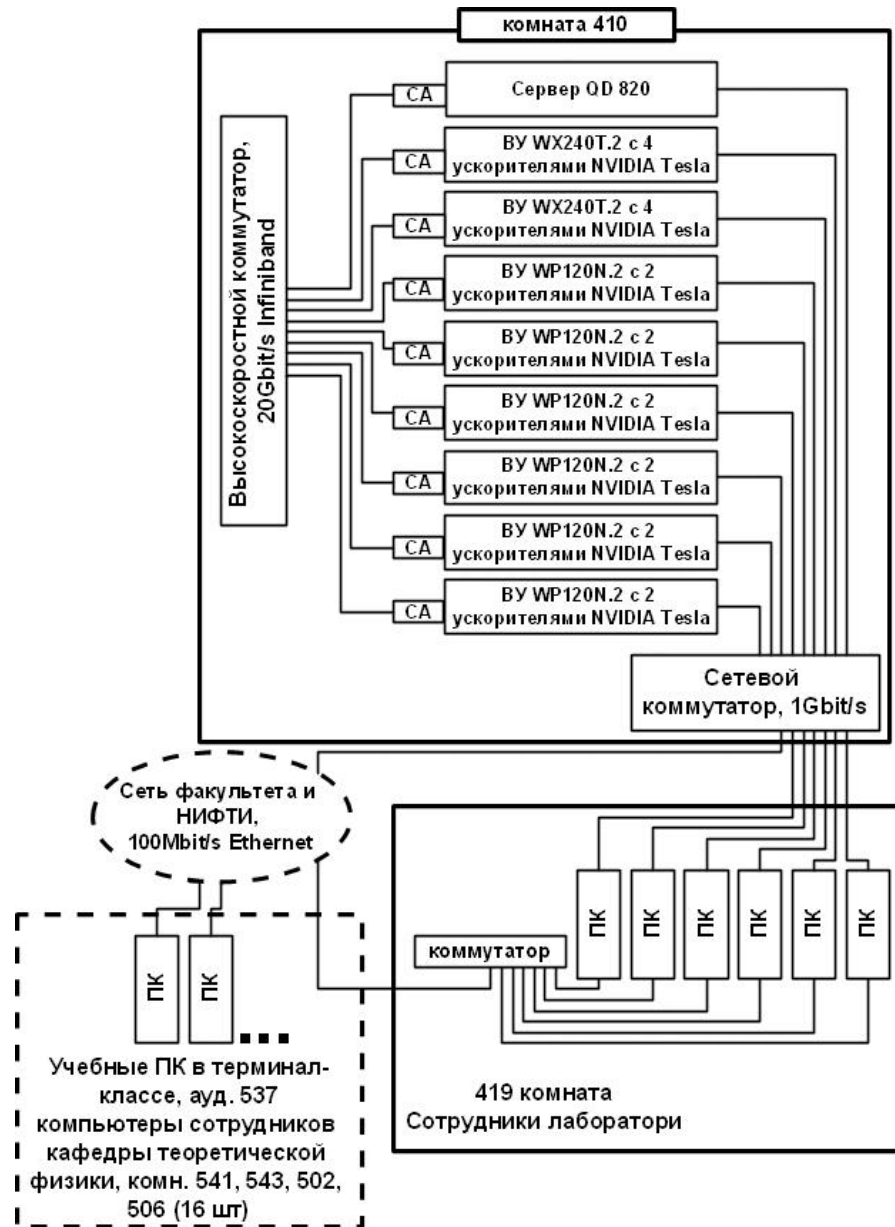
ОЗУ: 6 x 2048Mb DDR-III 1333MHz DIMM

Видеоадаптер: nVidia® Quadro® FX 580 PCI-Express x16 512Mb DDR-3 Dual DisplayPort

Вычислитель: nVidia® Tesla® C1060 PCI-Express x16 4096Mb DDR-3

ОС: Microsoft Windows Vista Ultimate

Схема кластера НИФТИ



СА - сетевой адаптер
ВУ - вычислительный узел
ПК - персональный компьютер

Проекты:

- 1) Диссипативная динамика (квантовый метод Монте-Карло)
- 2) Амплитудная спектроскопия кубитов
- 3) Метод Кона-Шэма
- 4) Метод молекулярной динамики
- 5) Метод Монте-Карло

Параллельные вычисления динамики кубитов

М.В.Денисенко, Расчет населенностей
кубитов в сильном ЭМ поле, 2010 год

- Cluster ННГУ 128 процессоров, MPI – программа, вычисления $P(\epsilon, A)$ – ускорение в ~ 100 раз
- Программа на smp –машине, 48 ядер, ускорение 40 раз (Open MP)

Выводы

[Donald R. Hamann](#), Physics Today - May 1983, Computers in physics: an overview

- 1) **Взаимодействие физиков с математическим обеспечением должно начинаться с высшей школы. Сегодня каждый студент-физик должен прослушать какие-либо курсы по научному программированию (computer science), в отличие от обычного курса ФОРТРА .**
- 2) **Тем же, кто уже вышел из студенческого возраста, следует для начала побеспокоиться о том, чтобы догнать молодежь!**



Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Моделирование наноструктур

А.М.Сатанин

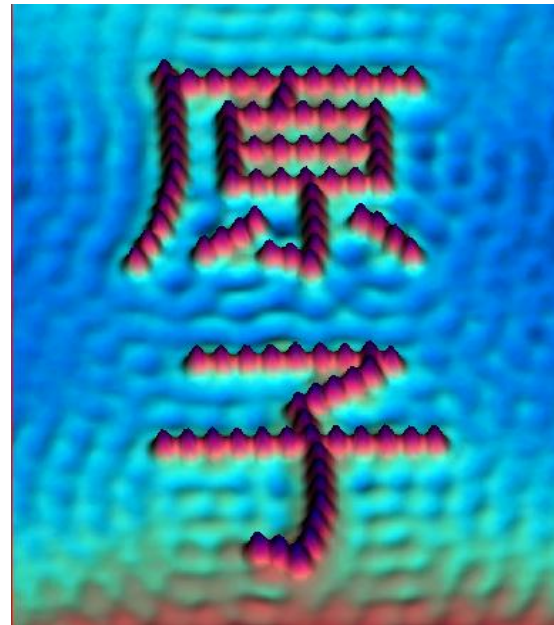
*ННГУ им. Н.И.Лобачевского (Национальный
исследовательский университет),
Лаборатория «Теория наноструктур» НИФТИ, Н.Новгород,
Россия*

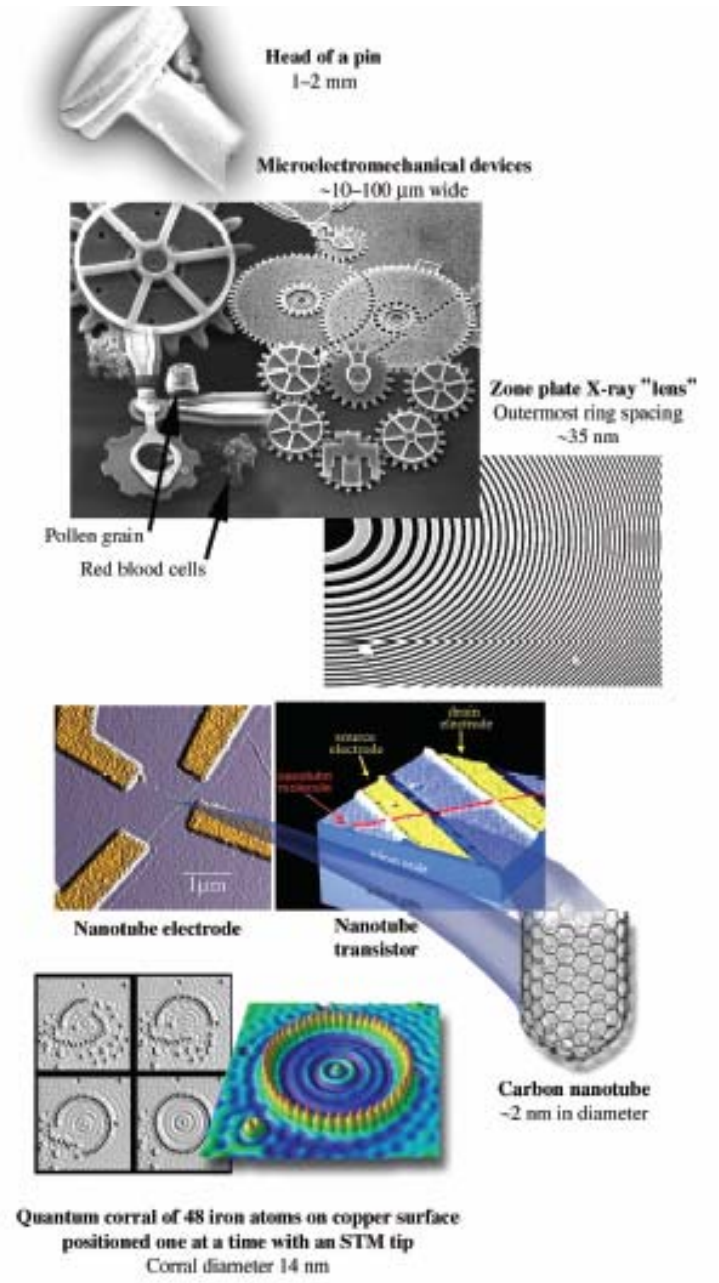
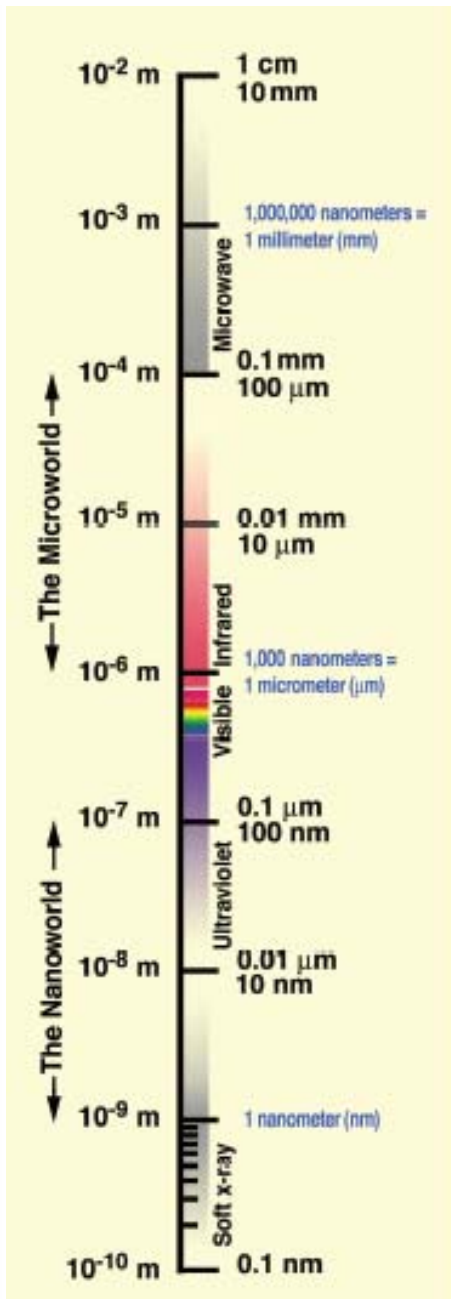
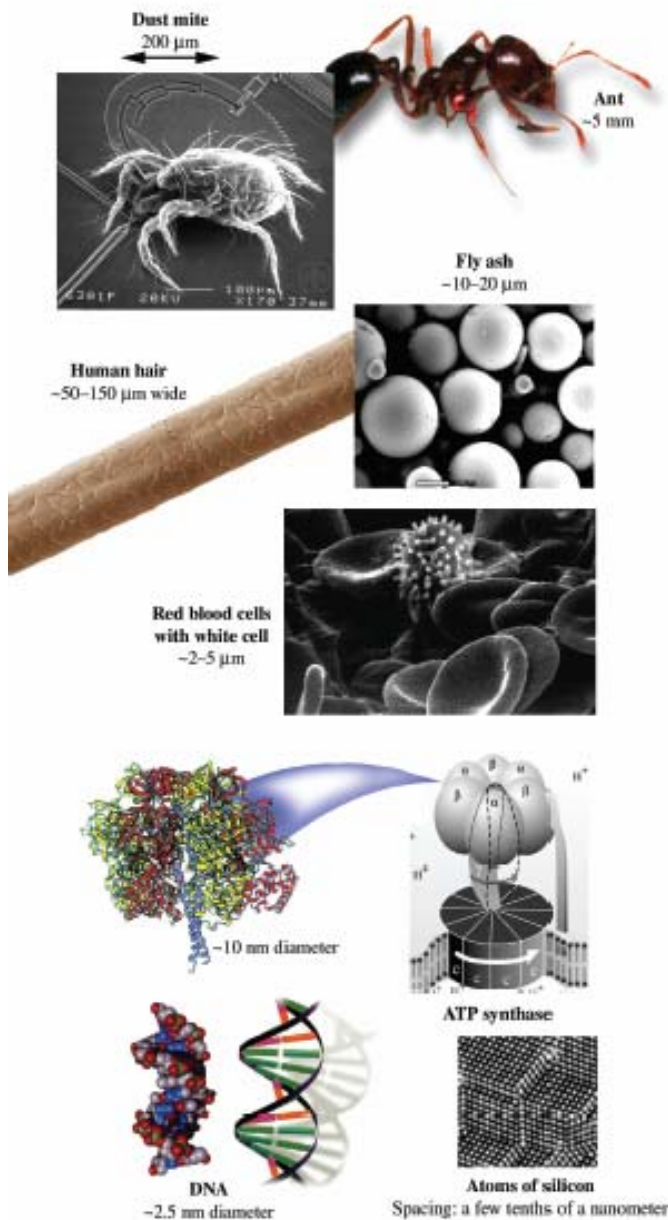
Введение в физику наноструктур

- 1. Методы современной нанотехнологии**
- 2. Наноэлектроника: что это такое?**
- 3. Резонансные эффекты и манифестация резонансов в наноструктурах**
- 4. Квантовые эффекты в наноструктурах**
- 5. Методы расчета наноструктур**

ЧТО ТАКОЕ НАНОТЕХНОЛОГИЯ?

- “Nano” is a Greek word for dwarf
- Nanotechnology refers to
 - Technology at the level of atoms and molecules
 - 1 nanometer (nm) is a billion of a meter (10^{-9} meter!) (~100,000 times smaller than the diameter of a human hair)
- Art and Science of manipulating atoms and molecules to create new systems, materials, and devices





Nanotechnology

The Founder's Point of View



Richard Feynman

Nobel Prize in Physics, 1965

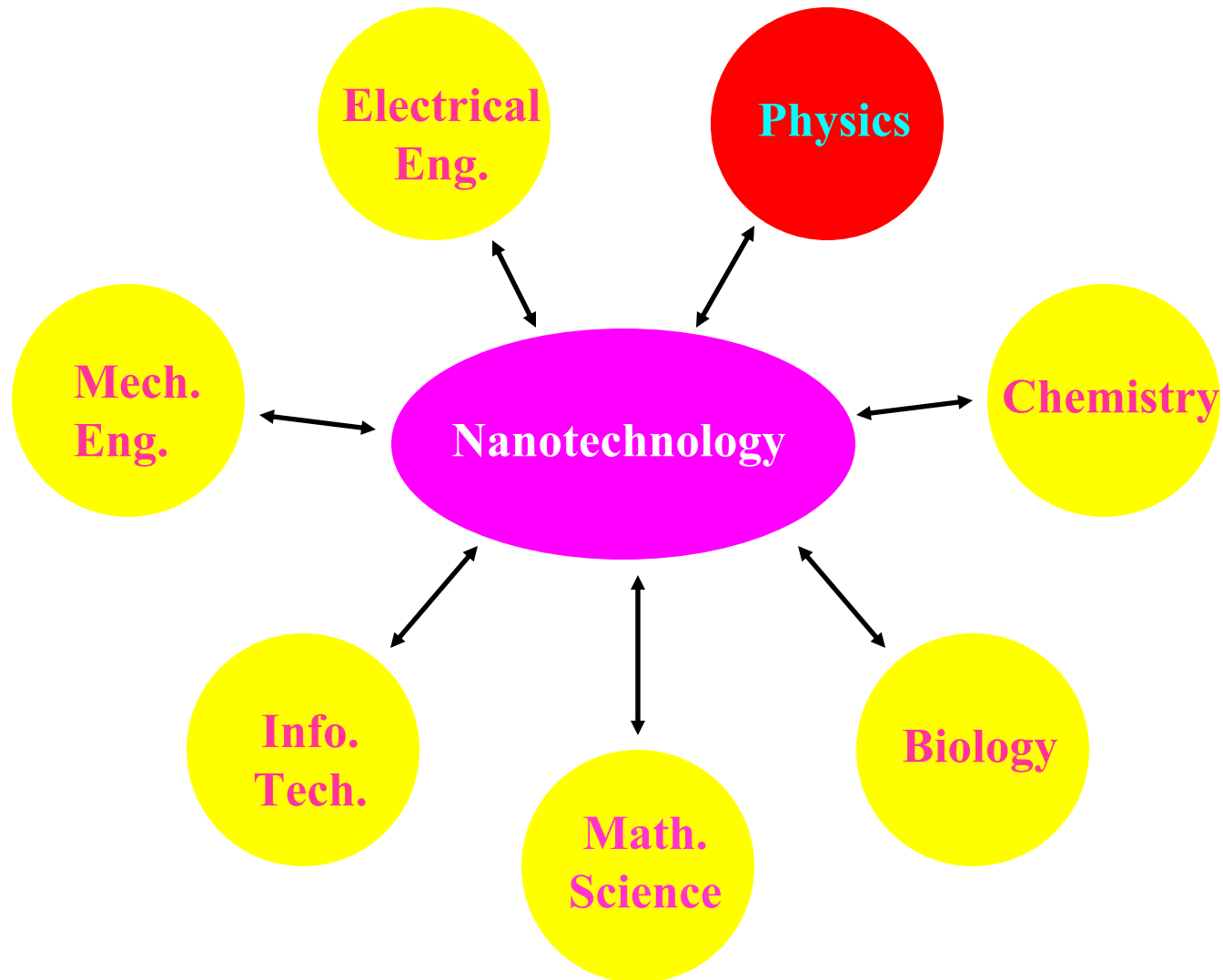
There is plenty of room at the bottom

-- Special Lecture in 1959 --

“The principles of physics, as far as I can see, do not speak against the possibility of maneuvering things atom by atom. It is not an attempt to violate any laws; it is something, in principle, that can be done; but in practice, it has not been done because we are too big”

The problems of chemistry and biology can be greatly helped if our ability to see what we are doing, and to do things on an atomic level, is ultimately developed---*a development which I think cannot be avoided.*

Nanotechnology is multidisciplinary



Наноматериалы

- Нанопористые структуры;
- наночастицы;
- нанотрубки и нановолокна;
- нанодисперсии (коллоиды);
- наноструктурированные поверхности и пленки;
- нанокристаллы и нанокластеры.

Which companies are involved in nanoTechnology currently?

- More than 700+ companies worldwide

best bets

see how Stain DefenderTM works for you >

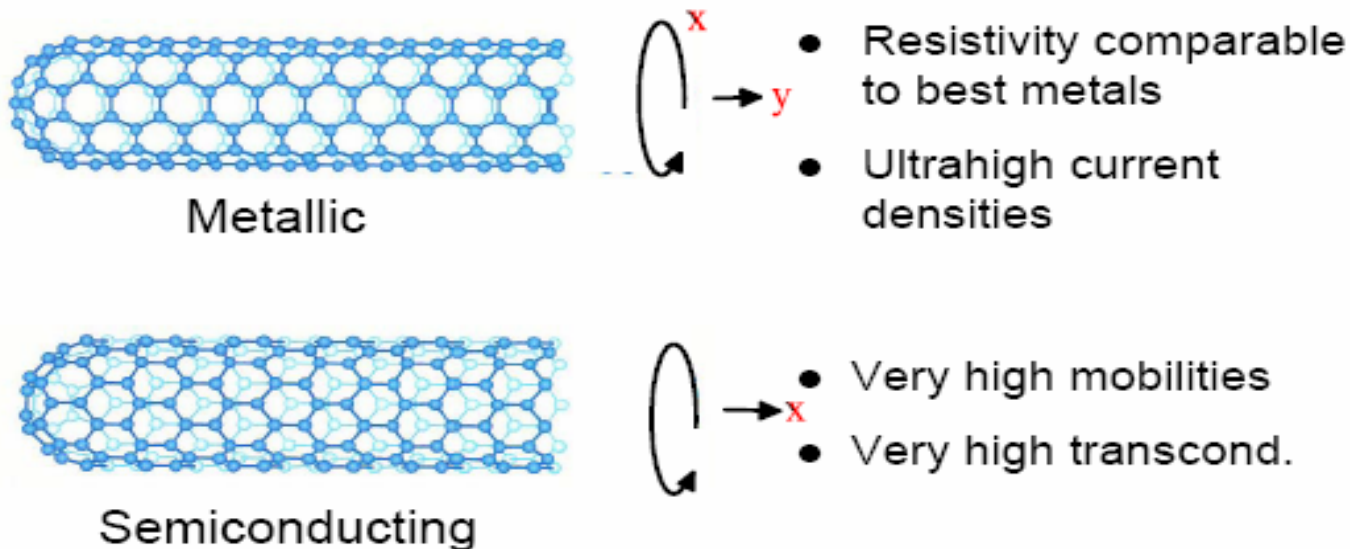


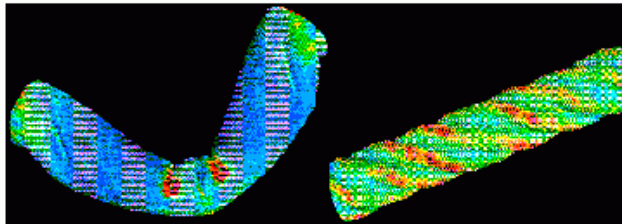
DOCKERS® PETITE
Flat Front Go
Khaki with Stain
Defender™

	Electronics	Materials	Biotech	Storage	Computing	Energy	Defense
IBM							
HP							
ChevronTexaco							
Dupont							
Samsung							
Motorola							
NEC							
Lucent							

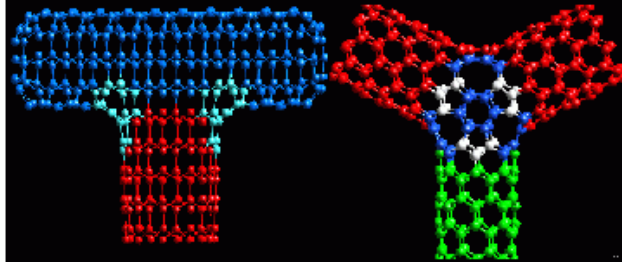
Carbon Nanotubes

- Tubes made entirely of carbon rings, 1991
- 50,000 times as thin as a human hair
- As strong as diamond
- Light, flexible and 100X stronger than steel

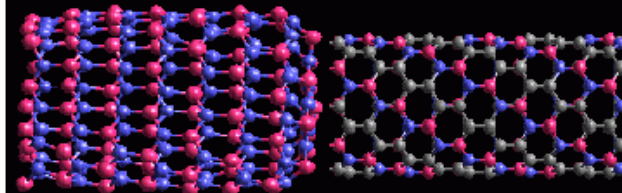




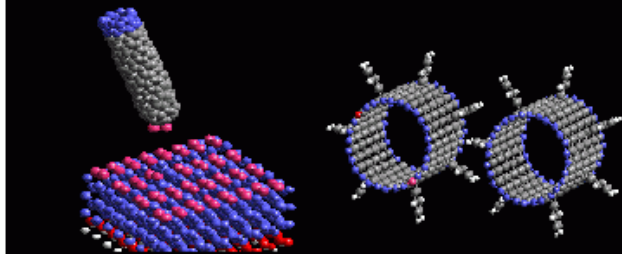
Nanotube – Nanomechanics



Carbon based Nanoelectronics



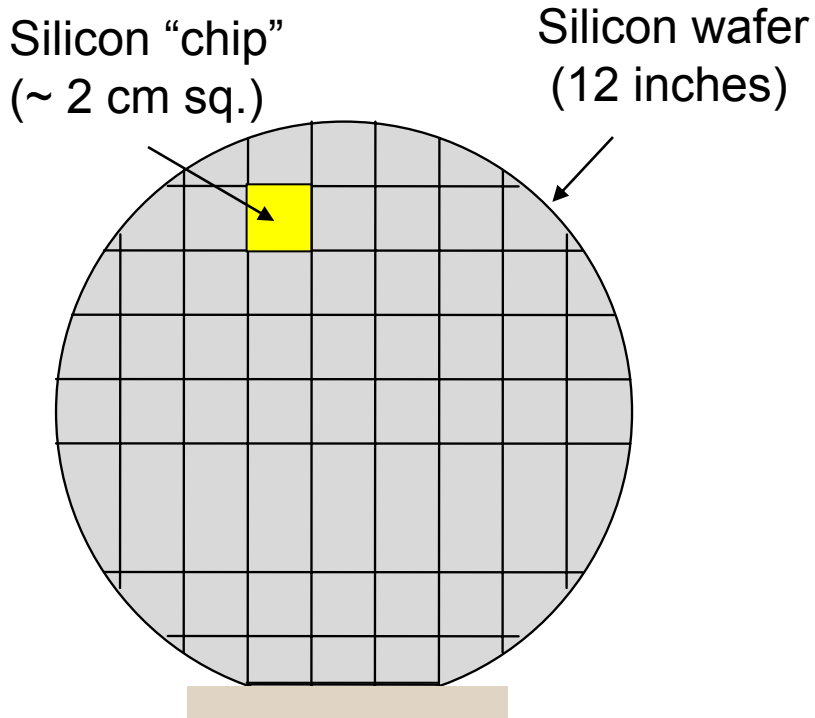
C_xByN_z – Heteroatomic Nanotubes



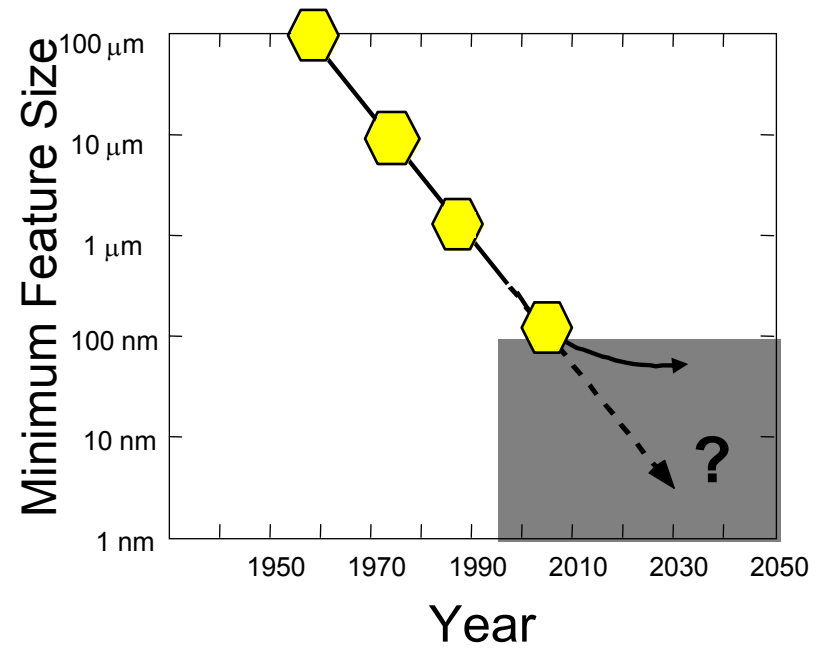
Nano–electromechanical Systems

Deepak Srivastava

От микро- к наноэлектронике



Currently: >200M transistors/chip
2016: ~10B transistors/chip

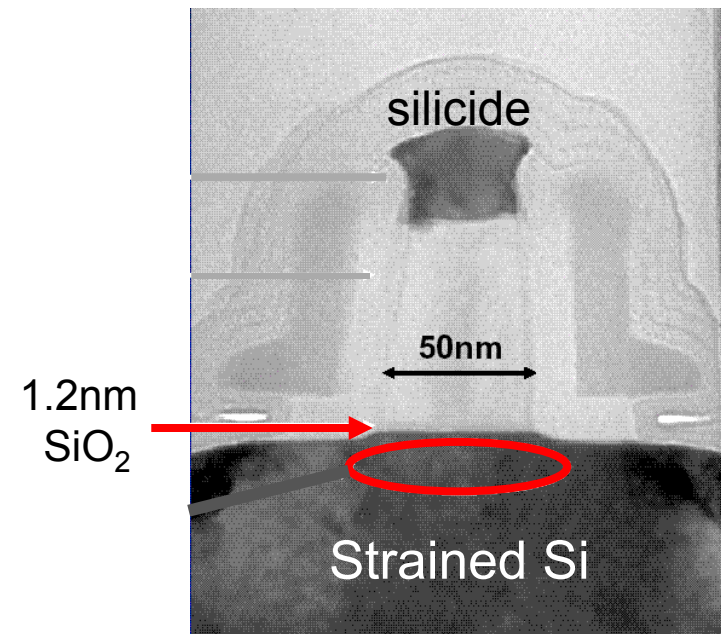
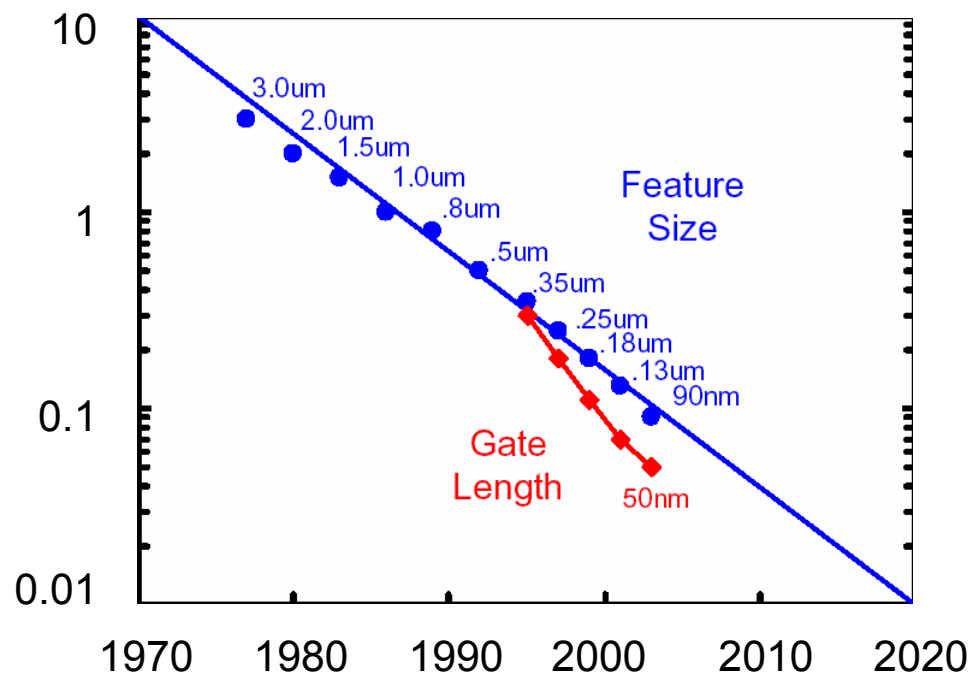


Technology generation
 $L \rightarrow L/\sqrt{2}$

Cost per function drops 25% / yr

Транзистор

Intel: August 2002



www.intel.com/research/silicon/90nm_press_briefing-technical.htm

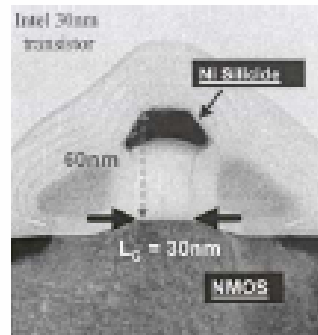
Ultrasmall Devices: Are We Ready for Quantum Effects?

D. K. Ferry

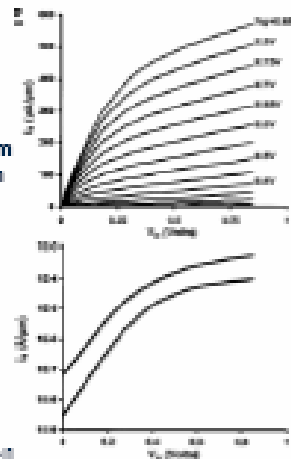
EE241 - Spring 2005 Advanced Digital Integrated Circuits

Some Recent Devices

Intel's 30nm transistor



$I_{on} = 670 \mu\text{A}/\mu\text{m}$
 $I_{off} = 80 \text{nA}/\mu\text{m}$

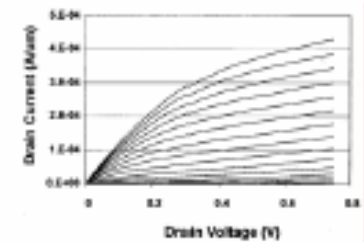
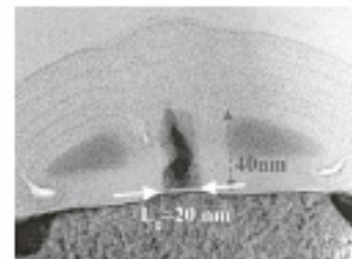


[B. Doyle, Intel]

29

More Recent Devices

Intel's 20nm transistor

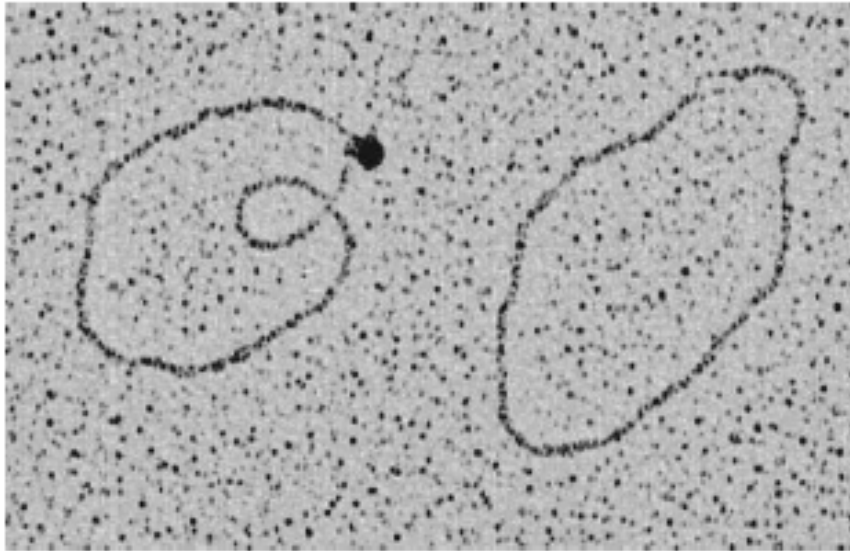


@0.75V

[B. Doyle, Intel]

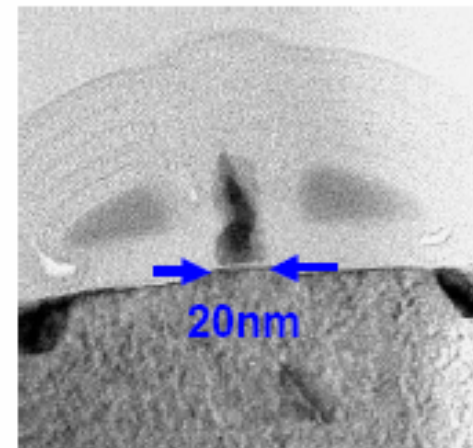
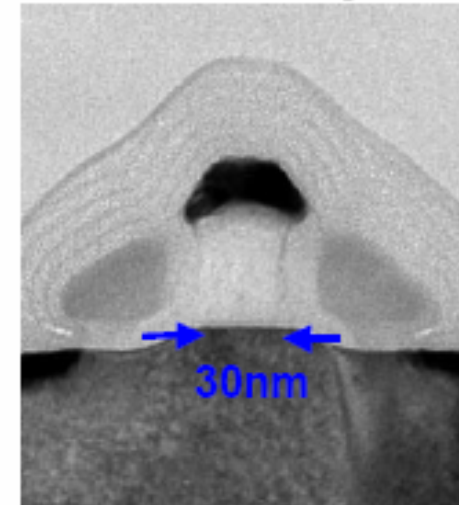
30

Transistors as Small as DNA exist today*

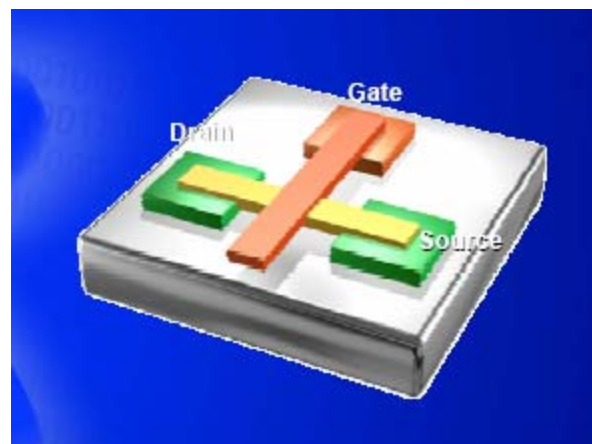
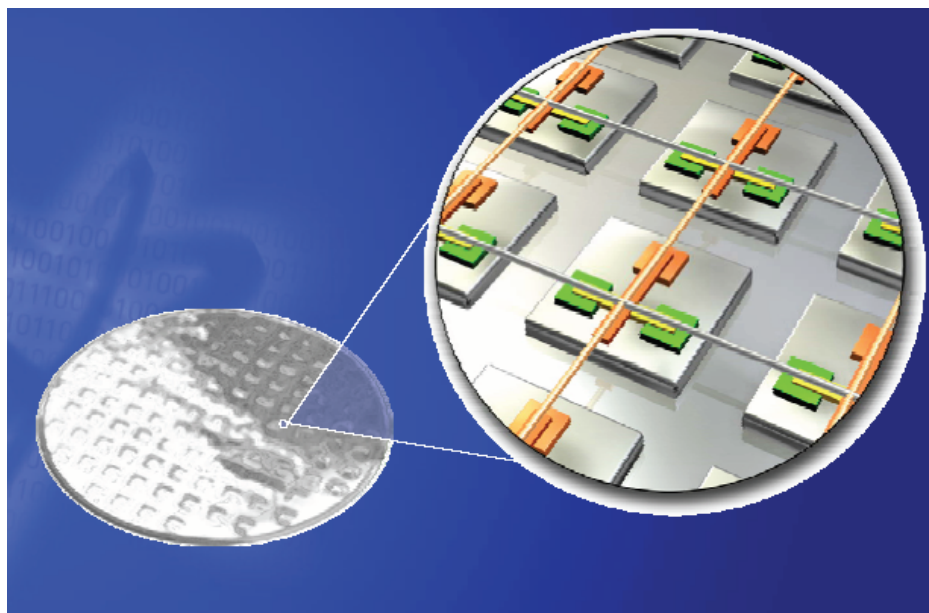


10nm Gold particle attached to Z-DNA
Antibody [John Jackson & Inman. Gene
1989 84 221-226]

*Intel, 2000, 2001



Электронный транспорт в микро- и наноструктурах



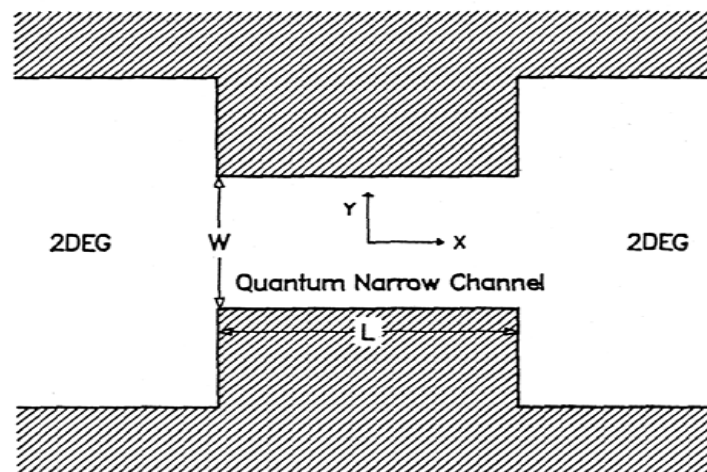
Theoretical Model

The Schrödinger equation in the 2D narrow channel

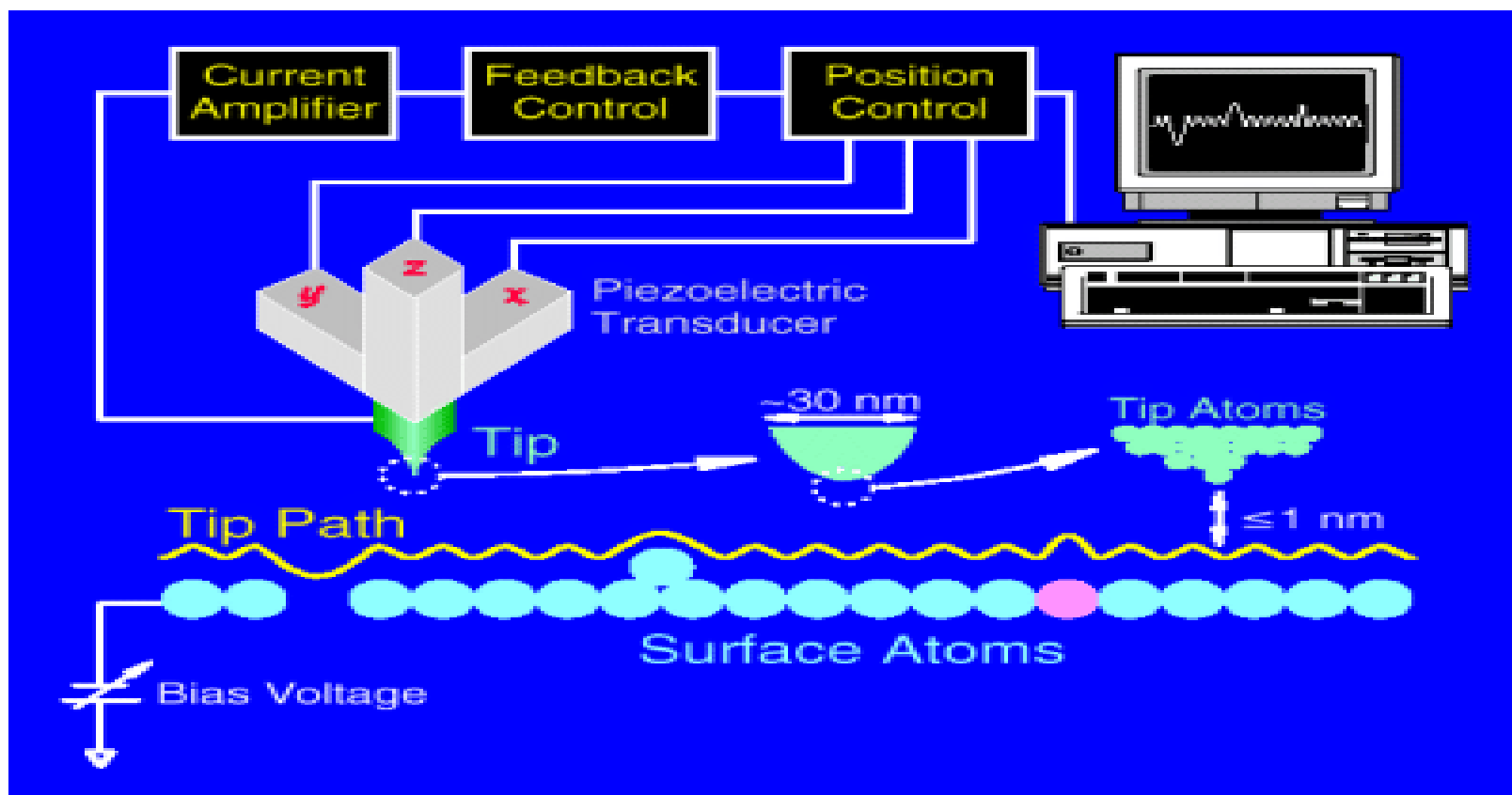
$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y)$$

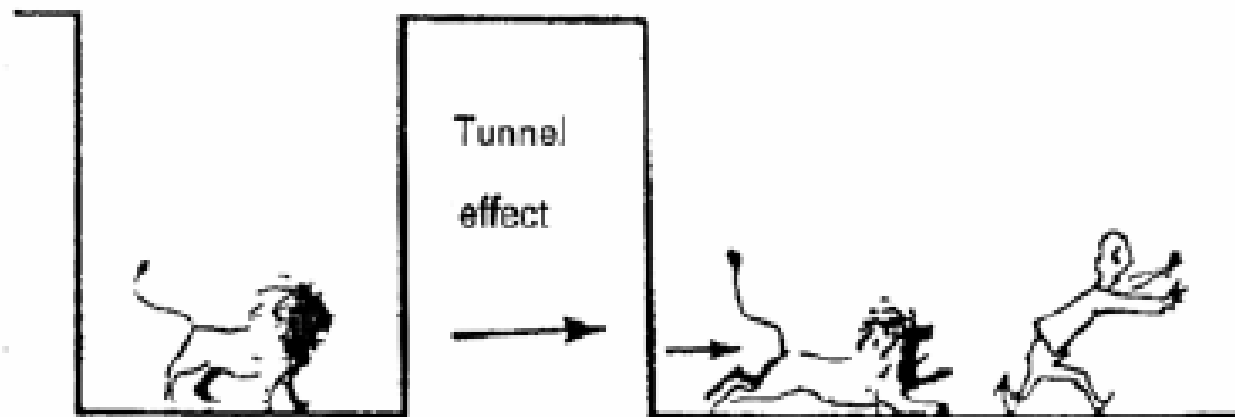
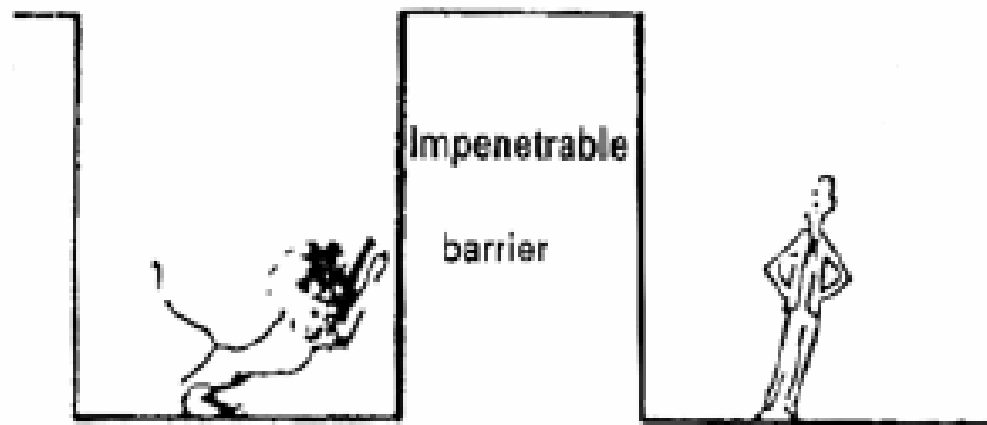
where

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_c(y)$$

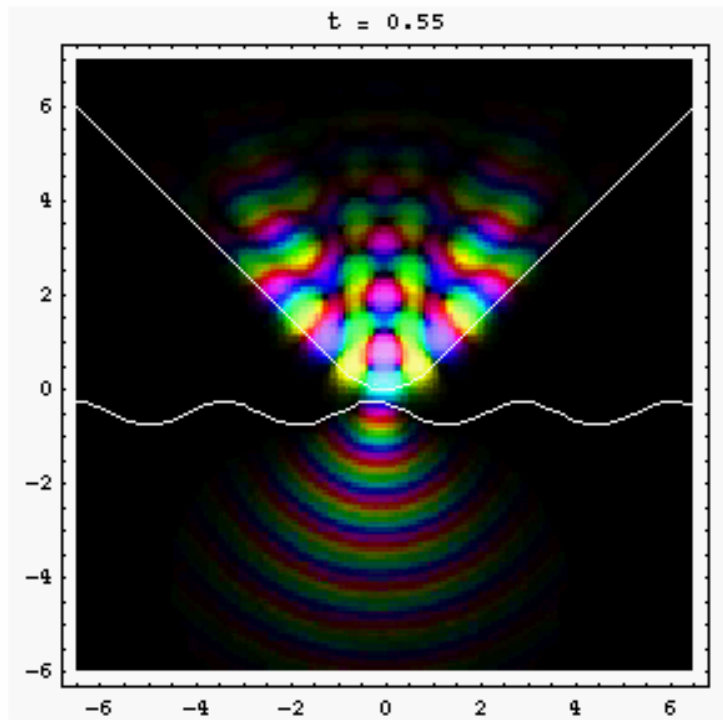


Сканирующий туннельный микроскоп

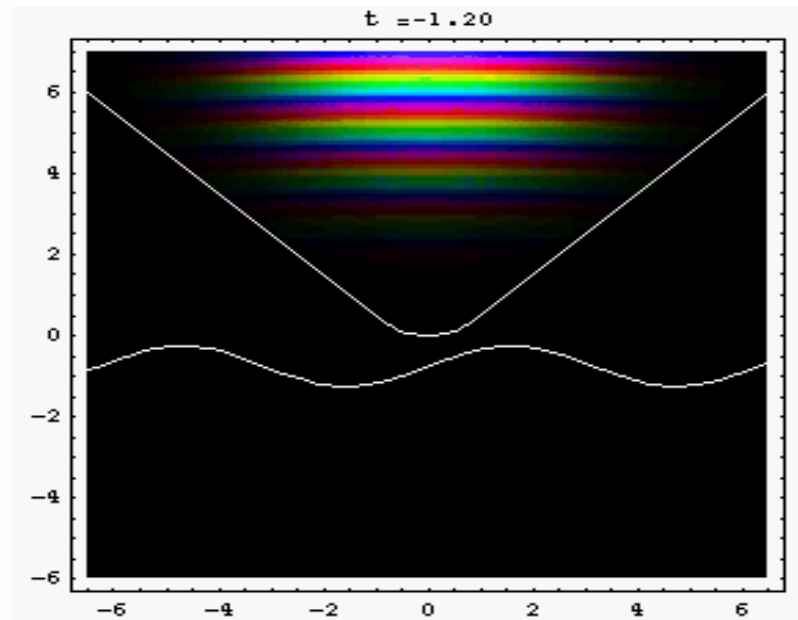
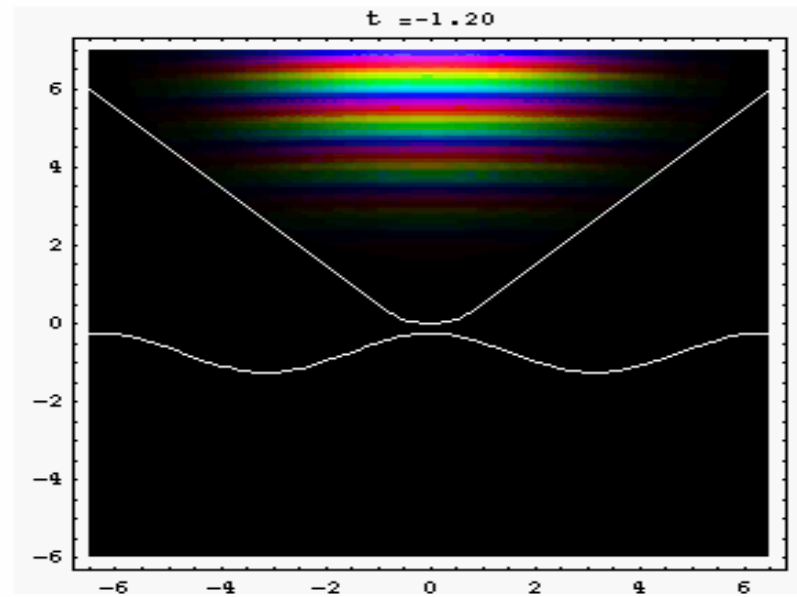




The difference between classical theory and quantum theory, illustrating tunneling through a potential barrier (Bleaney, 1984).



Scanning a surface with the STM



Larger tip-surface distance

Nanopen

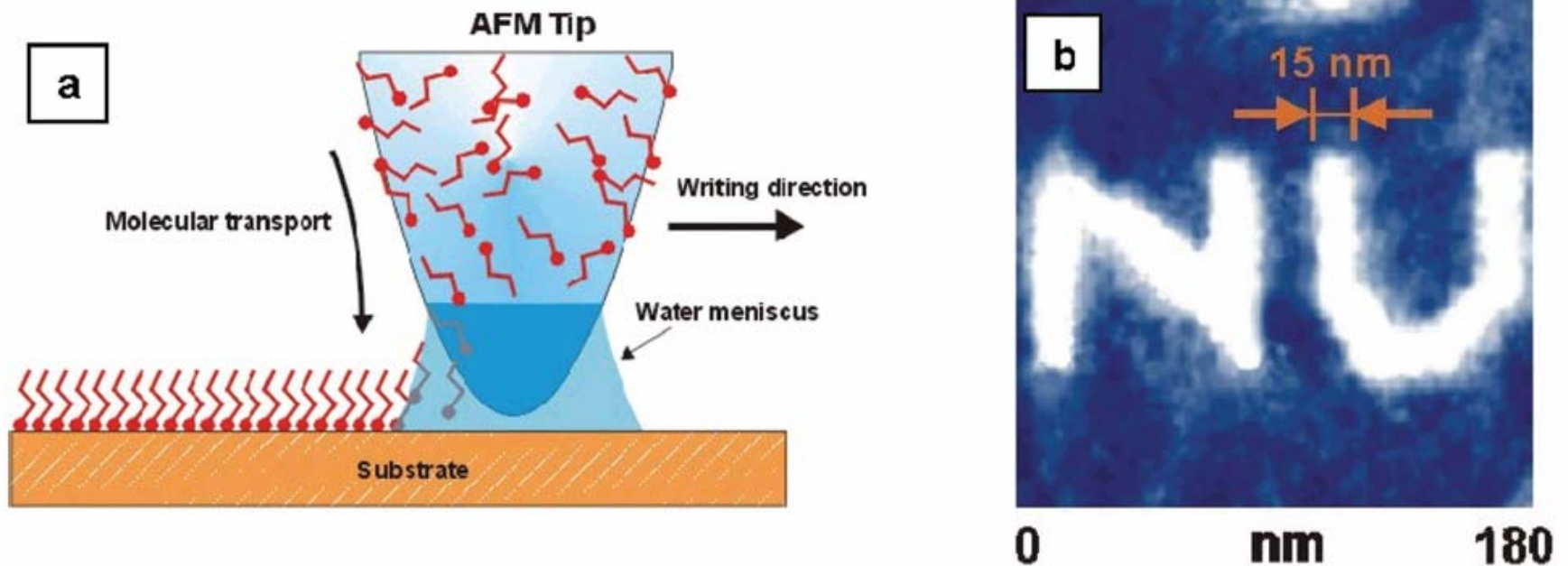
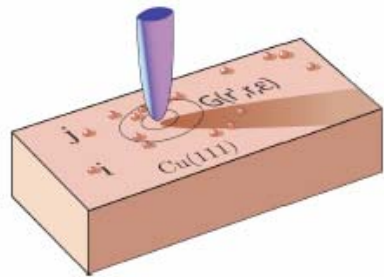


Figure 8. (a) Cartoon showing how dip-pen nanolithography “writes” molecules onto a substrate. A major advantage of this process is that it creates a nanostructure pattern on a surface in one step. Conventional processes to create such a patterned nanostructure require up to five complex steps and very sophisticated fabrication tools. (b) Linear force microscope image of an acid “ink” patterned on a gold substrate. The patterned feature size is 15 nm and spatial resolution is ~5 nm (courtesy C. Mirkin, Northwestern University).

Theory of quantum tunneling and probing of wavefunction

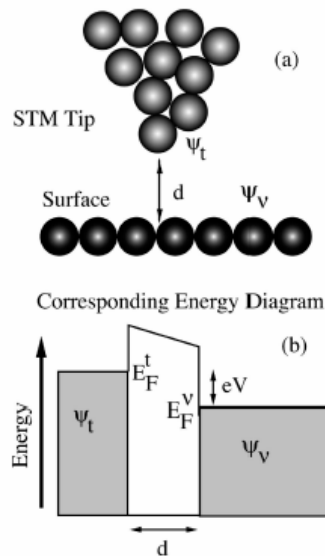
The problem of probing quantum states:

Current



$$I(\mathbf{r}) = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mathbf{e}, \mathbf{e}'} |M_{\mathbf{e}, \mathbf{e}'}(\mathbf{r})|^2 f(\mathbf{e}_e) \times [1 - f(\mathbf{e}_{e'})] \delta(\mathbf{e}_e + eV - \mathbf{e}_{e'}),$$

Tunneling Geometry



$$I(\mathbf{r}) \propto \int_0^{eV} \rho_t(\mathbf{e}) \text{LDOS}(\mathbf{r}, \mathbf{e}) d\mathbf{e}, \quad \frac{dI}{dV}(\mathbf{r}, \mathbf{e}) \propto \text{LDOS}(\mathbf{r}, \mathbf{e}).$$

Mapping of wavefunction

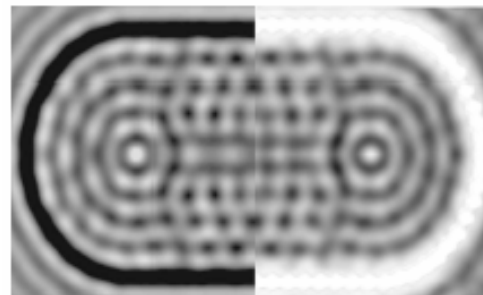


FIG. 5. Local density of electron states (LDOS) near E_F for a 76-Fe-atom "stadium" of dimensions $141 \times 285 \text{ \AA}$. Right-hand side: experiment, bias voltage 0.01 V ($e = 0.45 \text{ eV}$); left-hand side: theory ($e = 0.46 \text{ eV}$). The density at the locations of the Fe adatoms is not accounted for in the theory and appears black.

СТМ метод

S. Yamada, M. Yamamoto, J. Appl. Phys. 79, 8391 (1996)

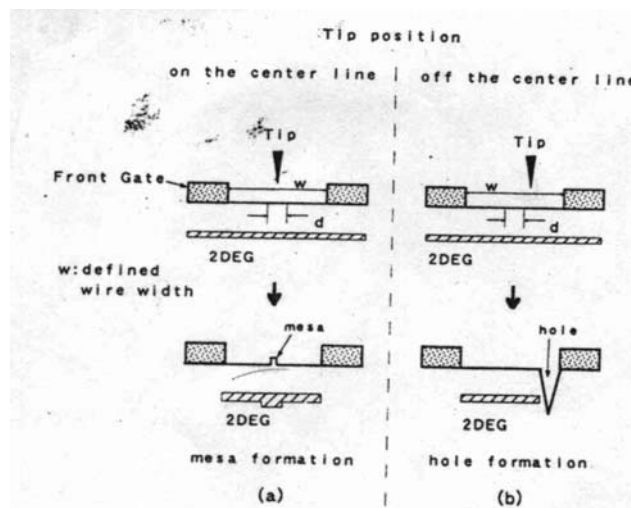


FIG. 1. Schematic (cross-sectional) pictures of the STM electrical evaporation, describing the relation between the tip-front-gate distance and the evaporation. The tip is positioned (a) on and (b) off the wire center. In (a) a small mesa was formed on the center, while in (b), a cone hole was formed on the edge (along the front-gate electrode). The critical tip deviation d from the center line, by which the produced structure (mesa or hole) of the electrical evaporation changes, is about 5% of w , where w is the wire width defined by the front gate.

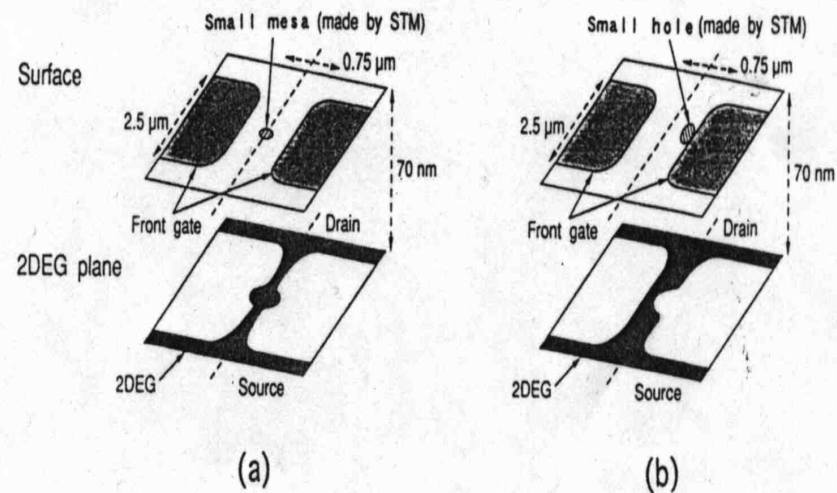
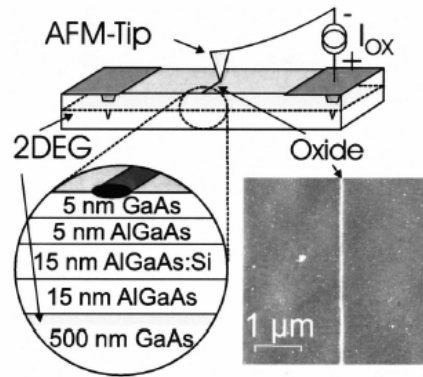


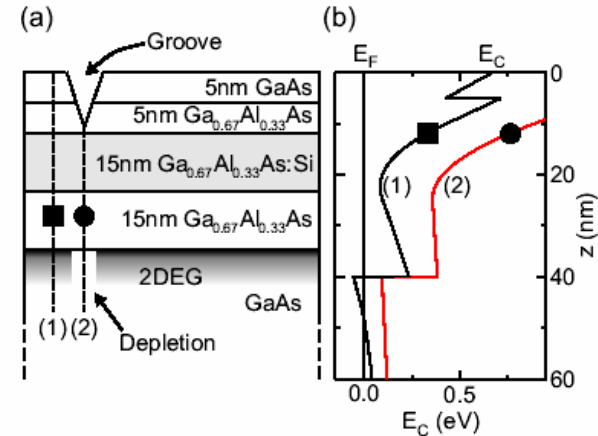
FIG. 4. Expected electronic structures of a split-gate wire (a) having a mesa on the center and (b) having a hole close to the side-front-gate electrode. In (a), a front gate condition causing pinch off in the original wire, was assumed.

Асимметричный интерферометр Аронова-Бома

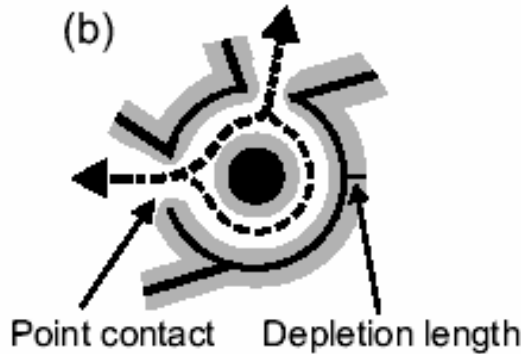
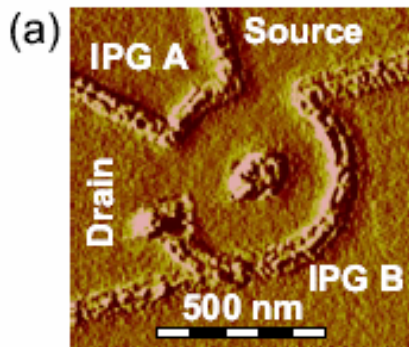
Keyser, U. F. et. al. *Semicond. Sci. Tech.* 17
(2002) L22-24



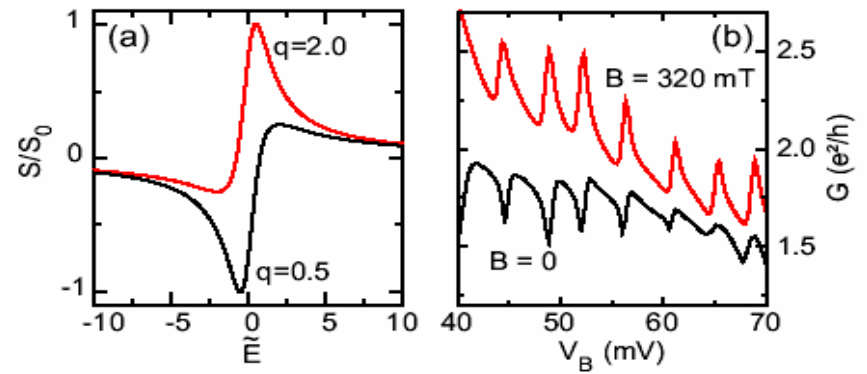
Anodic oxidation setup



Band diagram



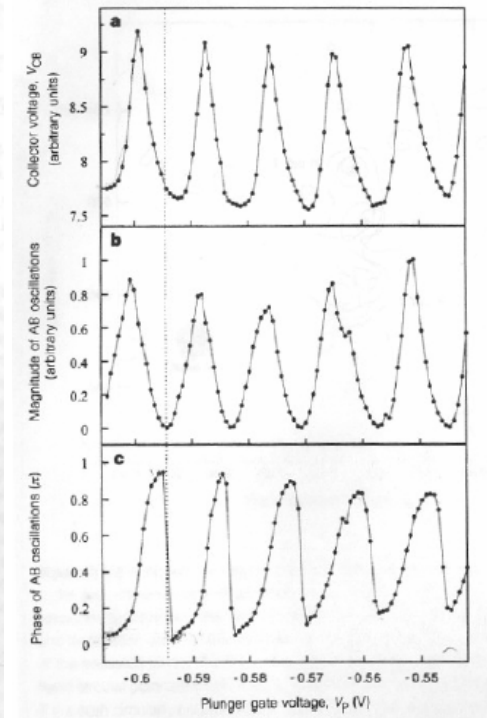
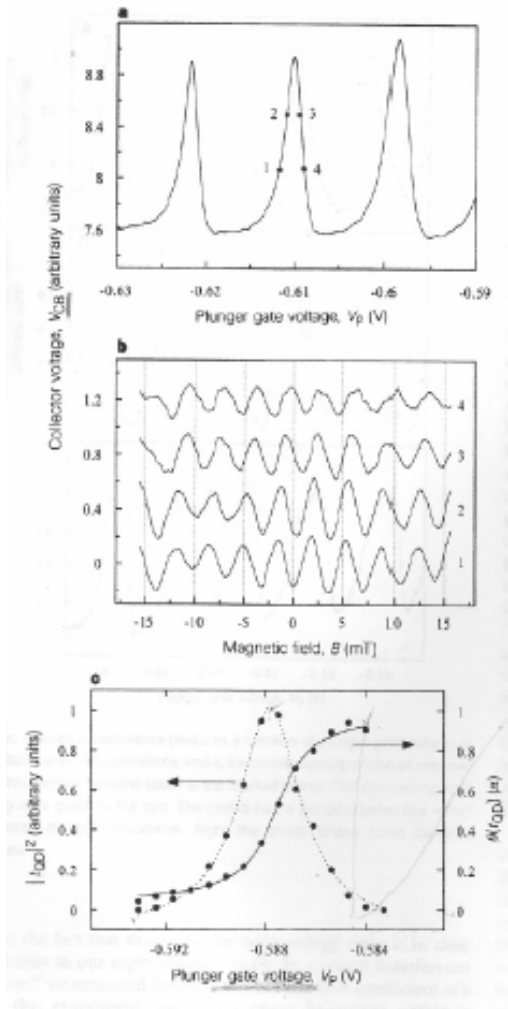
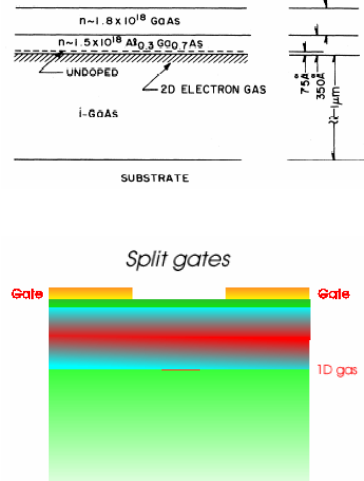
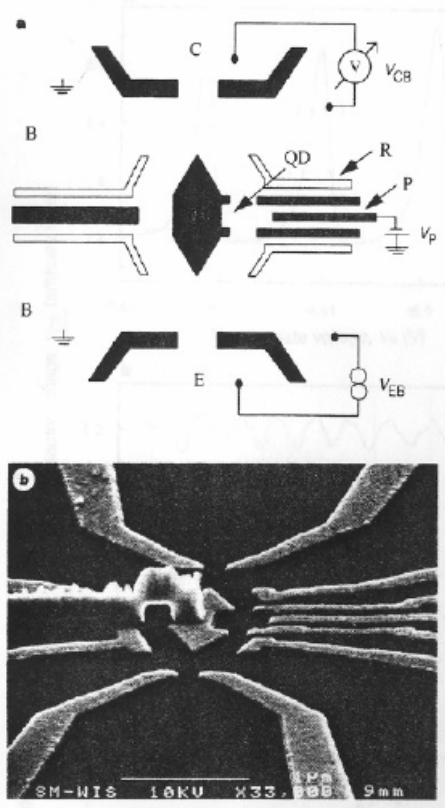
AFM image of the ring-structure



Fano resonances

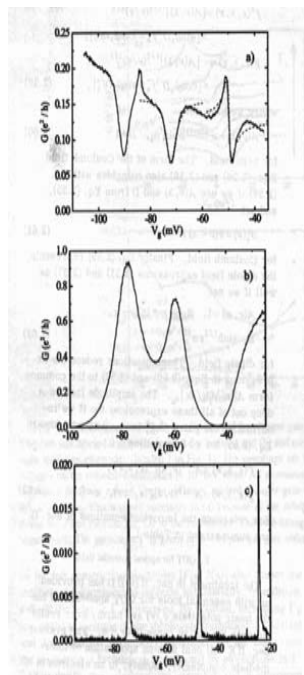
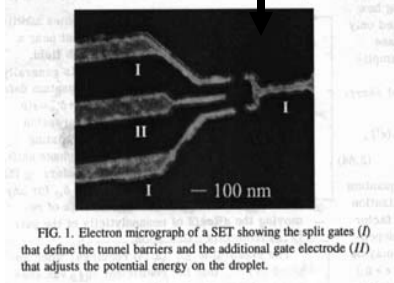
Резонансы Брейта-Вигнера и Фано в наноструктурах

R.Schuster et al., Nature, v 385, p. 417 (1997)

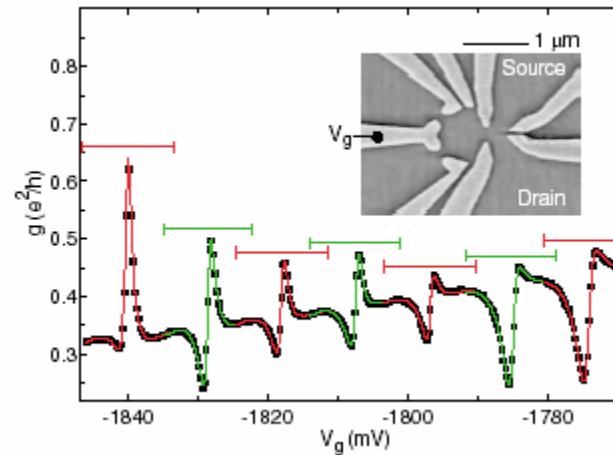


Фано-резонансы: некоторые эксперименты

J.Gores *et al.* Phys. Rev. B62 2188(2000).



A.C.Johnson *et al.*,
Phys. Rev. Lett.
93, 106803 (2004)

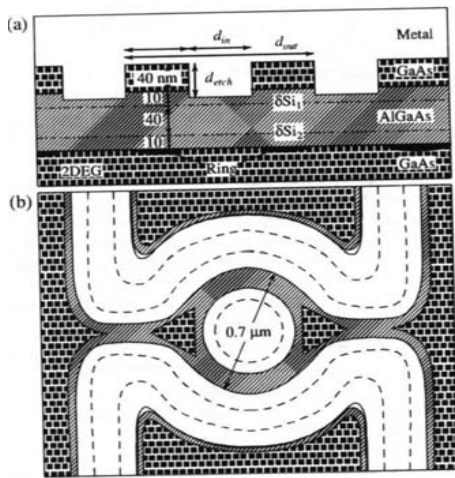


Conductance $G = G_b \frac{|\varepsilon + q|^2}{\varepsilon^2 + 1}$

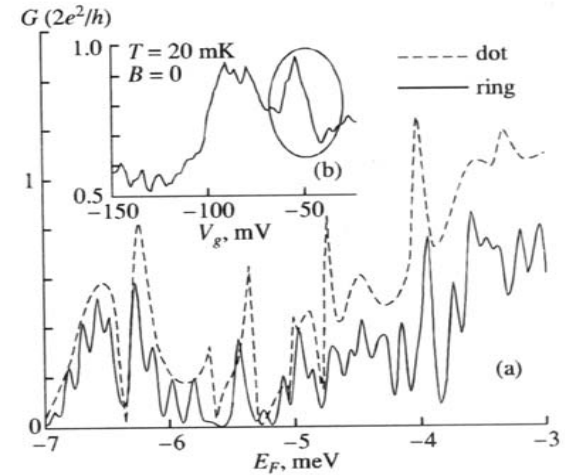
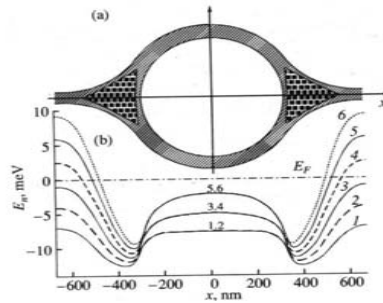
q-coupling parameter $\varepsilon = (E - E_R) / \Gamma$

Интерферометры Ааронова-Бома

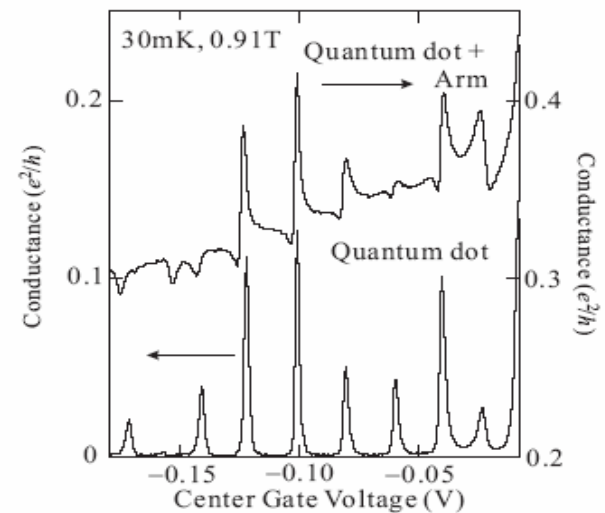
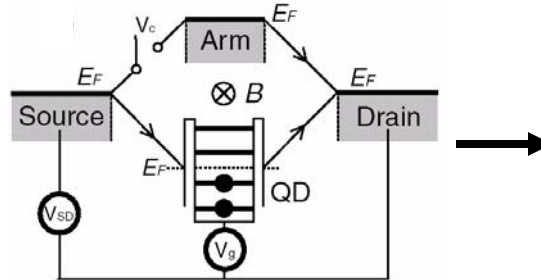
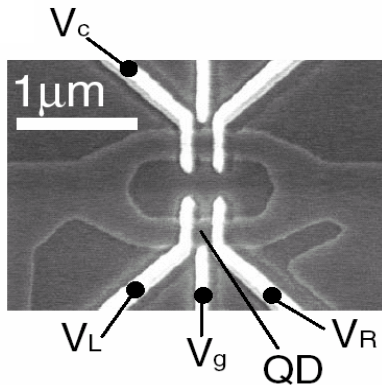
O.A.Tkachenko et al. JETPLetters, 71,255 (2000).



Cross section
of the structure

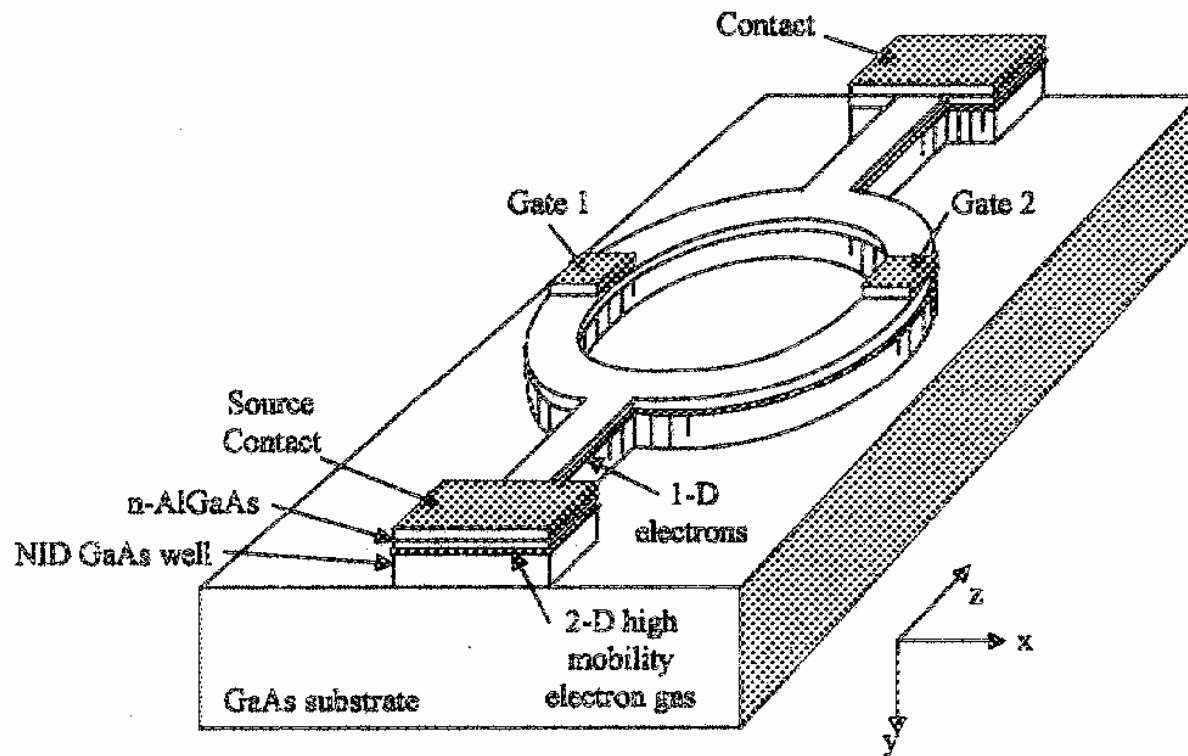


K. Kobayashi et al, Phys. Rev. 88, 25 (2002)



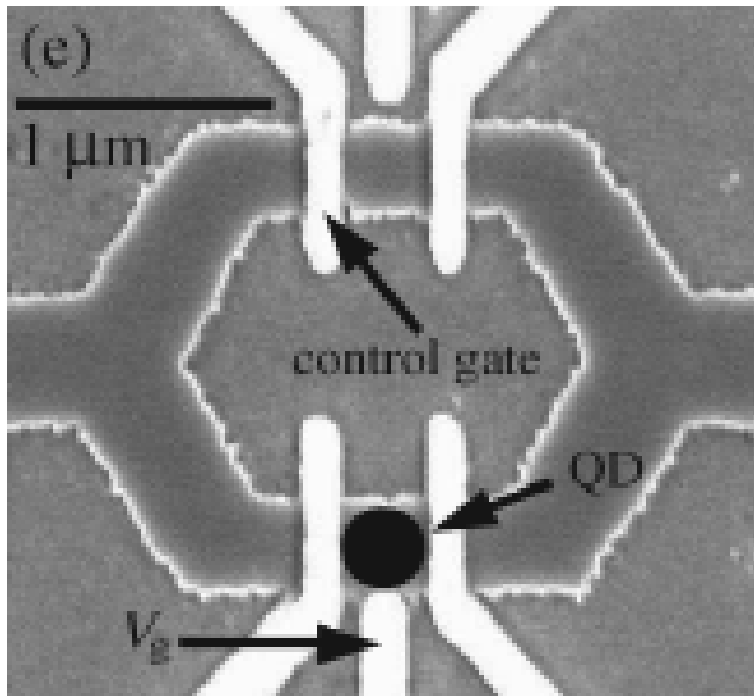
Пример АВ транзистора

J. Appl. Phys., Vol. 87, No. 11, 1 June 2000

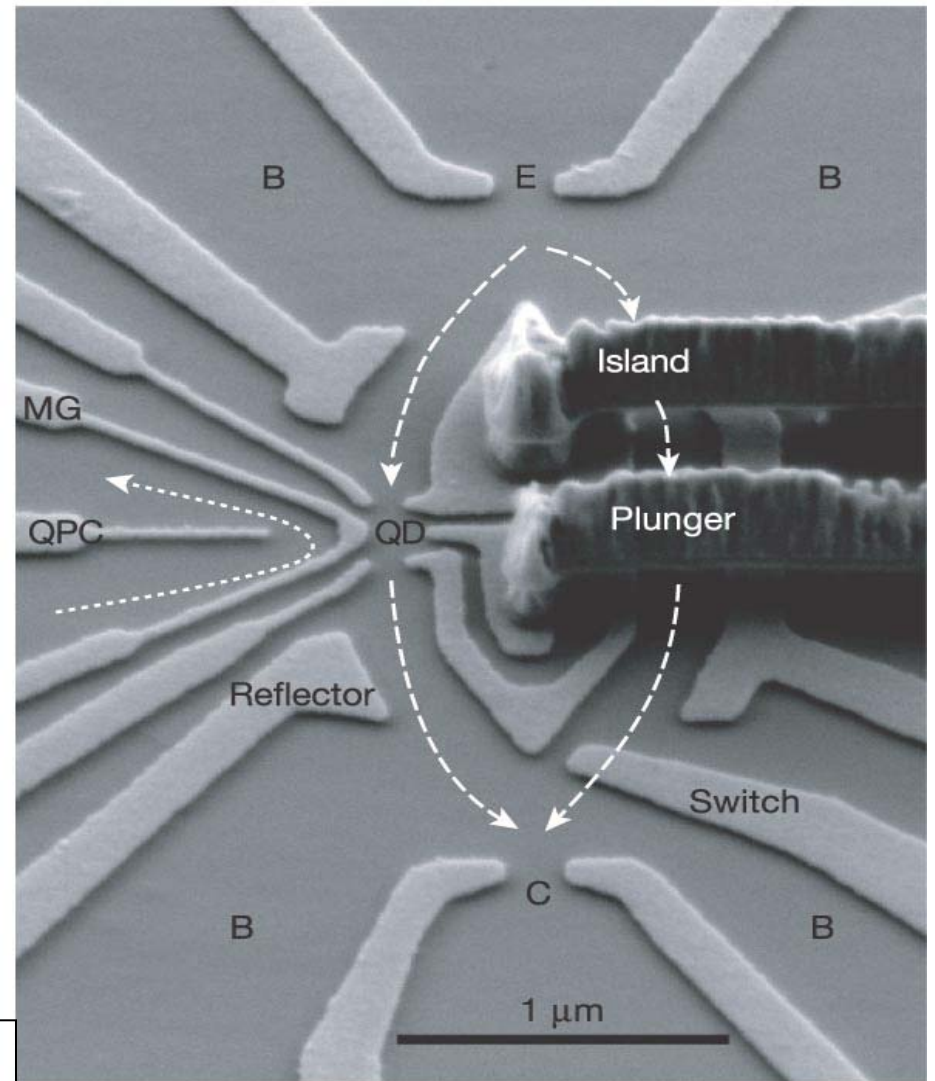


(a)

SEM micrographs of AB-rings with QD

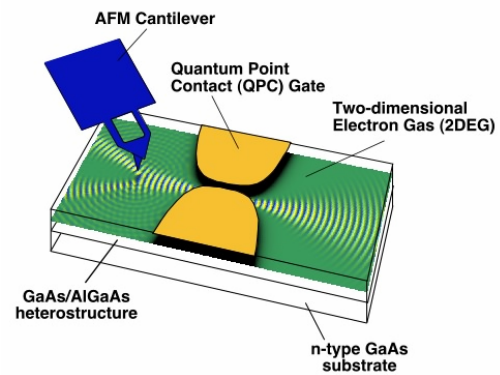


Hisashi Aikawa, Kensuke Kobayashi, Akira Sano, Shingo Katsumoto, and Yasuhiro Iye (PRL **92**, 176802, 2004)

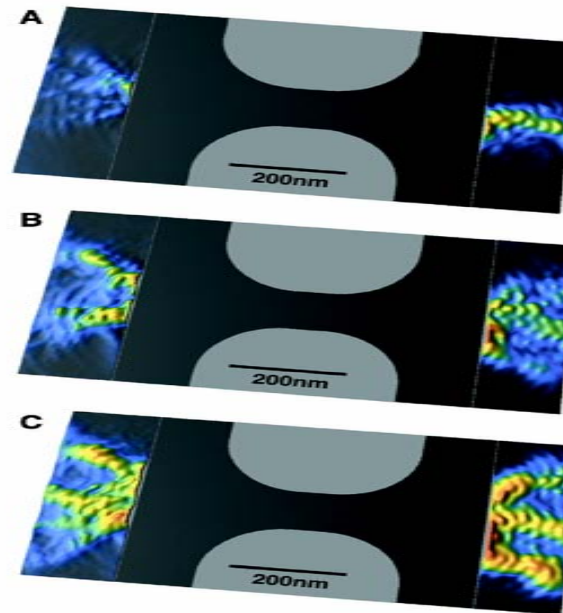
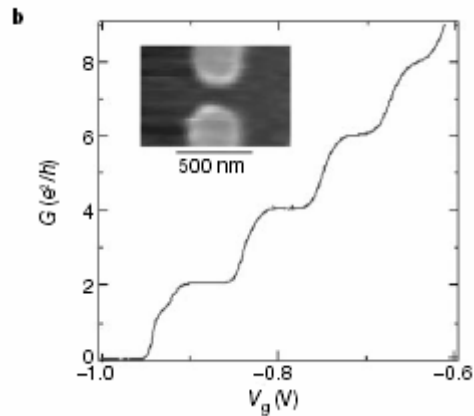


Avinun-Kalish, et.al. Nature **436**, 529 (2005)

Wave function in 2D electronic waveguides



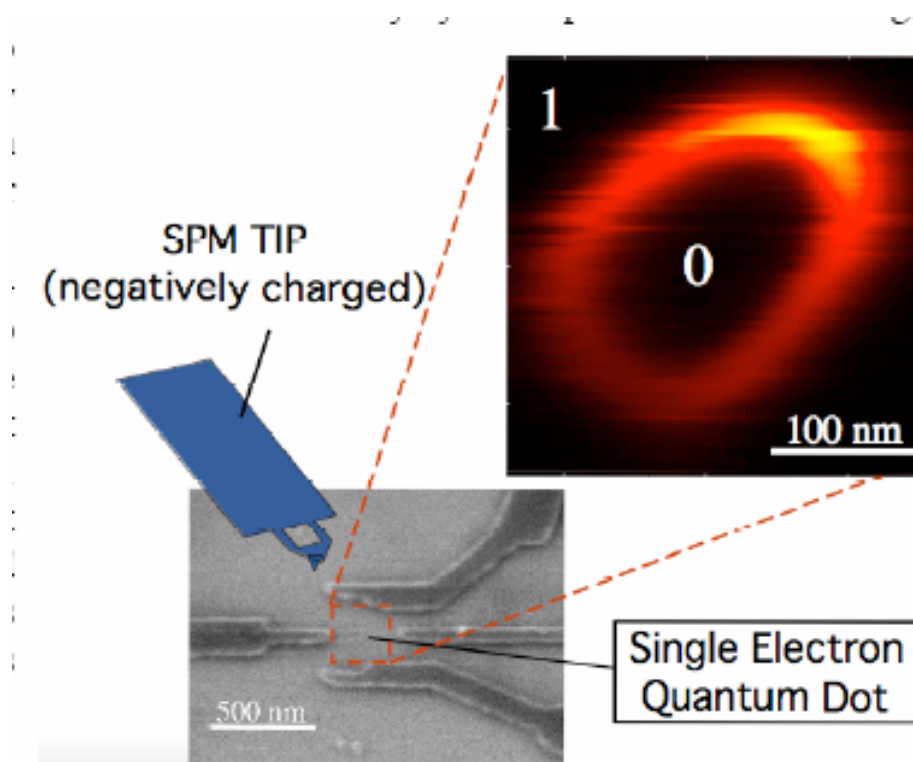
M. A. Topinka *et al.* *Science* **289**, 2323 (2000)
Nature, 410, 183 (2001).



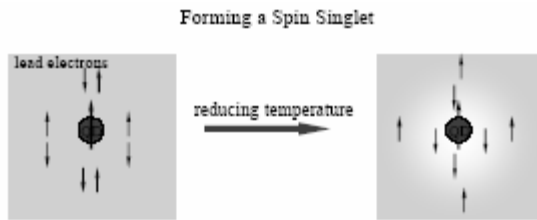
Imaging a Single Electron Quantum Dot:

A way to map and manipulate electrons in quantum structures

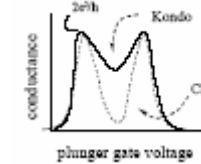
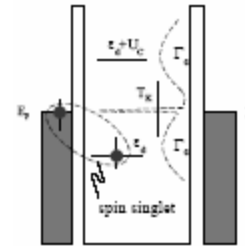
Robert Westervelt, Harvard University, ARO DAAD19-01-1-0659



Резонансные явления в наноструктурах

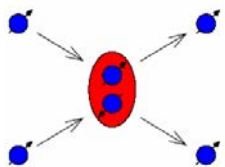


Kondo



the hyperfine interaction

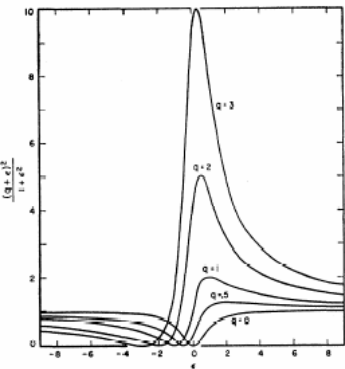
$$V_{\text{hf}} = \frac{a_{\text{hf}}}{\hbar^2} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S},$$



Feshbach

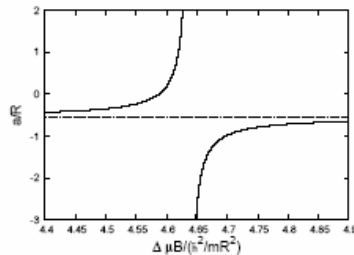


Fano



$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{m} + V_T(\mathbf{r}) - E & V_{\text{hf}} \\ V_{\text{hf}} & -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{m} + \Delta\mu B + V_S(\mathbf{r}) - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_T(\mathbf{r}) \\ \psi_S(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = 0$$

$$a = -\lim_{k \downarrow 0} \frac{\delta_0(k)}{k}$$

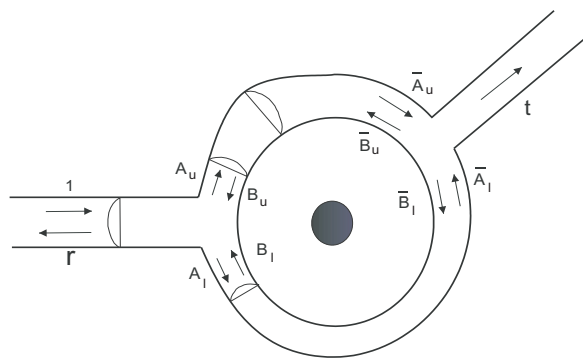


$$E_m = -\frac{\hbar^2}{ma^2}$$

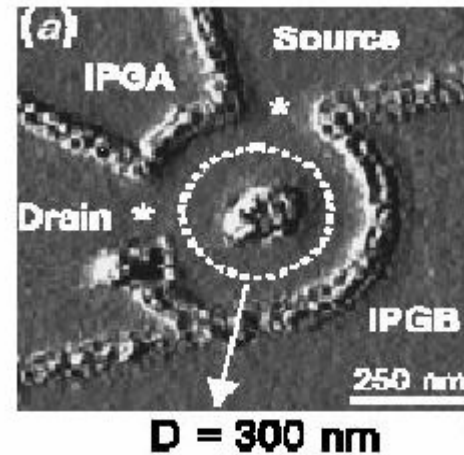
$$\sigma(\epsilon) = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}$$

Антисимметричный интерферометр

**E. R Hedin, R. M. Cosby,
A. M. Satanin, Y. S. Joe,**
J. Appl. Phys., **97**, 633712 (2005).

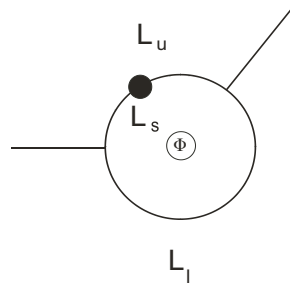


(a)

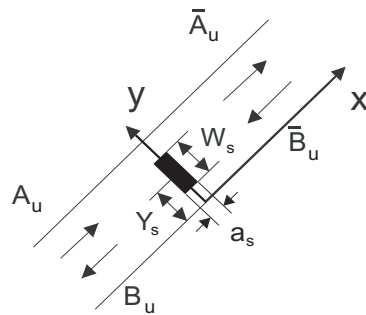


AFM image of an asymmetric ring structure, (upper channel slightly wider than the lower channel) which is modeled in the adjacent figures

Keyser, U. F. et. al. *Semicond. Sci. Tech.* 17 (2002) L22-24



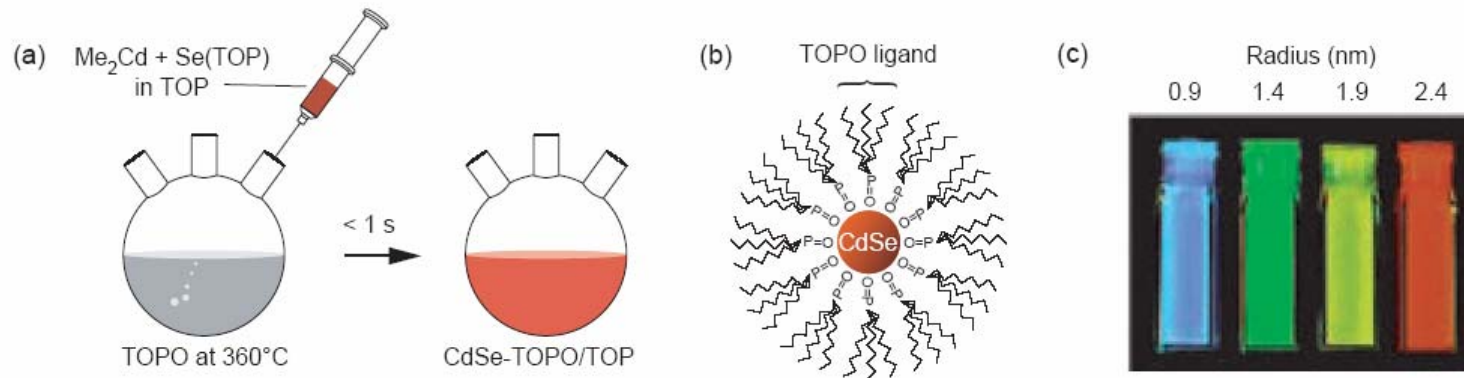
(b)



(c)

- a) Geometry of the asymmetric ring. The amplitude of the wave functions in the arms are shown.**
- b) The geometry of the ring is depicted schematically: the lengths of upper and lower arms are L_u and L_l respectively; L_s is the distance of the dot (attractive potential well) from the left (input) junction.**
- c) Schematic of the dot and the scattering amplitudes.**

The techniques of colloidal chemistry

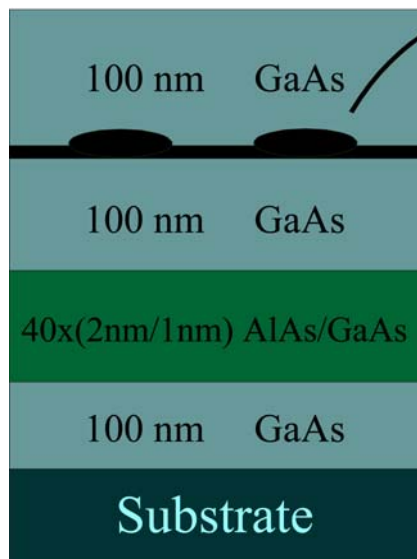
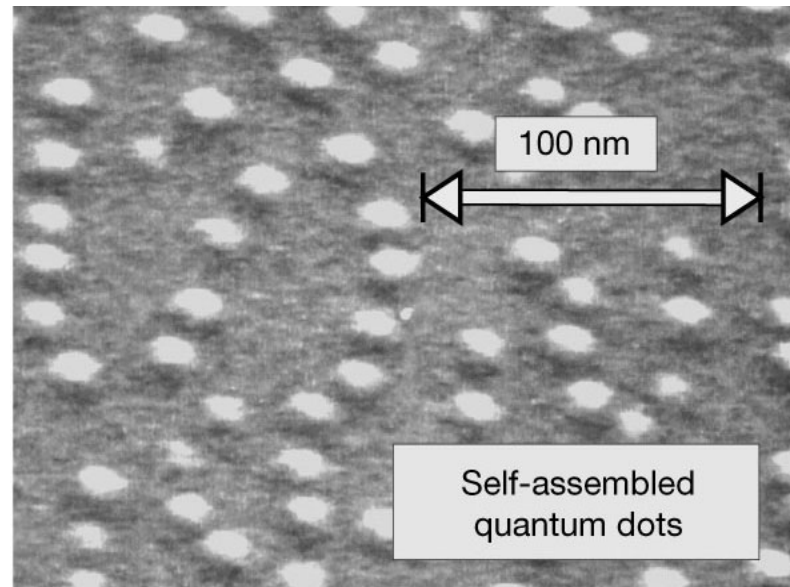


- The techniques of colloidal chemistry permit the routine creation of semiconductor nanocrystals or quantum dots, whose dimensions are much smaller than those that can be realized by using usual lithographic techniques.
- In the CdSe system, organometallic synthesis has achieved the ability to make nearly uniform nanocrystals (Murray, Norris, and Bawendi 1993).
- The sizes of such QD can be varied systematically to study quantum size effects or to make novel electronic or optical materials with tailored properties.

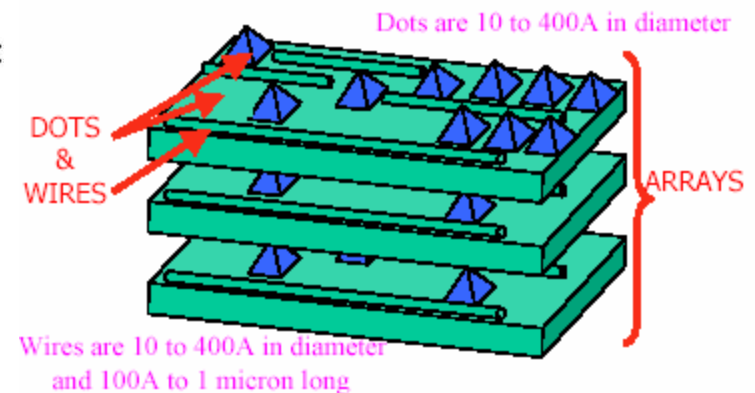
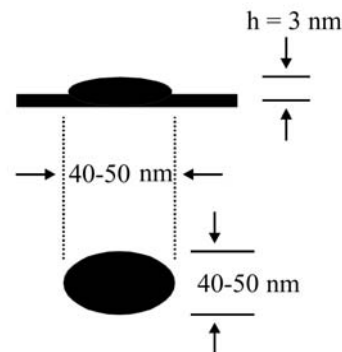
Quantum Dots –> Single dimensional QD systems–quantum wires –> Two-dimensional QD Array–Quantum films –> Three dimensional arrays–QD Solids

Self-assembled quantum dots

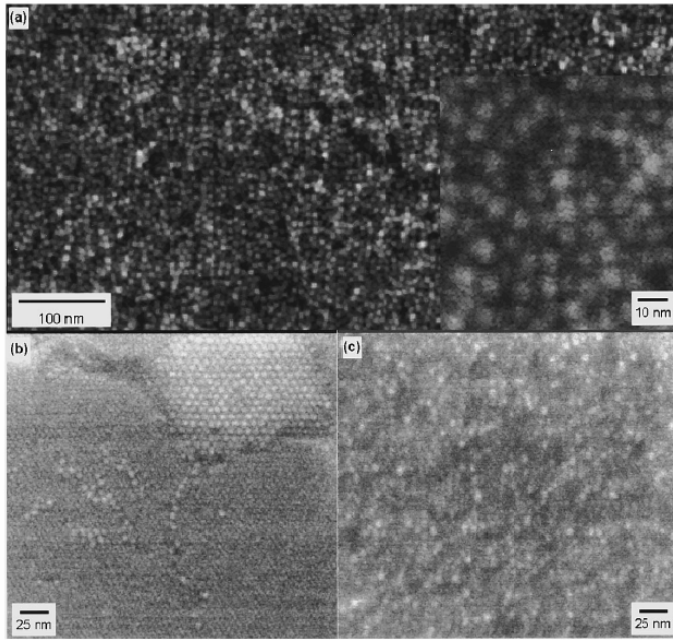
- Stranski – Krastanow islands
- MBE
- in-plane densities
 $\sim 10^{10} - 10^{11} \text{ cm}^{-2}$
- size variations < 10%
- sharp photoluminescence features, $\text{frequency} \propto \text{size}$



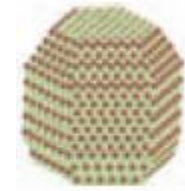
Typical 30Å PCI dimensions:



CdSe samples



Samples of QDs solids:



1) QD solids of **56-Å** CdSe QD's close packed in a glass solids. Each dot remains separated from neighboring dots by the organic capand with standard deviations between **3.5%** and **4.5%**. (C. R. Kagan et al., 1996).

2) Colloidal CdSe/ZnS QDs with mean radii **11–22 Å** and size dispersion **4%–9%** (S. Crooker et al. , 2002). Transmission electron microscopy indicates random (amorphous) close packing with average interdot surface-to-surface distances of **11 Å** (the length of TOPO – trioctylphosphine).

3) Mixed samples of small and large dots(close-packed solids):
The mixed CdSe QD solid prepared from **82% 37.5-Å** dots and **18% 57-Å** ; the **37.5-Å** dots and the **57-Å** dots and from **82% 38.5-Å** and **18% 62-Å** dots and with standard deviations between 3.5% and 4.5%.
(C. R. Kagan et al. 1996).

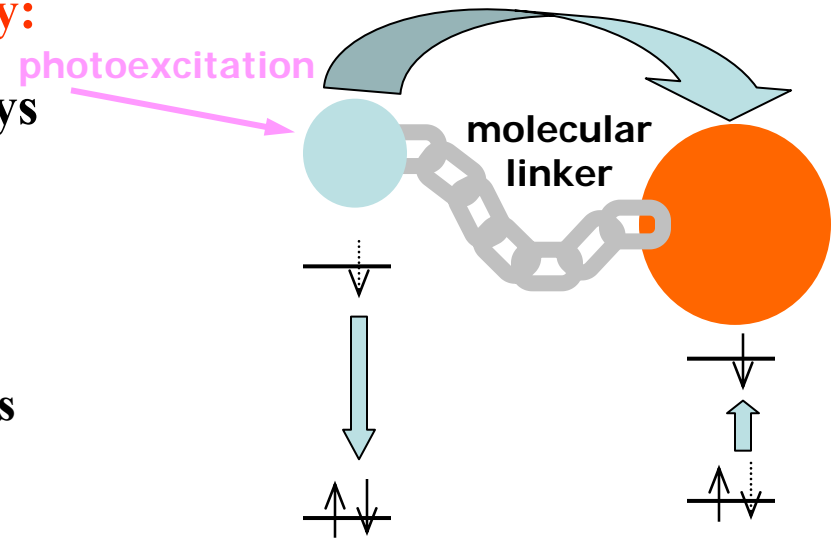
Applications of QD arrays

Conversion and storage of solar energy:

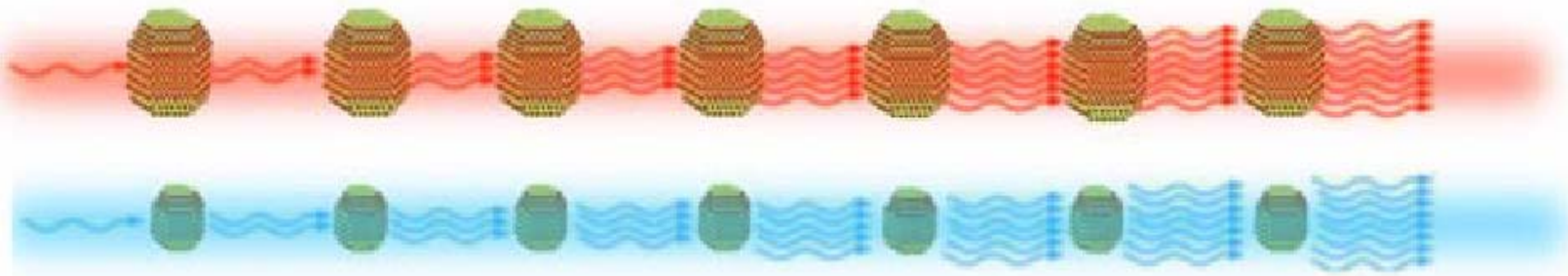
Electronic energy transfer in QD arrays

Applications:

- Ultra-high efficiency solar cells
- Luminescent chemical or biological sensors
- Nanocrystal Quantum-dot lasing

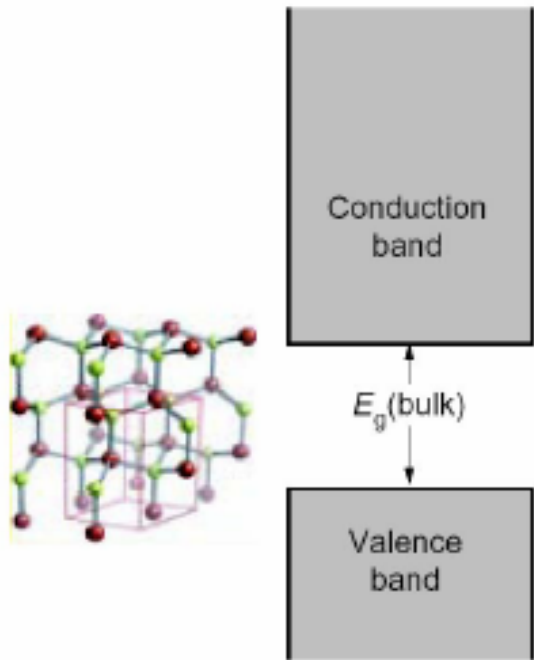


High surface area of NQD: light-collection efficiency

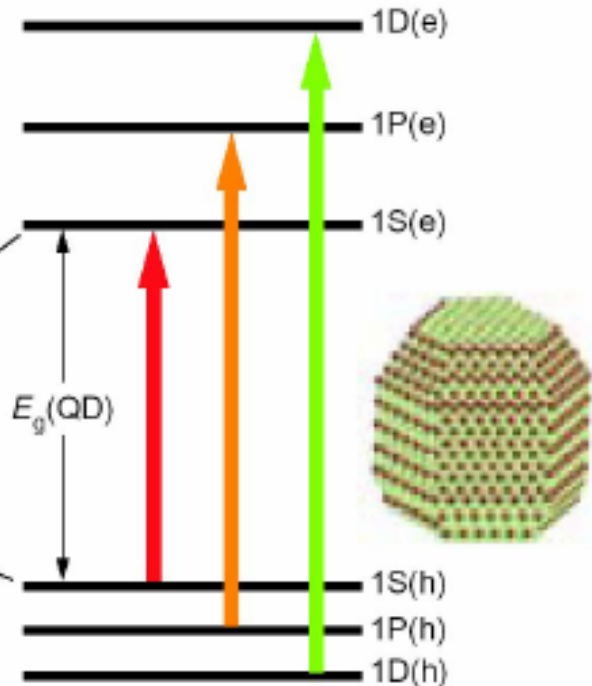


Optical properties of semiconductor NCs

(a) CdSe Bulk Semiconductor



(b) CdSe Quantum Dot (QD)



(c)

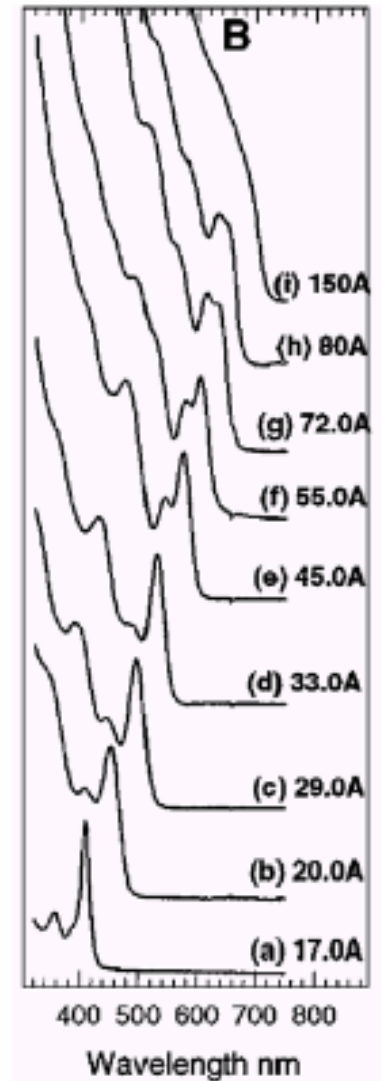
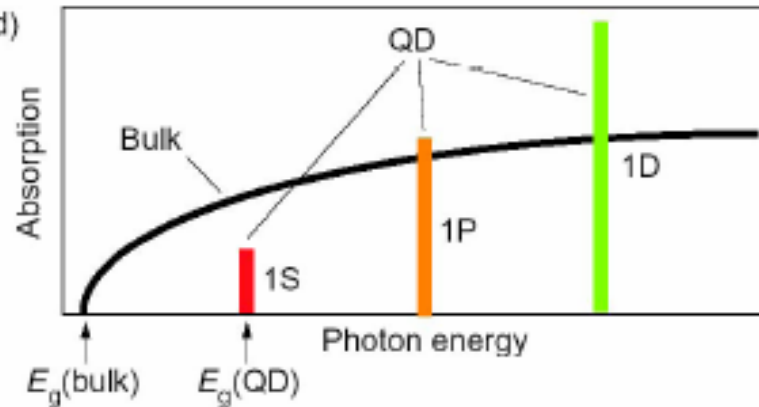
$$E_g(\text{QD}) = E_{g0} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{eh} R^2}$$

$$m_{eh} = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$$

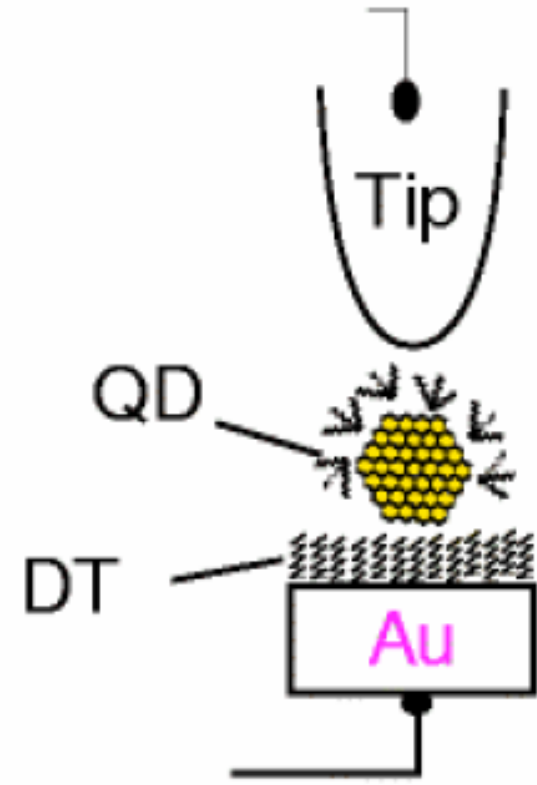
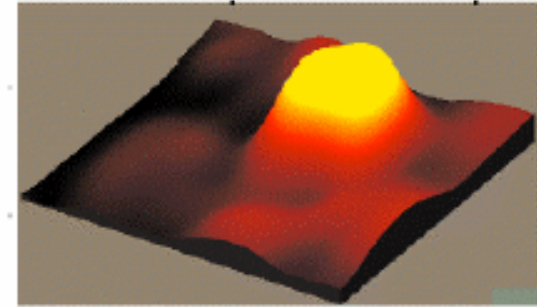
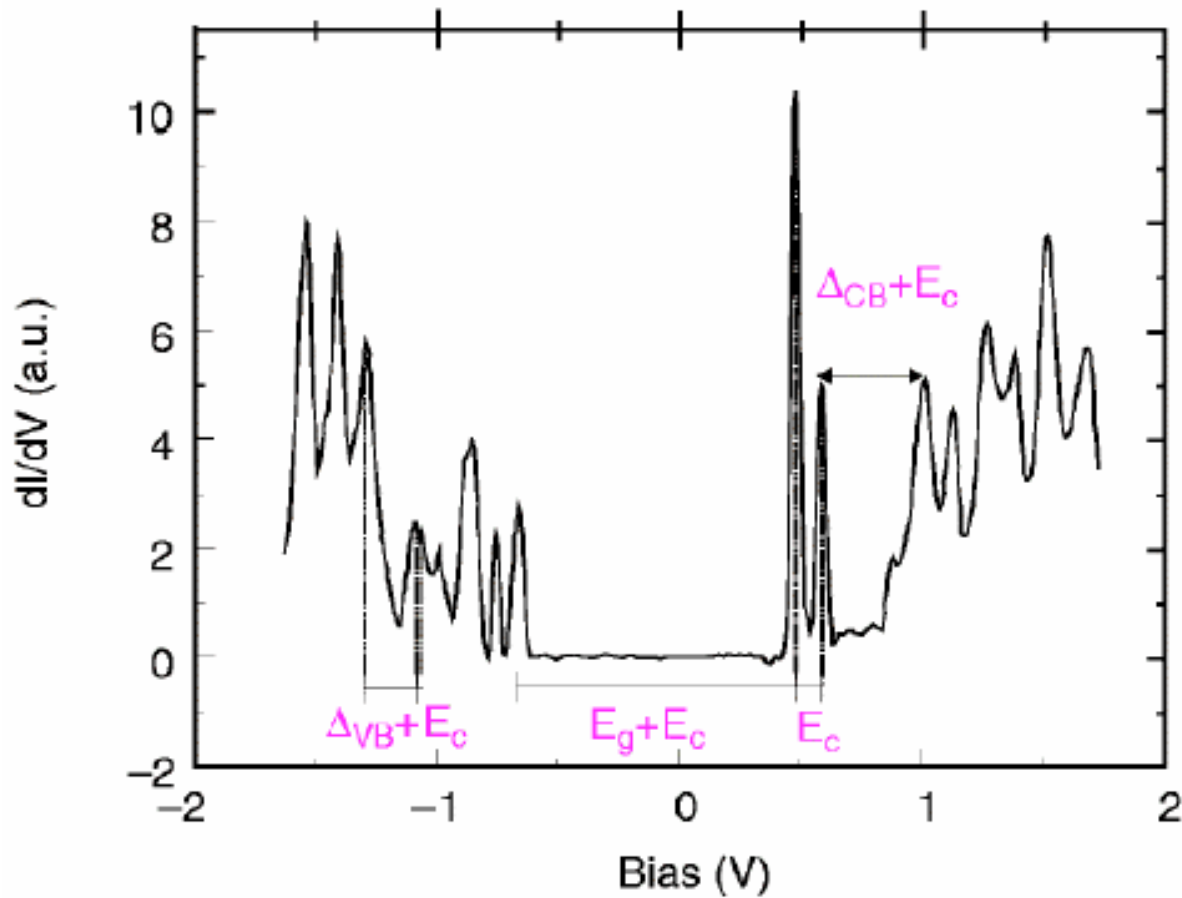
m_e = effective electron mass

m_h = effective hole mass

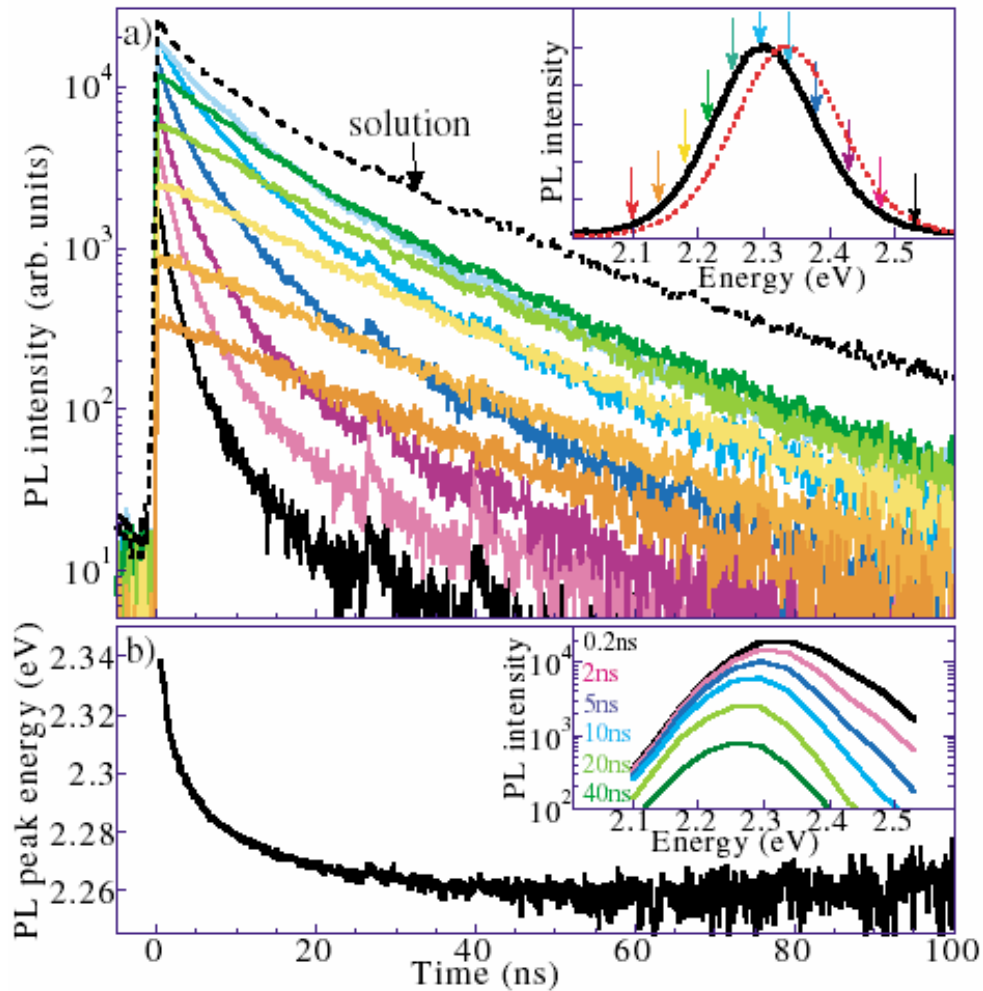
(d)



Tunnelling spectroscopy of quantum dots:



PL decays from 12.4 Å CdSe/ZnS QD

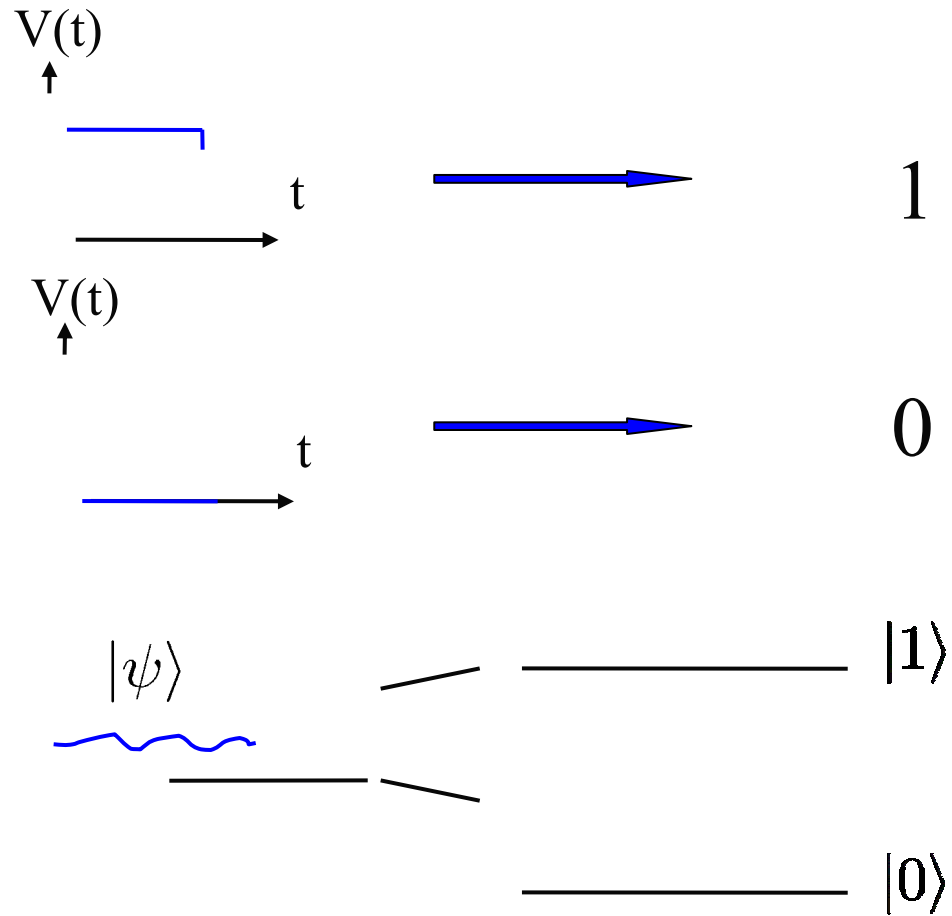


(a) PL decays from a dense film of monodisperse $R=12.4\text{\AA}/9\text{\AA}$ CdSe/ZnS NQDs at the energies specified in the inset. Inset: cw PL spectra from film (solid) and original solution (dashed).

(b) Dynamic redshift of the peak emission. Inset: PL spectra at the specified times.

S. Crooker et al. Phys. Rev. Lett. 89, 186802 (2002).

Bit & Quantum bits (qubit)



$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

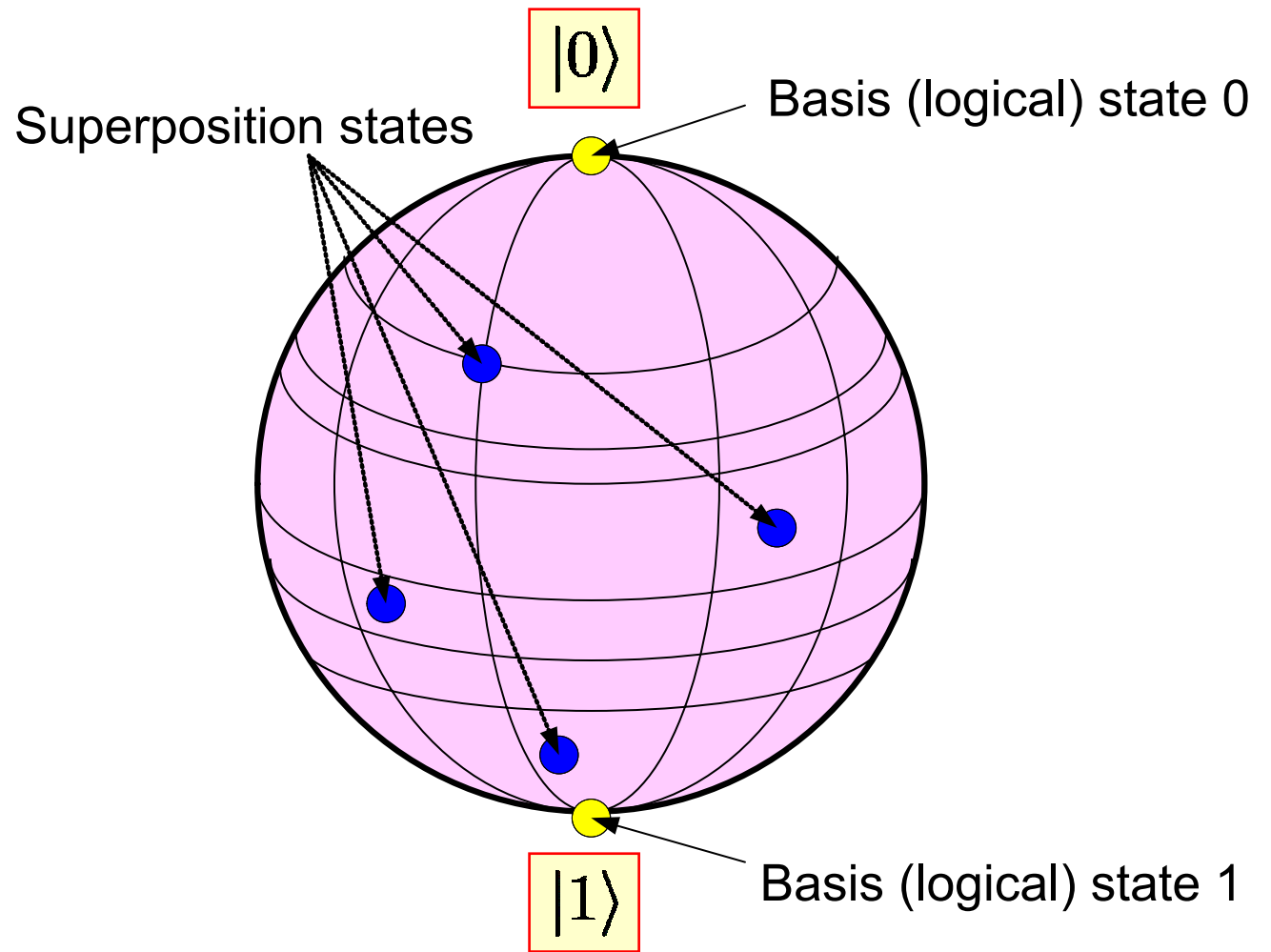
Bit & Quantum bits (qubit)

0



1

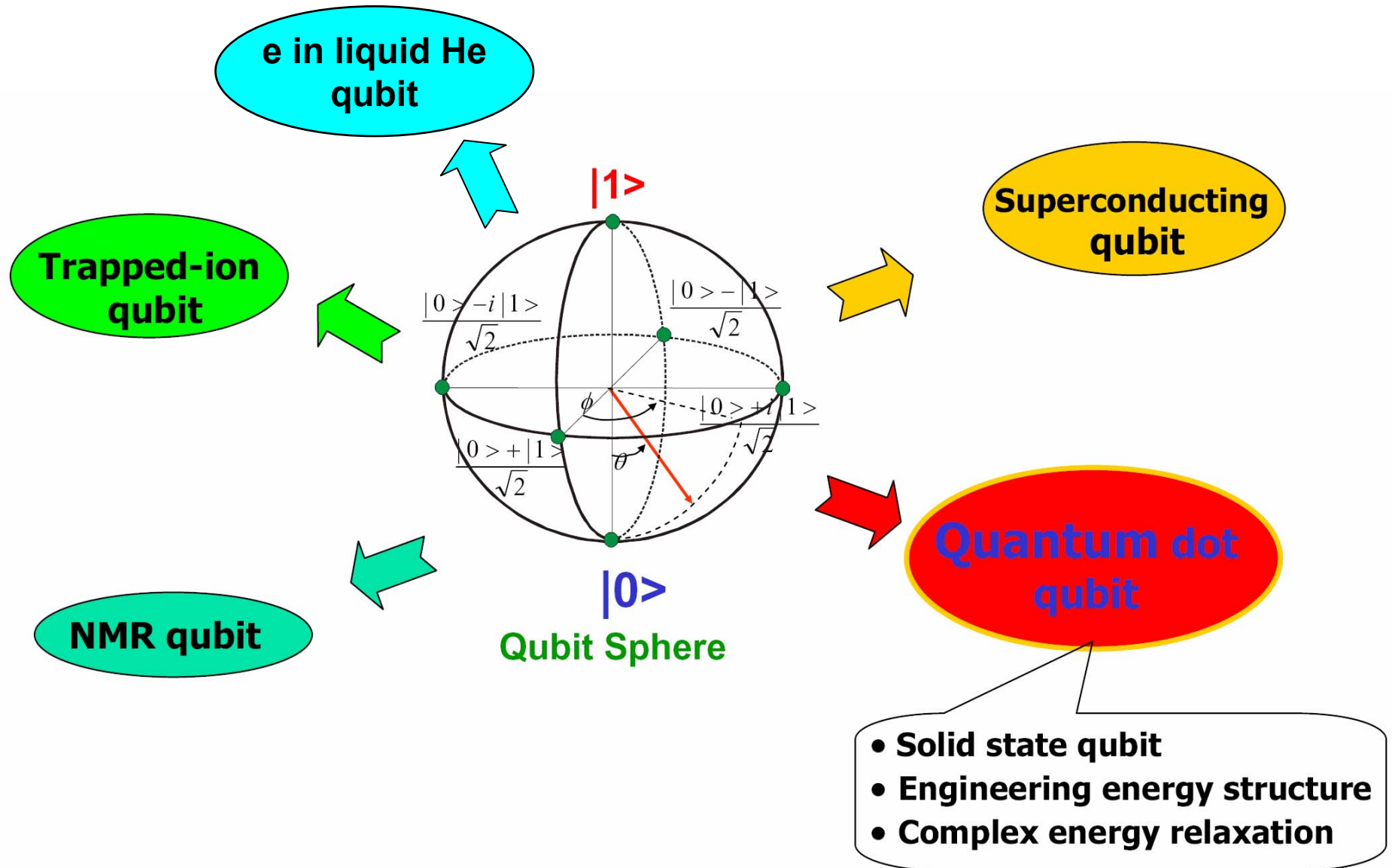
(a) One bit



(b) One qubit

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

Others qubit



**“There’s Plenty of Room at the
Bottom: An Invitation to Enter
a New Field of Physics”**

Richard Feynman



Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Полупроводники

А.М.Сатанин

*ННГУ им. Н.И.Лобачевского (Национальный
исследовательский университет),
Лаборатория «Теория наноструктур» НИФТИ, Н.Новгород,
Россия*

Полупроводники

Периодическая таблица «полупроводниковообразующих» элементов

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	0	
H ¹ 1s								He ² 1s ²	
Li ³ 2s	Be ⁴ 2s ²	B ⁵ 2s ² 2p	C ⁶ 2s ² 2p ²	N ⁷ 2s ² 2p ³	O ⁸ 2s ² 2p ⁴	F ⁹ 2s ² 2p ⁵		Ne ¹⁰ 2s ² 2p ⁶	
Na ¹¹ 3s	Mg ¹² 3s ²	Al ¹³ 3s ² 3p	Si ¹⁴ 3s ² 3p ²	P ¹⁵ 3s ² 3p ³	S ¹⁶ 3s ² 3p ⁴	Cl ¹⁷ 3s ² 3p ⁵		Ar ¹⁸ 3s ² 3p ⁶	
K ¹⁹ 4s	Ca ²⁰ 4s ²	Sc ²¹ 4s ² 3d	Ti ²² 4s ² 3d ²	V ²³ 4s ² 3d ³	Cr ²⁴ 4s ² 3d ⁴	Mn ²⁵ 4s ² 3d ⁵	Fe ²⁶ 4s ² 3d ⁶	Co ²⁷ 4s ² 3d ⁷	Ni ²⁸ 4s ² 3d ⁸
Cu ²⁹ 4s ³ 3d ¹⁰	Zn ³⁰ 4s ² 3d ¹⁰	Ga ³¹ 4s ² 4p	Ge ³² 4s ² 4p ²	As ³³ 4s ² 4p ³	Se ³⁴ 4s ² 4p ⁴	Br ³⁵ 4s ² 4p ⁵		Kr ³⁶ 4s ² 4p ⁶	
Ru ³⁷ 5s	Sr ³⁸ 5s ²	Y ³⁹ 5s ² 4d	Zr ⁴⁰ 5s ² 4d ²	Nb ⁴¹ 5s ² 4d ⁴	Mo ⁴² 5s ² 4d ⁵	Tc ⁴³ 5s ² 4d ⁵	Ru ⁴⁴ 5s ² 4d ⁷	Rh ⁴⁵ 5s ² 4d ⁸	Pd ⁴⁶ 4d ¹⁰
Ag ⁴⁷ 5s ² 4d ¹⁰	Cd ⁴⁸ 5s ²	In ⁴⁹ 5s ² 5p ¹	Sn ⁵⁰ 5s ² 5p ²	Sb ⁵¹ 5s ² 5p ³	Te ⁵² 5s ² 5p ⁴	I ⁵³ 5s ² 5p ⁵		Xe ⁵⁴ 5s ² 5p ⁶	
Cs ⁵⁵ 6s	Ba ⁵⁶ 6s ²	La ⁵⁷⁻⁷¹	Hf ⁷² 6s ² 5d ² 4f ¹⁴	Ta ⁷³ 6s ² 5d ⁵	W ⁷⁴ 6s ² 5d ⁶	Re ⁷⁵ 6s ² 5d ⁵	Os ⁷⁶ 6s ² 5d ⁸	Ir ⁷⁷ 5d ⁹	Pt ⁷⁸ 6s ² 5d ⁹
Au ⁷⁹ 6s ² 5d ¹⁰	Hg ⁸⁰ 6s ² 5d ¹⁰	Tl ⁸¹ 6s ² 6p	Pb ⁸² 6s ² 6p ²	Bi ⁸³ 6s ² 6p ³	Po ⁸⁴ 6s ² 6p ⁴	At ⁸⁵ 6s ² 6p ⁵		Rn ⁸⁶ 6s ² 6p ⁶	

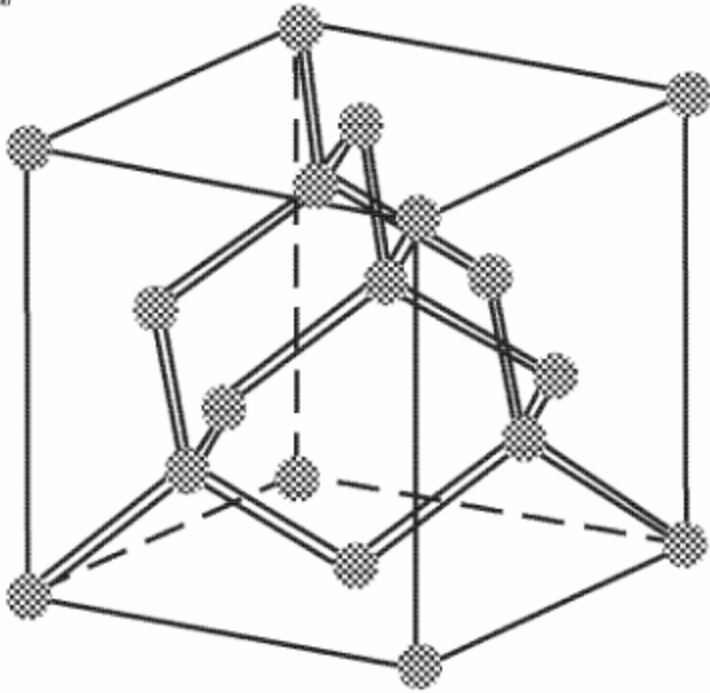
Параметры полупроводника

	Ge	GaAs	InP	InAs	GaSb	InSb	CdTe
E_g [eV]	0.89	1.55	1.34	0.45	0.81	0.24	1.59
m_c^*/m (exp)	0.041	0.067	0.073	0.026	0.047	0.015	0.11
m_c^*/m ((2.44))	0.04	0.078	0.067	0.023	0.04	0.012	0.08

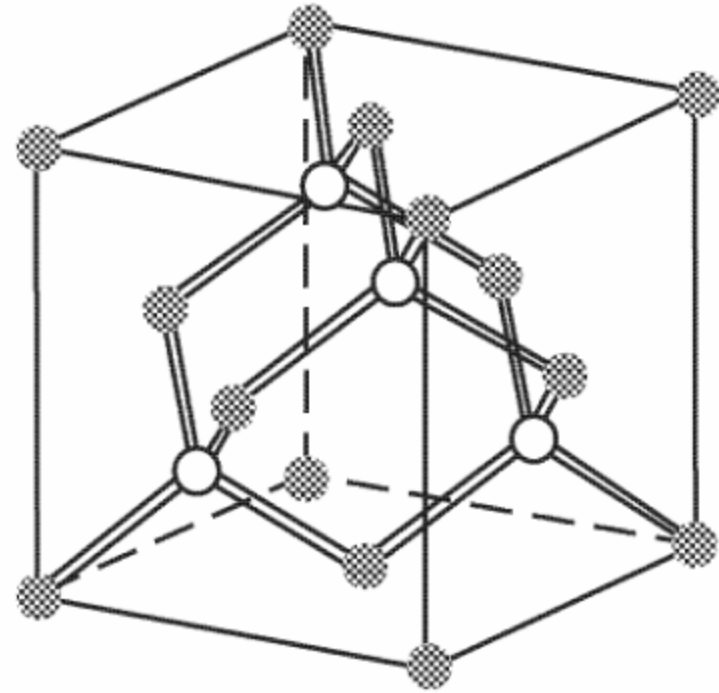
	A	B	$ C ^2$	Δ_0 [eV]	m_{hh}/m_0		m_{lh}/m_0		m_{so}/m_0	
					exp	th	exp	th	exp	th
Si	-4.25	-0.63	24	0.044	0.54	0.45	0.15	0.14	0.23	0.24
Ge	-13.4	-8.5	173	0.295	0.34	0.43	0.043	0.041	0.095	0.1
GaAs	-7.0	-4.5	38	0.341	0.53	0.78	0.08	0.08	0.15	0.17
InP	-5.04	-3.1	41	0.11	0.58	0.53	0.12	0.12	0.12	0.2
InAs	-20.4	-16.6	167	0.38	0.4	0.4	0.026	0.026	0.14	0.10
GaSb	-13.3	-8.8	230	0.75	0.8	0.9	0.05	0.04	—	0.15
InSb	-40.1	-36.2	492	0.81	0.42	0.48	0.016	0.013	—	0.12
GaP	-4.05	-0.98	16	0.08	0.57	0.5	0.18	0.17	—	0.25

Diamond and zinc blende

a



● C



● Zn

○ S

Решетка алмаза

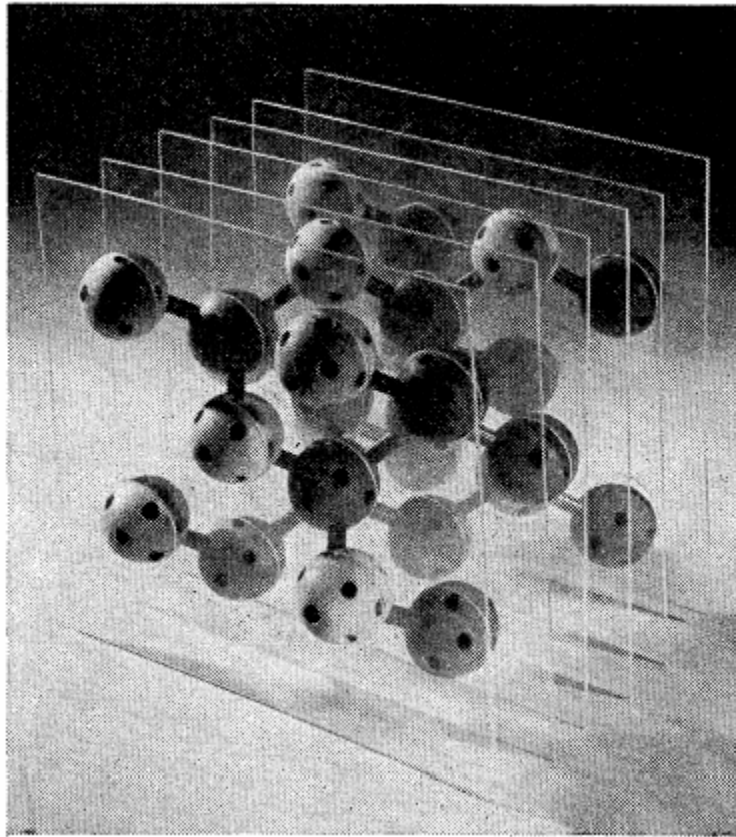
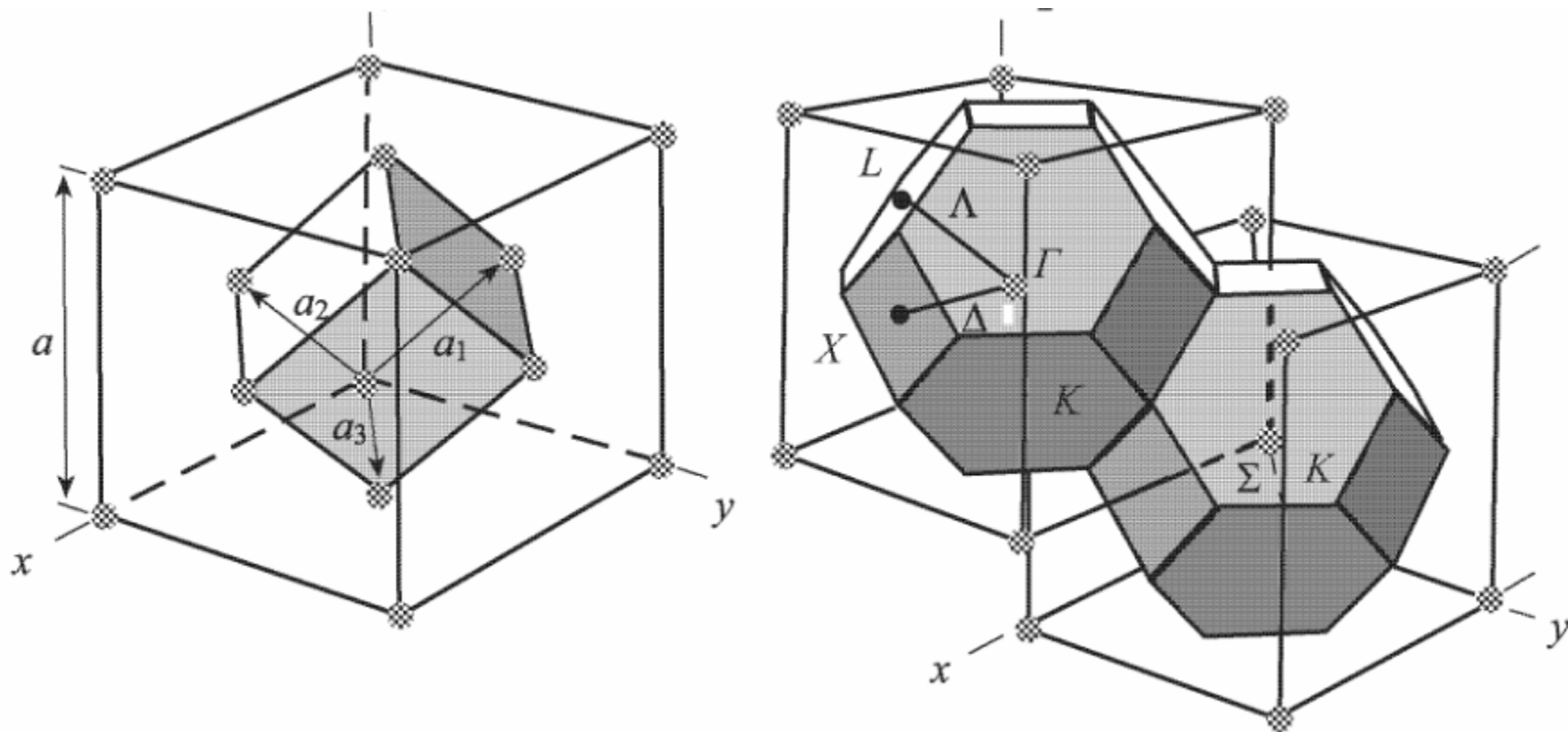


FIG. 3. Crystal model of diamond-type lattice.

Прямая и обратная решетки



Ячейка Вигнера-Зейтца

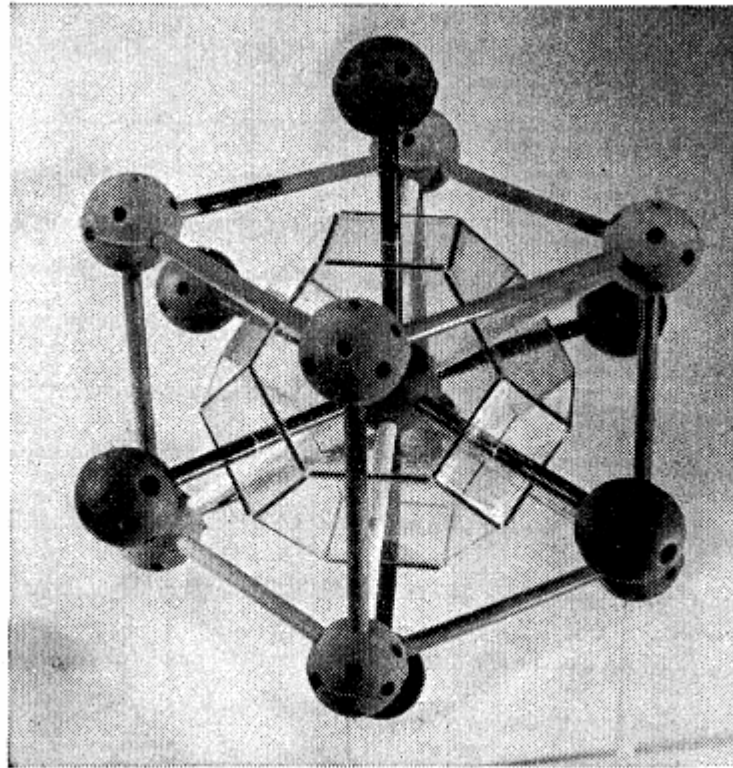


FIG. 1. Crystal model showing reduced zone.

Первая зона Бриллюэна

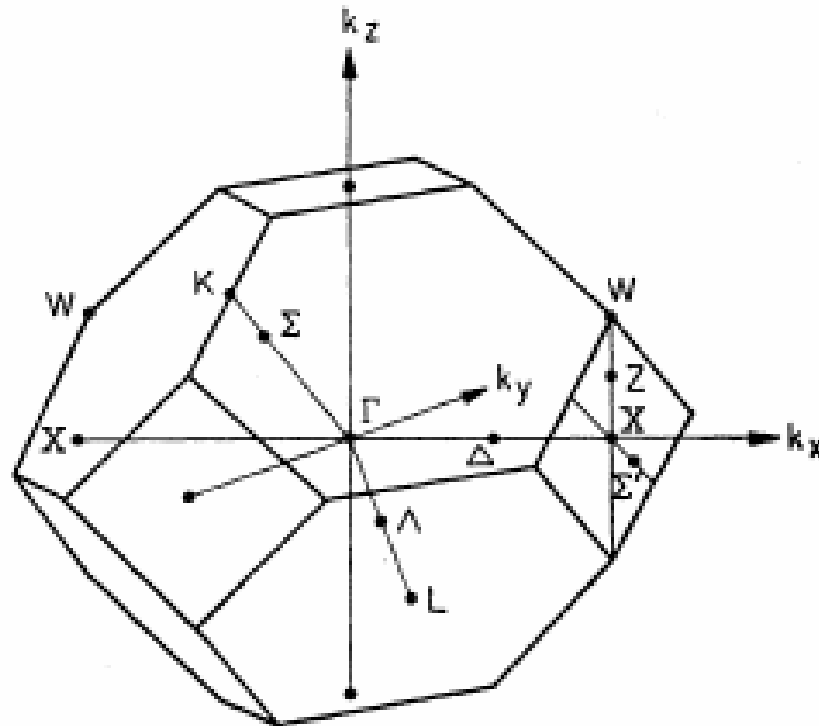
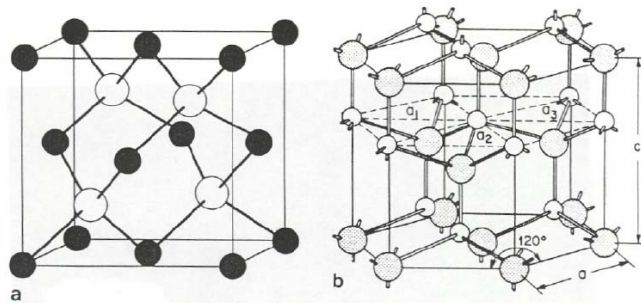
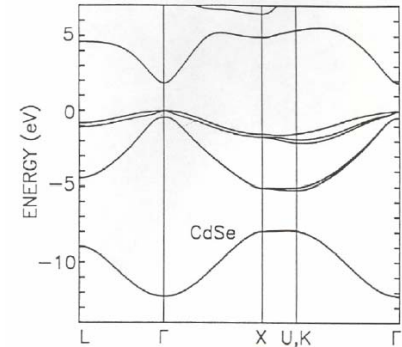
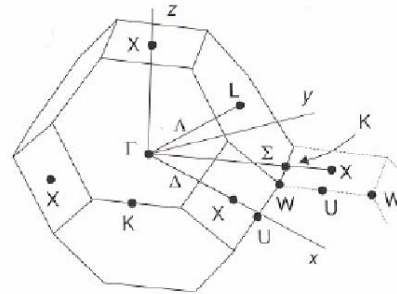


FIG. 1. The first Brillouin zone for a face centered cubic, diamond, and zinc blende structure. Points and lines of symmetry are indicated using the notation of reference 1.

The bulk band properties of semiconductors with cubic or zinc blende lattice structure: CdSe

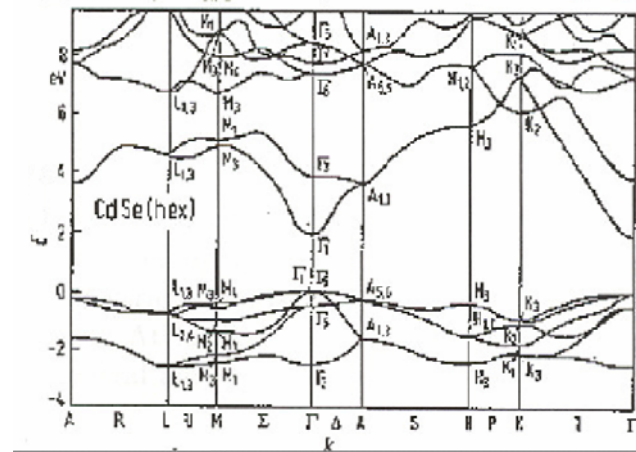
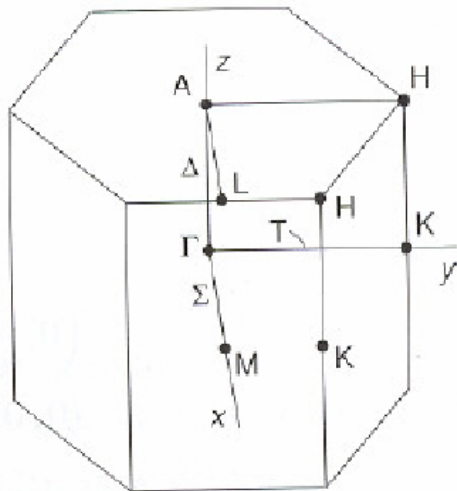


Atomic positions in (a) zinc blende and (b) wurtzite crystal (Sze, 1981).



Calculated band structure energy in eV versus crystal wave vector of CdSe along several symmetry

Atomic position in (a) zinc blende and (b) wurtzite crystal



Приближение свободных электронов

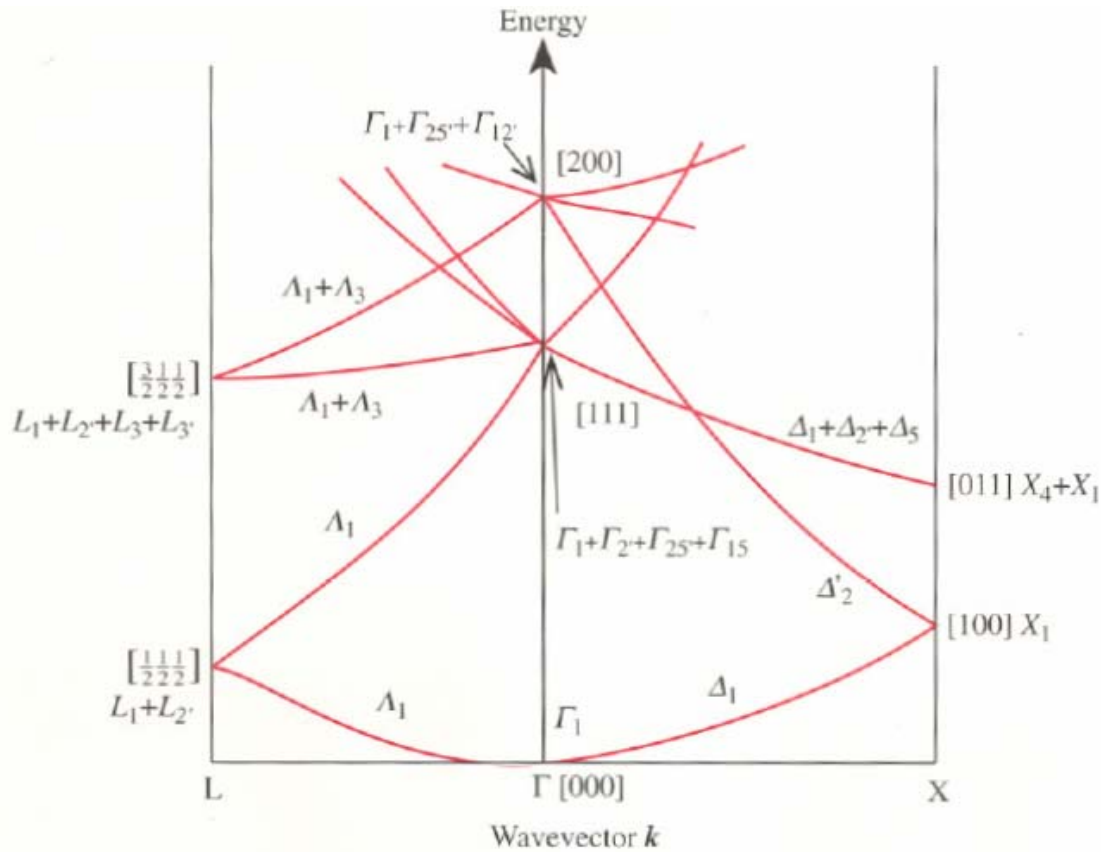


Fig. 2.9. Band structure of nearly free electrons for a diamond-type crystal in the reduced zone scheme

Si

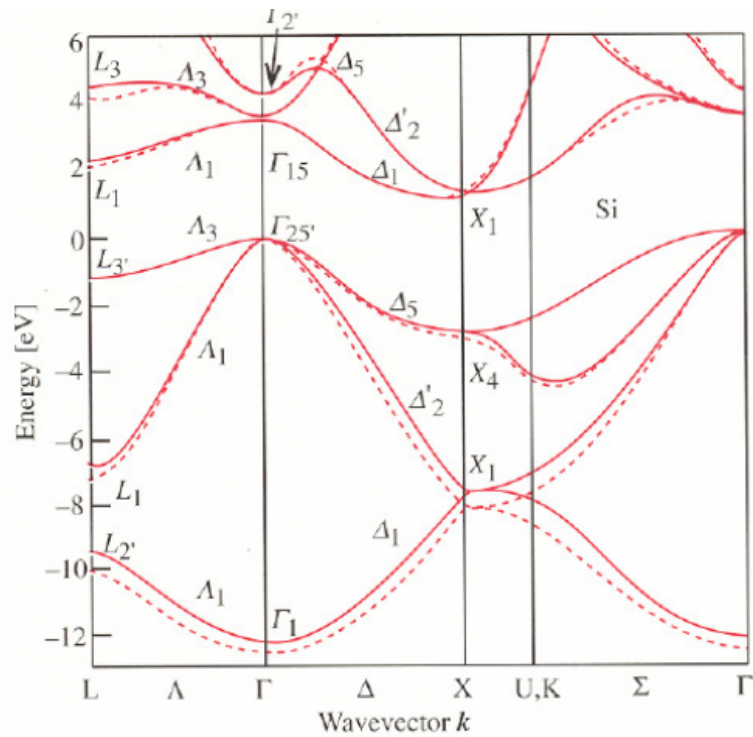
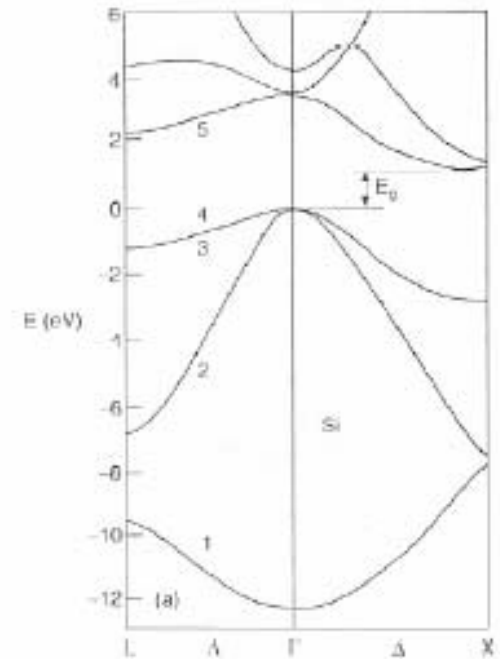


Fig. 2.10. Electronic band structure of Si calculated by the pseudopotential technique. The solid and the dotted lines represent calculations with a nonlocal and a local pseudopotential, respectively. [Ref. 2.6, p. 81]



Ge

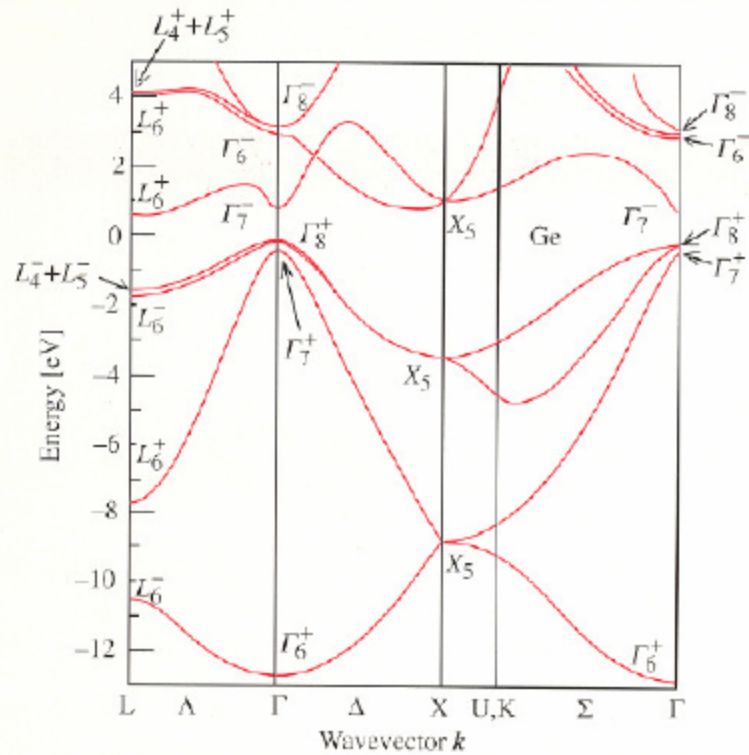
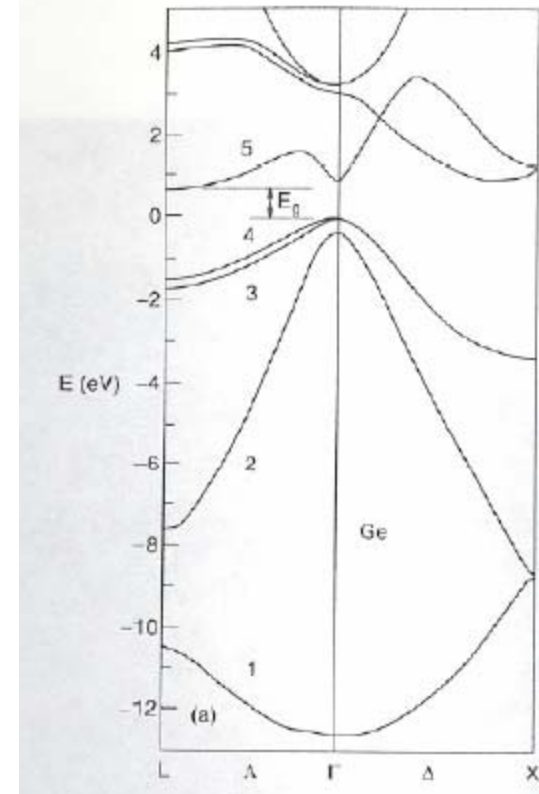


Fig. 2.13. Electronic band structure of Ge calculated by the pseudopotential technique. The energy at the top of the filled valence bands has been taken to be zero. Note that, unlike in Fig. 2.10, the double group symmetry notation is used [Ref. 2.6, p. 92]



GaAs

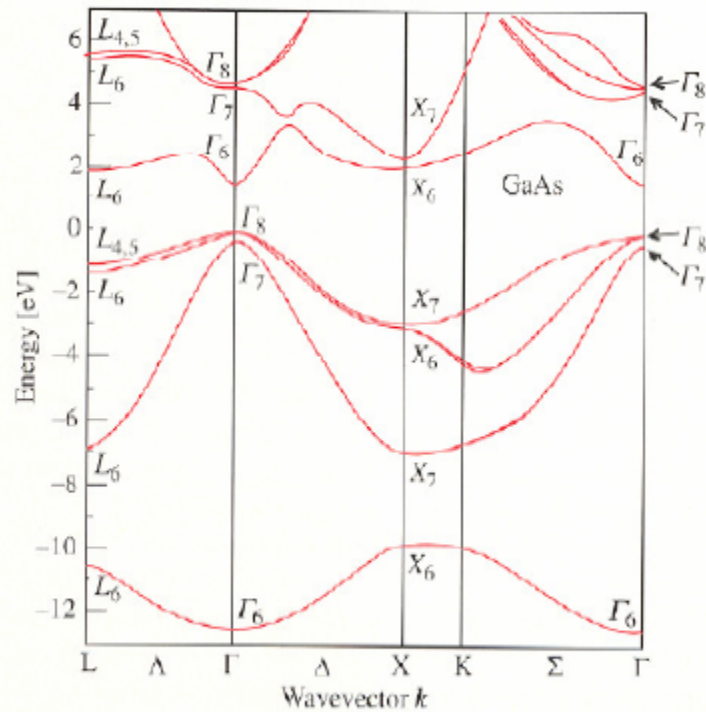
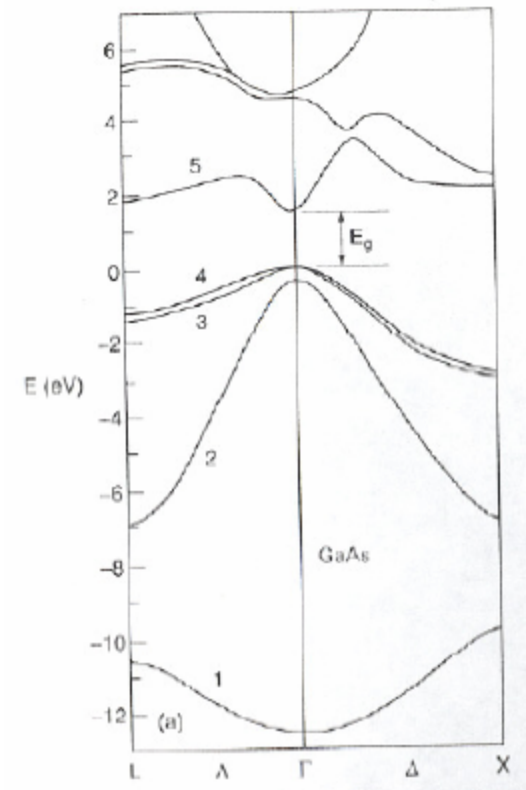
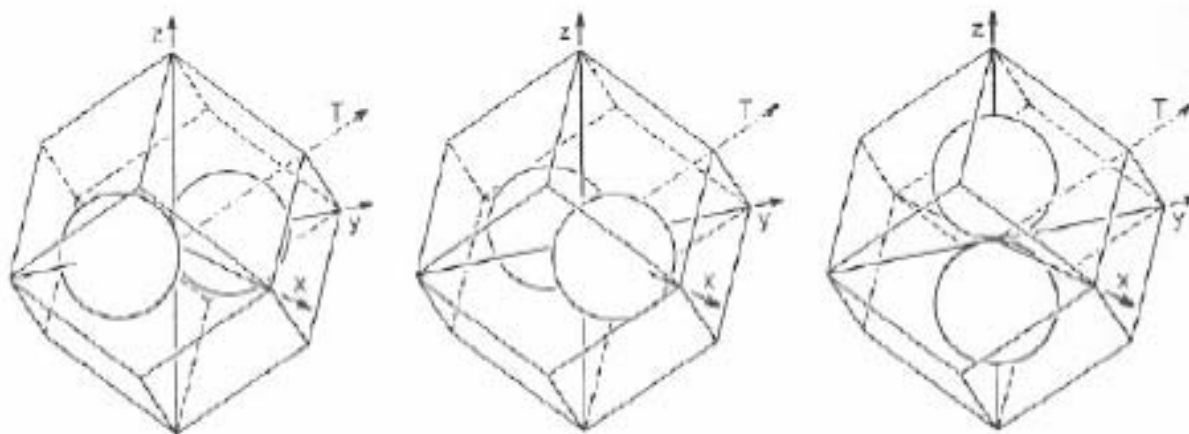


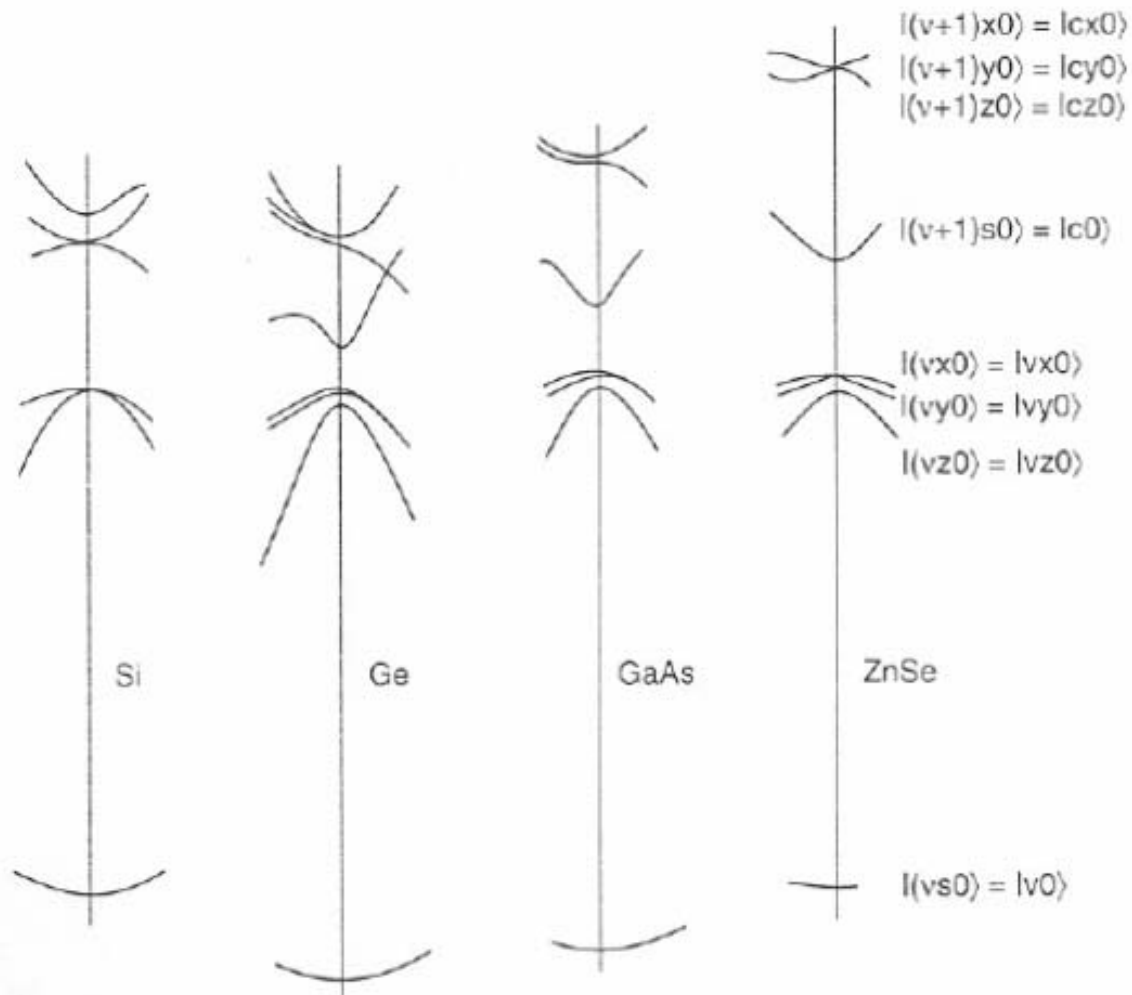
Fig. 2.14. Electronic band structure of GaAs calculated by the pseudopotential technique. The energy scale and notation (double group) are similar to those for Fig. 2.13 [Ref. 2.6, p. 103]



p-орбитали



Зоны полупроводников



Электронны. Приближение эффективной массы

PHYSICAL REVIEW

VOLUME 97, NUMBER 4

FEBRUARY 15, 1955

Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields

J. M. LUTTINGER* AND W. KOHN†
Bell Telephone Laboratories, Murray Hill, New Jersey

II. SIMPLE BANDS

$$H_0\psi_{nk} = \epsilon_n(\mathbf{k})\psi_{nk}. \quad (\text{II.1})$$

To find the impurity state wave function ψ we must solve the Schrödinger equation

$$(H_0 + U)\psi = e\psi. \quad (\text{II.2})$$

Rather than taking the Bloch functions or Wannier functions corresponding to H_0 , as has been done previously,¹ we choose a set as follows. Write the Bloch functions as

$$\psi_{nk} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} u_{nkj} \quad (\text{II.3})$$

Функции Кона-Латтинжера

$$\chi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n0}. \quad (\text{II.4})$$

We assert that these form a complete orthonormal set if the $\psi_{n\mathbf{k}}$ do. Imagine any function $f(\mathbf{r})$ expanded in the $\psi_{n\mathbf{k}}$:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}} = \sum_n \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}. \quad (\text{II.5})$$

functions. Therefore

$$u_{n\mathbf{k}} = \sum_{n'} b_{nn'}(\mathbf{k}) u_{n'0}, \quad (\text{II.6})$$

which yields, when substituted in (II.5), the result

$$f(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) \chi_{n\mathbf{k}},$$

with

$$g_n(\mathbf{k}) = \sum_{n'} g_{n'}(\mathbf{k}) b_{n'n}(\mathbf{k}).$$

$$\begin{aligned} \langle n\mathbf{k} | U | n'\mathbf{k}' \rangle &= (2\pi)^3 B_0^{nn'} \mathfrak{u}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \\ &= \delta_{nn'} \mathfrak{u}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (\text{II.21})$$

From (II.16) and (II.21), (II.14) becomes

$$\begin{aligned} \left(\epsilon_n + \frac{k^2}{2m} \right) A_n(\mathbf{k}) + \sum_{n' \neq n} \frac{k_\alpha \hat{p}_{nn'}^\alpha}{m} A_{n'}(\mathbf{k}) \\ + \int d\mathbf{k}' \mathfrak{u}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') A_n(\mathbf{k}') = \epsilon A_n(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (\text{II.22})$$

$$\frac{2}{m} \sum_{n'' \neq n} \frac{\hat{p}_{nn''}^\alpha(\mathbf{k}) \hat{p}_{n''n}^\beta(\mathbf{k})}{\epsilon_{n''}(\mathbf{k}) - \epsilon_n(\mathbf{k})} = \delta_{\alpha\beta} - m \frac{\partial^2 \epsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}, \quad (\text{II.34})$$

for $\mathbf{k}=0$. Therefore, we may write

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) B_n(\mathbf{k}) + \int \mathfrak{u}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') B_n(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' = \epsilon B_n(\mathbf{k}), \quad (\text{II.35})$$

$$\begin{aligned} \left(\epsilon_n + \frac{k^2}{2m} + \frac{k_\alpha k_\beta}{m^2} \sum_{n'' \neq n} \frac{\hat{p}_{nn''}^\alpha \hat{p}_{n''n}^\beta}{\omega_{nn''}} \right) B_n(\mathbf{k}) \\ + \int \mathfrak{u}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') B_n(\mathbf{k}') d\mathbf{k} = \epsilon B_n(\mathbf{k}'). \end{aligned}$$

$$F_n(\mathbf{r}) = \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} B_n(\mathbf{k}) d\mathbf{k},$$

$$\epsilon_n(-i\nabla) F_n(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') F_n(\mathbf{r}') = \epsilon F_n(\mathbf{r}),$$

where

$$\Delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')},$$

$$[\epsilon_n(-i\nabla) + U(\mathbf{r})] F_n(\mathbf{r}) = \epsilon F_n(\mathbf{r}). \quad (\text{II.38})$$

One may easily see—by taking for $U(\mathbf{r})$ a Coulomb potential cutoff gently at the origin, say—that the error involved in replacing Δ by δ is of the order of $(a/a_i)^2$ again.

Since $A_n(\mathbf{k}) = B_n(\mathbf{k}) + O(a/a_i)$, the leading term in the wave function becomes, from (II.13):

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_n \int d\mathbf{k} B_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n0}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_n F_n(\mathbf{r}) u_{n0}(\mathbf{r}) = \sum_n F_n(\mathbf{r}) \psi_{n0}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{II.39})$$

Equation (II.38) contains no interband coupling, so that if we are interested in, say, electrons in the conduction band we get only one term

$$\psi = F(\mathbf{r}) \psi_c(\mathbf{r}), \quad (\text{II.40})$$

Вывод: в приближении эффективной массы электронные состояния описываются уравнением

$$[\epsilon_n(-i\nabla) + U(\mathbf{r})]F_n(\mathbf{r}) = \epsilon F_n(\mathbf{r}).$$

$$\epsilon_n + \frac{k^2}{2m} + \frac{k_\alpha k_\beta}{m^2} \sum_{\substack{n'' \\ n'' \neq n}} \frac{\phi_{nn''\alpha} \phi_{n''n\beta}}{\omega_{nn''}}$$

$$\psi = F(\mathbf{r})\psi_e(\mathbf{r});$$

Базовые задачи

1. Квантовая яма или пленка
2. Проволока
3. Квантовая точка

Вырожденные зоны. Дырочные состояния

Let us call the degenerate functions at this point $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_r$, a typical one being denoted by ϕ_j . The degeneracy implies that they all have the same energy:

$$H_0\phi_j = \epsilon_0\phi_j. \quad (\text{IV.1})$$

We shall now introduce a complete set of functions ϕ_{nk} defined by

$$\phi_{nk} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\phi_n, \quad (\text{IV.3})$$

the index n running over both j and i . We then make the Ansatz

$$\psi = \sum_n \int d\mathbf{k} A_n(\mathbf{k}) \phi_{nk}. \quad (\text{IV.4})$$

For the impurity problem this leads to the Schrödinger equation:

$$\sum_{n'} \int d\mathbf{k}' (n\mathbf{k} | H_0 + U | n'\mathbf{k}') A_{n'}(\mathbf{k}') = \epsilon A_n(\mathbf{k}). \quad (\text{IV.5})$$

The analysis leading from (II.14) to (II.22) is again valid due to the orthonormality of the $\phi_{n\mathbf{k}}$, and we obtain [on specializing n to j in (IV.5)]

$$\left(\epsilon_0 + \frac{k^2}{2m}\right)A_j(\mathbf{k}) + \sum_i \frac{k_\alpha p_{j\alpha}}{m} A_i(\mathbf{k}) + \int d\mathbf{k}' u(\mathbf{k}-\mathbf{k}') A_j(\mathbf{k}') = \epsilon A_j(\mathbf{k}). \quad (\text{IV.6})$$

(II.25) and (II.31). This is

$$\begin{aligned} (n\mathbf{k} | S | n'\mathbf{k}') &= -\frac{k_\alpha p_{nn'\alpha}}{m\omega_{nn'}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \quad n, n' \neq j, \\ &= 0, \quad n \text{ or } n' = j. \end{aligned} \quad (\text{IV.7})$$

This yields, to second order terms in k , the result:

$$\begin{aligned} \sum_{j'} \left(\epsilon_0 \delta_{jj'} + \frac{k^2}{2m} \delta_{jj'} + \frac{k_\alpha k_\beta}{m^2} \sum_i \frac{p_{i\alpha} p_{ij'\beta}}{\epsilon_0 - \epsilon_i} \right) B_{j'}(\mathbf{k}) \\ + \int u(\mathbf{k}-\mathbf{k}') B_j(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' = \epsilon B_j(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (\text{IV.8a})$$

The analysis leading from (II.14) to (II.22) is again valid due to the orthonormality of the $\phi_{n\mathbf{k}}$, and we obtain [on specializing n to j in (IV.5)]

$$\left(\epsilon_0 + \frac{k^2}{2m}\right)A_j(\mathbf{k}) + \sum_i \frac{k_\alpha p_{j\alpha}}{m} A_i(\mathbf{k}) + \int d\mathbf{k}' u(\mathbf{k}-\mathbf{k}')A_j(\mathbf{k}') = \epsilon A_j(\mathbf{k}). \quad (\text{IV.6})$$

$$\sum_{j'=1}^r (D_{jj'}^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta) B_{j'}(\mathbf{k}) + \int u(\mathbf{k}-\mathbf{k}') B_j(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' = \epsilon B_j(\mathbf{k}), \quad (\text{IV.8b})$$

where

$$D_{jj'}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2m} \delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{m^2} \sum_i \frac{p_{j\alpha} p_{i\beta}}{\epsilon_0 - \epsilon_i}. \quad (\text{IV.9})$$

$$F_j(\mathbf{r}) = \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} B_j(\mathbf{r}) d\mathbf{k}, \quad (\text{IV.10})$$

then (IV.8b) becomes

$$\sum_{j'=1}^r \left[D_{jj'}^{\alpha\beta} \left(\frac{1}{i} \nabla_\alpha \right) \left(\frac{1}{i} \nabla_\beta \right) + U(\mathbf{r}) \delta_{jj'} \right] F_{j'}(\mathbf{r}) = \epsilon F_j(\mathbf{r}), \quad (\text{IV.11})$$

and the leading term in the wave function is

$$\psi = \sum_{j=1}^r F_j(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}). \quad (\text{IV.12})$$

Модель Латтинжера

Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors : General Theory*

J. M. LUTTINGER

University of Michigan, Ann Arbor, Michigan

Phys. Rev. 102,1030 (1956)

Since the band edge is fourfold degenerate, the Hamiltonian D will now be four by four. We now introduce any three 4×4 matrices, J_x, J_y, J_z , which satisfy the commutation rules of angular momentum, i.e.,

$$(J_x, J_y) = iJ_z, \text{ etc.}, \quad (33)$$

and

$$J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{3}{2}(\frac{3}{2} + 1) = 15/4. \quad (34)$$

$$\begin{aligned} &1, J_x, J_y, J_z, J_x^2, J_y^2, \{J_x J_y\}, \{J_y J_x\}, \{J_x J_z\}, \\ &\{(J_y^2 - J_x^2)J_x\} = V_x, \{(J_x^2 - J_y^2)J_y\} \\ &\quad = V_y, \{(J_x^2 - J_y^2)J_z\} = V_z, \\ &J_x^3, J_y^3, J_z^3, J_x J_y J_z + J_z J_y J_x, \end{aligned}$$

$$J_x = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{3}i/2 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}i/2 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & \sqrt{3}i/2 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3}i/2 & 0 \end{vmatrix},$$

$$J_y = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \end{vmatrix},$$

$$J_z = \begin{vmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{vmatrix},$$

Гамильтониан Латтинжера

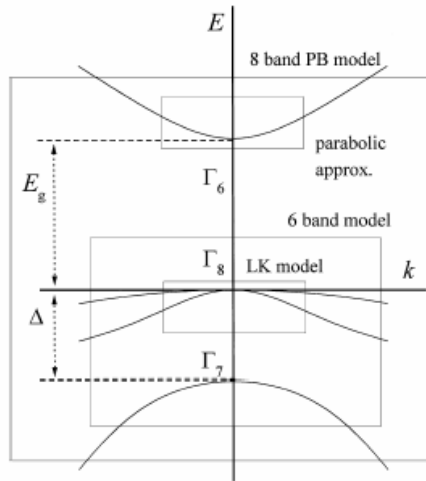
$$\begin{aligned}
 D = & \beta_1 k^2 + \beta_2 (k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) \\
 & + \beta_3 (\{k_x k_y\} \{J_x J_y\} + \{k_y k_z\} \{J_y J_z\} \\
 & + \{k_z k_x\} \{J_z J_x\}) + \beta_4 (H_x J_x + H_y J_y + H_z J_z) \\
 & + \beta_5 (H_x J_x^3 + H_y J_y^3 + H_z J_z^3). \quad (38)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D = & (3A + B/4)k^2 - \frac{1}{3}(A - B)(k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) & (1/2m)\gamma_1 = -\frac{1}{3}(A + 2B), & (1/m)(3\kappa + 1) = -K, \\
 & - \frac{2}{3}C(\{k_x k_y\} \{J_x J_y\} + \{k_y k_z\} \{J_y J_z\} + \{k_z k_x\} \{J_z J_x\}) & (1/2m)\gamma_2 = -\frac{1}{6}(A - B), & (e/mc)q = -\beta_3, \\
 & + (e/3mc)(mK + 1)\mathbf{J} \cdot \mathbf{H}. \quad (42) & (1/2m)\gamma_3 = -\frac{1}{6}C.
 \end{aligned}$$

Let us then put $\gamma_2 = \gamma_3 = \bar{\gamma}$ and $q = 0$. The Hamiltonian (45) becomes

$$D = \frac{1}{m} \left\{ [\gamma_1 + (5/2)\bar{\gamma}]k^2 - \bar{\gamma}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{J})^2 + \left(\kappa - \frac{\bar{\gamma}}{2} \right) \frac{e}{c} \mathbf{J} \cdot \mathbf{H} \right\}. \quad (65)$$

Общий случай



	$u_{1,0}^c$	$u_{-1,0}^c$	$u_{3/2,1/2}^c$	$u_{3/2,3/2}^c$	$u_{1/2,-1/2}^c$	$u_{1/2,-3/2}^c$	$u_{1,0}^v$	$u_{-1,0}^v$
$u_{1,0}^c$	$E_c + \frac{\alpha}{2m_0} p^2$	0	$\frac{t}{\sqrt{2}} V p_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}} V p_+$	$\frac{1}{\sqrt{6}} V p_-$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} V p_+$	$\frac{1}{\sqrt{3}} V p_-$
$u_{-1,0}^c$	0	$E_c + \frac{\alpha}{2m_0} p^2$	0	$-\frac{1}{\sqrt{6}} V p_+$	$i\sqrt{\frac{2}{3}} V p_+$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} V p_-$	$\frac{t}{\sqrt{3}} V p_+$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} V p_-$
$u_{3/2,1/2}^c$	$-\frac{t}{\sqrt{2}} V p_-$	0	$-(P+Q)$	$-L$	$-M$	0	$-i\sqrt{\frac{1}{2}} L$	$i\sqrt{2} M$
$u_{3/2,3/2}^c$	$\sqrt{\frac{2}{3}} V p_+$	$-\frac{1}{\sqrt{6}} V p_-$	$-L^*$	$-(P-Q)$	0	$-M$	$i\sqrt{2} Q$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}} L$
$u_{1/2,-1/2}^c$	$-\frac{t}{\sqrt{6}} V p_+$	$-i\sqrt{\frac{2}{3}} V p_+$	$-M^*$	0	$-(P-Q)$	L	$i\sqrt{\frac{3}{2}} L^*$	$i\sqrt{2} Q$
$u_{1/2,-3/2}^c$	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}} V p_+$	0	$-M^*$	L^*	$-(P+Q)$	$i\sqrt{2} M^*$	$i\sqrt{\frac{1}{2}} L^*$
$u_{1,0}^v$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} V p_+$	$-\frac{t}{\sqrt{3}} V p_-$	$i\sqrt{\frac{1}{2}} L^*$	$-i\sqrt{2} Q$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}} L$	$-i\sqrt{2} M$	$-\Delta - P$	0
$u_{-1,0}^v$	$\frac{1}{\sqrt{3}} V p_+$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} V p_-$	$-i\sqrt{2} M^*$	$i\sqrt{\frac{3}{2}} L^*$	$-i\sqrt{2} Q$	$-i\sqrt{\frac{1}{2}} L$	0	$-\Delta - P$

$$u_{1/2}^c = S\uparrow, \quad u_{3/2,-3/2}^c = \frac{t}{\sqrt{2}}(X - iY)\downarrow,$$

$$u_{-1/2}^c = S\downarrow, \quad u_{3/2,3/2}^c = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\uparrow,$$

$$u_{3/2,1/2}^c = \frac{t}{\sqrt{6}}[(X + iY)\downarrow - 2Z\uparrow],$$

$$u_{3/2,-1/2}^c = \frac{1}{\sqrt{6}}[(X - iY)\uparrow + 2Z\downarrow],$$

$$u_{1/2,1/2}^c = \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY)\downarrow + Z\uparrow],$$

$$u_{1/2,-1/2}^c = \frac{t}{\sqrt{3}}[-(X - iY)\uparrow + Z\downarrow],$$

$$[E - E_g - \alpha E_K][E + \gamma_1 E_K + \Delta][E + (\gamma_1 + 2\gamma)E_K] - 8(\gamma E_K)^2 - E_p E_K \left(E + \frac{2\Delta}{3} \right) - E_p(\gamma_1 - 2\gamma)E_K^2 = 0. \quad 10.$$

If one neglects the contribution of the remote bands to the valence band dispersion ($\gamma = 0, \gamma_1 = 0$), we obtain the dispersion of the light holes and electrons in the Kane model (32):

$$(E - E_g - \alpha E_K)(E + \Delta)E - E_p E_K (E + 2\Delta/3) = 0. \quad 11.$$

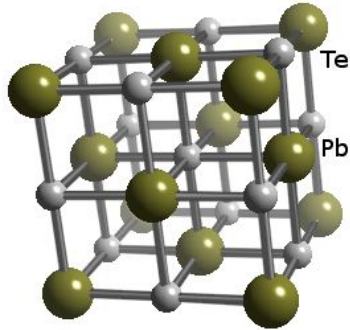
$$p_{\pm} = p_x \pm i p_y, \quad p_{\pm}^2 = p_x^2 + p_y^2,$$

$$P = \frac{\gamma_1}{2m_0} p^2, \quad Q = \frac{\gamma}{2m_0} (p_{\pm}^2 - 2p_z^2),$$

$$L = \frac{-t\sqrt{3}\gamma}{m_0} p_x p_-, \quad M = \frac{\sqrt{3}\gamma}{2m_0} p_-^2.$$

An Effective Hamiltonian

lead(II) telluride



$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla V, \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} + \dots$$

1.¹⁰ The lowest set of states arise from the two plane waves of wave vector $\mathbf{k} = \pm 2\pi/a(1/2 \ 1/2 \ 1/2)$, the central set from the six plane waves of wave vector $\mathbf{k} = \pm 2\pi/a(1/2 \ 1/2 \ 3/2)$ and cyclic permutations, and the highest set from the six plane waves of wave vector

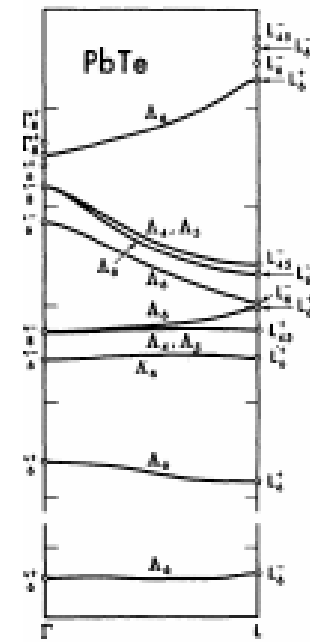
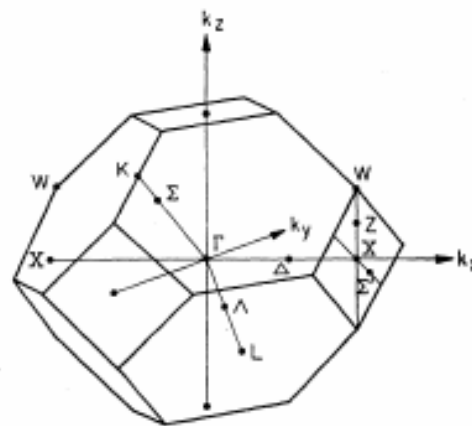
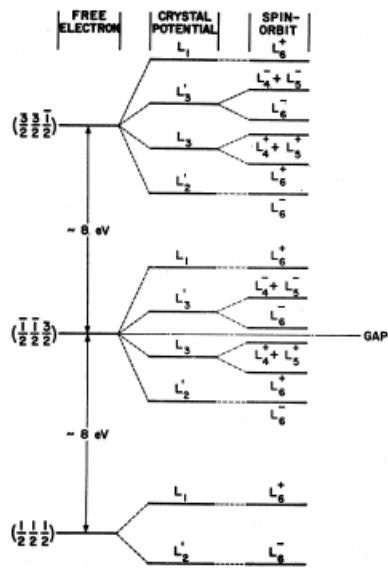


FIG. 1. The low lying states at L in the nearly-free-electron model for a face-centered cubic lattice. The approximate free-electron energies for the lead salts are shown along with a schematic representation of the crystal field and spin-orbit splittings.

Двойные группы

Таблица характеров двойной группы в точке Γ полупроводников типа цинковой обманки

	$\{E\}$	$\{3C_2/3\hat{E}C_2\}$	$\{6S_4\}$	$\{6\sigma/6\hat{E}\sigma\}$	$\{8C_3\}$	$\{\hat{E}\}$	$\{6\hat{E}S_4\}$	$\{8\hat{E}C_3\}$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1	1	-1	1
Γ_3	2	2	0	0	-1	2	0	-1
Γ_4	3	-1	-1	1	0	3	-1	0
Γ_5	3	-1	1	-1	0	3	-1	0
Γ_6	2	0	$\sqrt{2}$	0	1	-2	$-\sqrt{2}$	-1
Γ_7	2	0	$-\sqrt{2}$	0	1	-2	$\sqrt{2}$	-1
Γ_8	4	0	0	0	-1	-4	0	1

An Effective Hamiltonian

$$L = \left[L_{\bar{6}}(\uparrow) \quad L_{\bar{6}}(\downarrow) \quad L_6^+(\uparrow) \quad L_6^+(\downarrow) \right]$$

$$H = \begin{bmatrix} \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_l^-} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_\perp^-} & 0 & \frac{\hbar}{m} P_{\parallel} k_z & \frac{\hbar}{m} P_{\perp}(k_x - ik_y) \\ 0 & \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_l^-} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_\perp^-} & \frac{\hbar}{m} P_{\perp}(k_x + ik_y) & -\frac{\hbar}{m} P_{\parallel} k_z \\ \frac{\hbar}{m} P_{\parallel} k_z & \frac{\hbar}{m} P_{\perp}(k_x - ik_y) & -\frac{E_g}{2} - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_l^+} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_\perp^+} & 0 \\ \frac{\hbar}{m} P_{\perp}(k_x + ik_y) & -\frac{\hbar}{m} P_{\parallel} k_z & 0 & -\frac{E_g}{2} - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_l^+} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_\perp^+} \end{bmatrix}$$

$$H = s \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{E_g}{2} \right). \quad s = P / m_0$$



Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Многоэлектронные эффекты в наноструктурах: метод функционала плотности

А.М.Сатанин

*ННГУ им. Н.И.Лобачевского (Национальный
исследовательский университет),
Лаборатория «Теория наноструктур» НИФТИ, Н.Новгород,
Россия*

Содержание

- **Метод Кона-Шэма**
- **Суть метода**
- **Почему метод эффективен?**
- **Примеры**
- **Квантовые точки. Новые проблемы**
- **Обмен и корреляции**
- **Молекулярная динамика (Car-Parrinello)**
- **Динамика**
- **Другие системы: сверхпроводимость**
- **SIESTA**

Многоэлектронные системы

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1} \nabla_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{M_\alpha} \nabla_\alpha^2 - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \Psi = E\Psi$$

Адиабатическое приближение

$$\mathbf{H} = \left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1} \nabla_i^2 - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right]$$

Метод Томаса-Ферми

$$n(r) = \gamma [\mu - v_{eff}(r)]^{3/2}, \quad \gamma = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2},$$

$$v_{eff}(r) \equiv v(r) + \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr',$$

$$T = \int n(r) \frac{3}{10} k_F^2 [n(r)] dr,$$

$$U = \frac{1}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr',$$

Метод Хартри

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \psi_1(\mathbf{r}_1) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}} + \Phi_i \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r})$$

$$\nabla^2 \Phi_i = 4\pi e^2 \sum_{j=1, i \neq j}^N |\psi_j|^2$$

Метод Хартри-Фока

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det|\mathbf{A}|$$
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \psi_1(\rho_1) & \psi_1(\rho_2) & \dots & \psi_1(\rho_N) \\ \psi_2(\rho_1) & \psi_2(\rho_2) & \dots & \psi_2(\rho_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_N(\rho_1) & \psi_N(\rho_2) & \dots & \psi_N(\rho_N) \end{pmatrix}$$

$$T = -\frac{1}{2} \sum_{\lambda s} \int \psi_{\lambda}^*(\mathbf{r}, s) \nabla^2 \psi_{\lambda}(\mathbf{r}, s) d\mathbf{r},$$

$$V_{\text{ext}} = \int n(\mathbf{r}) H e^{-n} d\mathbf{r},$$

$$V_c = \frac{1}{2} \int \frac{n(\mathbf{r}_1) n(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

$$V_x = -\frac{1}{2} \sum_{\lambda \mu} \sum_{s_1 s_2} \int \frac{\psi_{\lambda}^*(\mathbf{r}_1, s_1) \psi_{\mu}^*(\mathbf{r}_2, s_2) \psi_{\mu}(\mathbf{r}_1, s_1) \psi_{\lambda}(\mathbf{r}_2, s_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

The van Vleck catastrophe

$$\Psi(r_1, \dots, r_N)$$

Является ли волновая функция для системы N ($N \geq N_0$, где $N_0 \approx 10^3$) электронов приемлемой физической концепцией?

1) Точность аппроксимации $|\tilde{\Psi}, \Psi|^2 \geq 0.5$

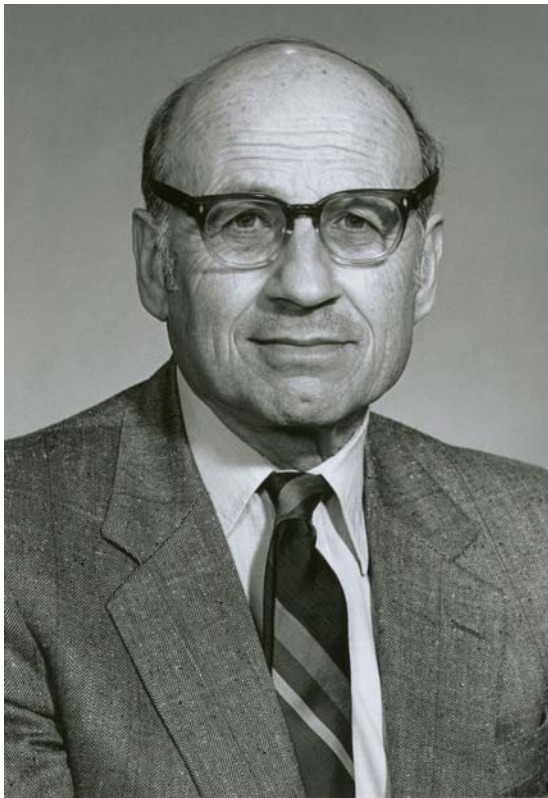
$$Nm = 10^2 \quad Nel = 10^3 \quad \varepsilon = 1/100 \quad |\tilde{\Psi}, \Psi| = (1 - \varepsilon)^{Nm} \approx e^{-1}$$

$$Nel = 10^4 \quad |\tilde{\Psi}, \Psi| = (1 - \varepsilon)^{Nm} \approx e^{-10} \approx 5 * 10^{-5}$$

2) Проблема записи $\Psi(r_1, \dots, r_N)$ Число bits $B = q^{3N}$

«Так поступает с нами природа и отбирает у нас одну игрушку за другой» Лонгфелло

Walter Kohn



1. Метод Кона-Латтинжера (метод эффективной массы для примесных центров в полупроводниках);
2. Конновская особенность;
3. Метод Кона-Шема.

The 1998 Nobel Prize in Chemistry was shared by W. Kohn and John A. Pople.

Плотность электронов «ПРОТИВ» волновой функции!

$$\Psi(r_1, \dots, r_N) \quad n(r) = N \int \Psi^*(r, r_2, \dots, r_N) \Psi(r, r_2, \dots, r_N) dr$$

$$\left\{ \begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_S(\vec{r}) \right) \phi_j(\vec{r}) = \epsilon_j \phi_j(\vec{r}); \\ & V_S(\vec{r}) = e^2 \int \frac{n(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{XC}(\vec{r}) + V(\vec{r})_{\text{ext}} \end{aligned} \right.$$

$$V_{\text{ext}}(\vec{r}) = - \sum_e \frac{Z_e e^2}{|\vec{r} - \vec{R}_e|}$$

$$V_{XC}(\vec{r}) = \frac{e^2}{a_0} \left[\frac{1.222}{\gamma_S[n]} - 0.066 \ln \left(1 + \frac{11.4}{\gamma_S[n]} \right) \right]$$

$$\left(\frac{4\pi}{3} n a_0^3 \right)^{1/3} = \frac{1}{\gamma_S[n]} \quad n(r) = \sum_{j=1}^{N_{\text{states}}} \phi_j^2(r)$$

Methanol

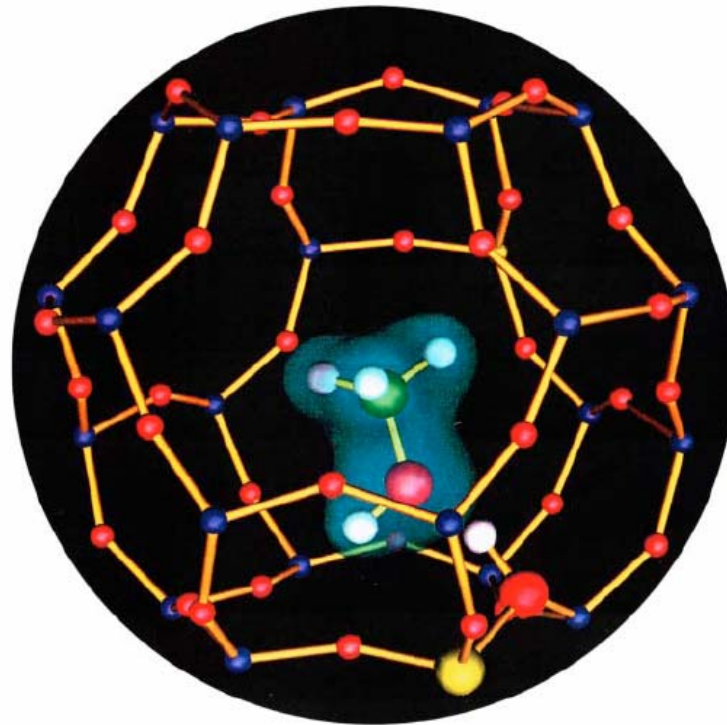


FIG. 1. Methanol inside a cage of the zeolite sodalite. Zeolites are crystalline arrays of cages built of silicon (blue), aluminum (yellow), and oxygen (red) atoms. For each Al atom one must have a positive counter ion [in this case H^+ (white)]. A methanol molecule is inside the cage (carbon is green) where it can react with the proton. DFT calculations have assigned and clarified the IR spectra, have determined the binding sites of methanol, and have calculated the activation energy for the reaction. Acid catalysis in zeolites is widely used in the chemical industry (after E. Nusterer, P. Bloechl, and K. Schwarz, 1996, *Angew. Chem.* **35**, 175) [Color].

Clathrate

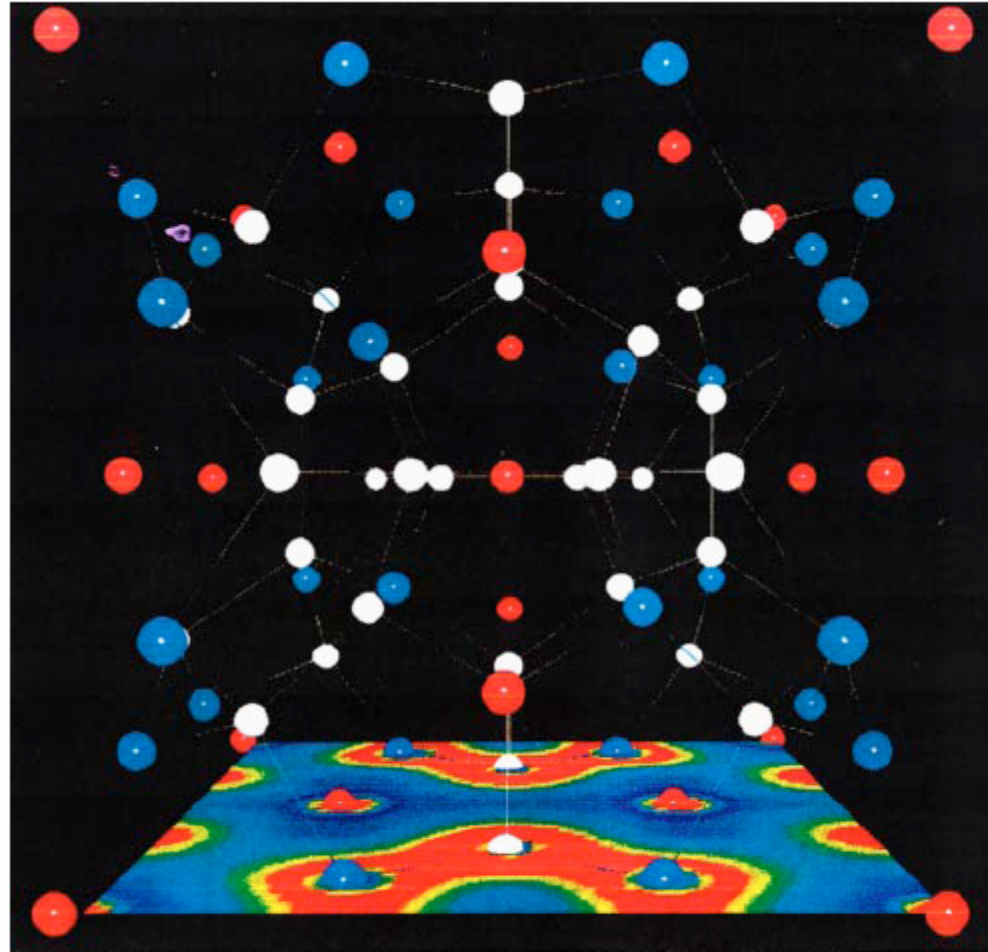
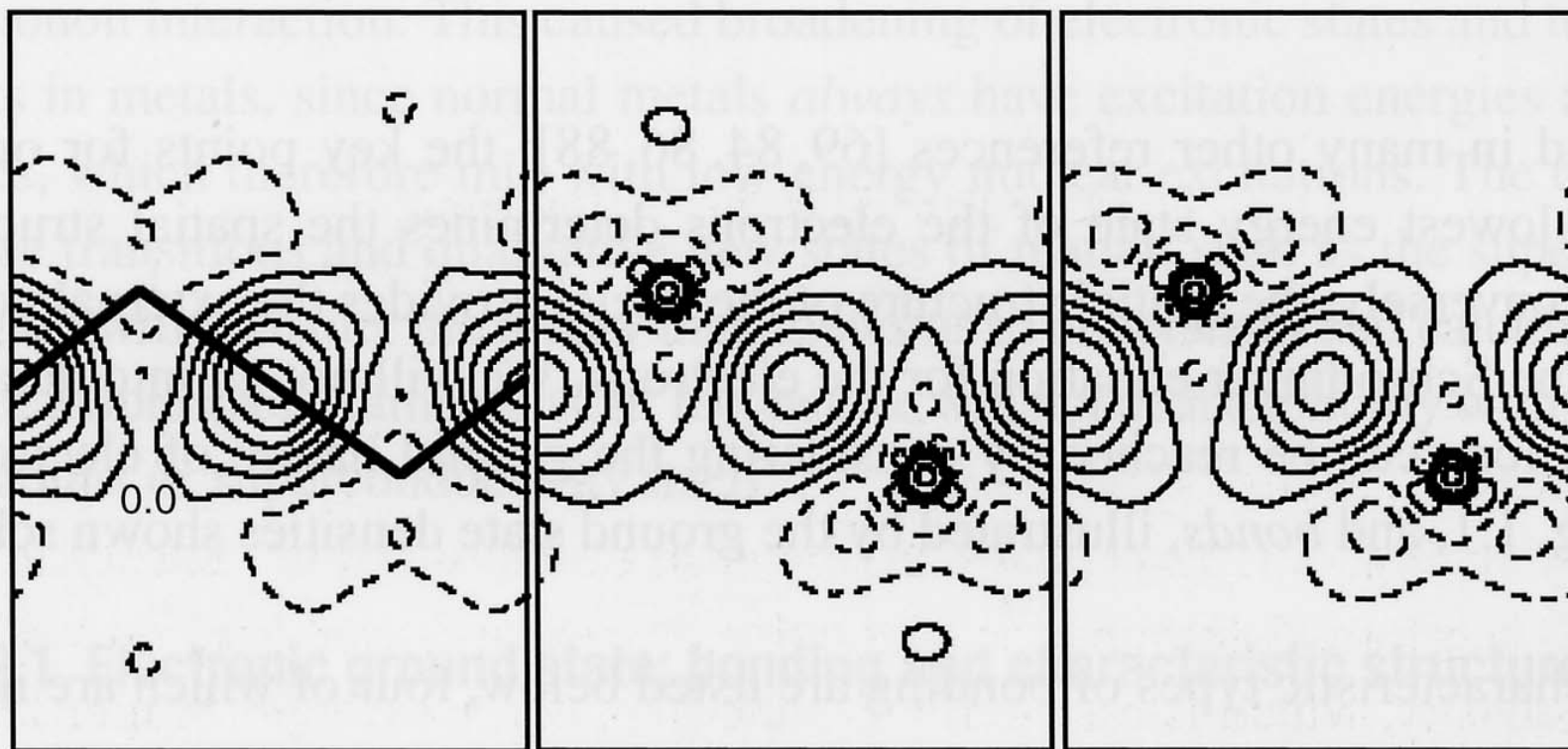


FIG. 2. The geometric structure of the clathrate $\text{Sr}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ (Sr, red; Ga, blue; Ge, white) and its charge density in a plane bisecting the centers of the cages. DFT calculations have shown that the Sr atoms are weakly bound and scatter phonons effectively, thereby lowering thermal conductivity. However, contrary to intuitive expectations, the Sr atoms do not donate electrons to the frame and are practically neutral. Conductivity is due to electrons traveling through the frame, not through the one-dimensional Sr “wires” in the structure; there is thus little scattering of conduction electrons by Sr vibrations. For these

Si

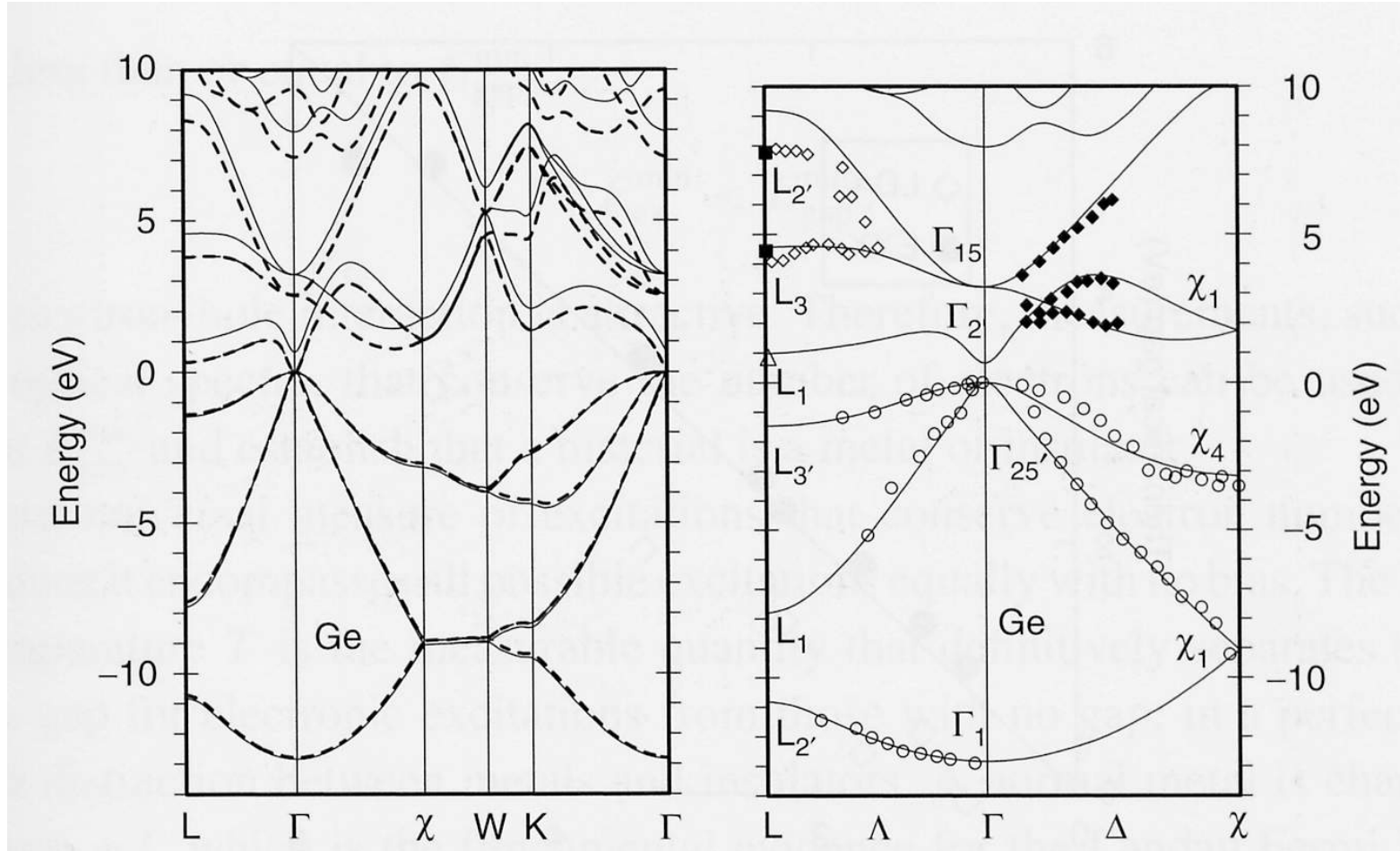


Exp

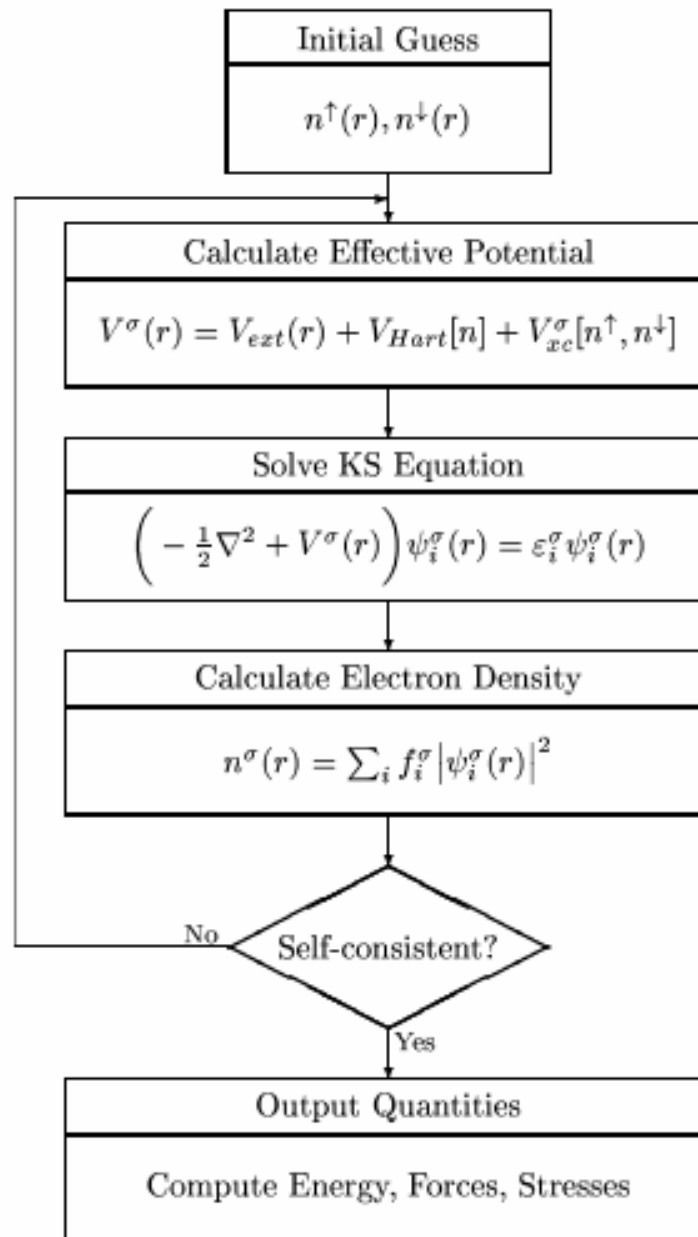
LDA

GGA

Ge



Self-Consistent Kohn-Sham Equations



xc -potential

$$\epsilon_{xc}^l(r_s) = \epsilon_x^l(r_s) + \epsilon_c^l(r_s), \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

$$\epsilon_x^l(r_s) = \frac{-a^l}{r_s}$$

$$\epsilon_c^l(r_s) = \begin{cases} \frac{y^l}{1 + \alpha^l \sqrt{r_s} + \beta^l} & r_s > 1 \\ A^l + B^l \ln r_s + C^l r_s + D^l r_s \ln r_s & r_s \leq 1 \end{cases}$$

Here $l = p$ or np , and values for $a^l, \alpha^l, \beta^l, A^l, B^l, C^l$, and D^l can be found in [8]. Referring to the last section the single particle potential can be expressed,

$$\mathbf{v}_s^{xc} = \epsilon_{xc}^l - \frac{r_s}{3} \frac{\partial \epsilon_{xc}^l}{\partial r_s}$$

Quantum Molecular Dynamics

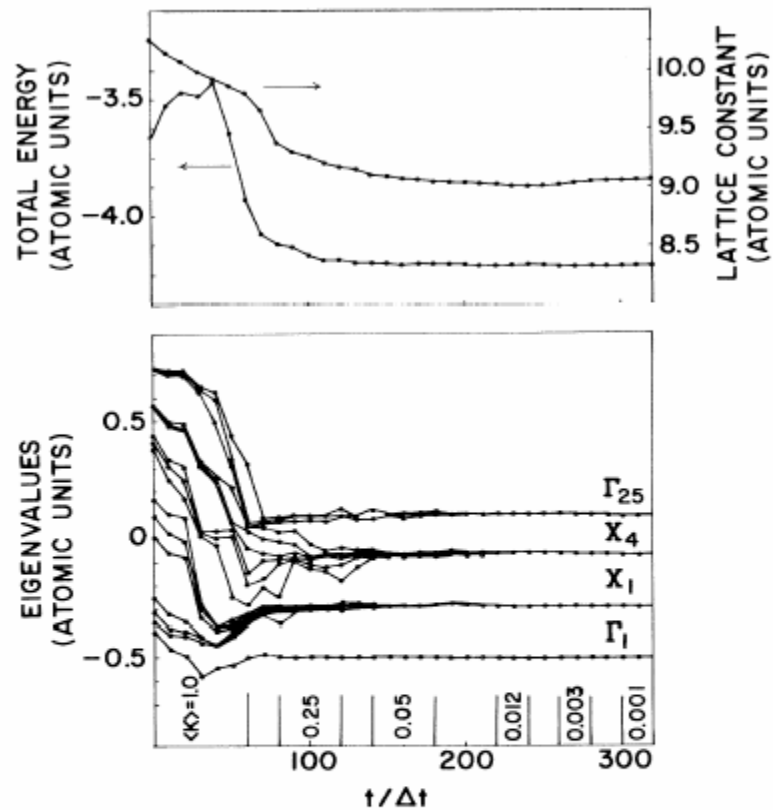


FIG. 1. Evolution of total energy per atom, lattice constant, and eigenvalues of the Λ matrix, during a typical dynamical annealing run. The partial averages of the classical kinetic energy K during each subsection of the run are indicated in the lower part of the picture. For $K \rightarrow 0$ the eigenvalues of the Λ matrix tend to the KS eigenvalues. The various multiplets are labeled according to the symmetry of the diamond lattice.

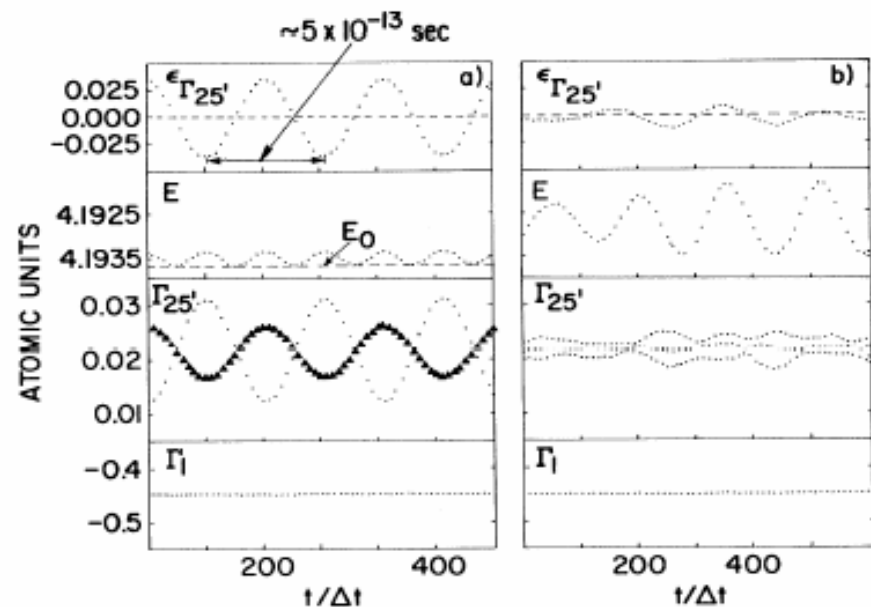
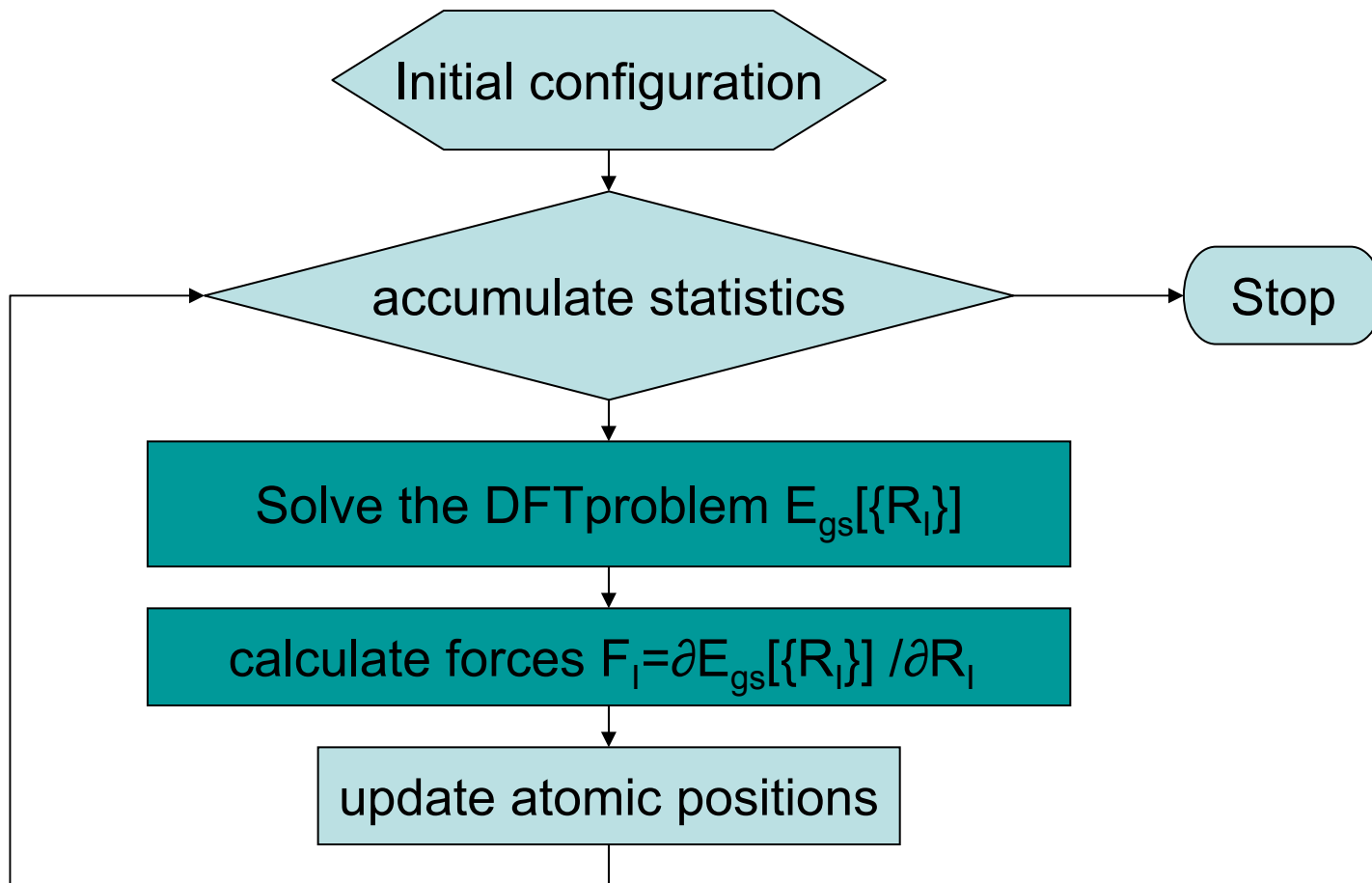


FIG. 2. From top to bottom, temporal evolution of average atomic displacement along $\epsilon_{\Gamma_{25}'}$, potential energy per atom, and Γ_{25}' and Γ_1 multiplets for two different MD runs. The lattice constant was taken to be equal to the experimental value of 10.26 a.u.; Δt and μ were taken to be 10 and 300 a.u., respectively. The dashed line in the second panel from the top indicates the $T=0$ ground-state energy. The triangles indicate a doubly degenerate level.

Born-Oppenheimer Molecular Dynamics



Bright and Dark Exciton States

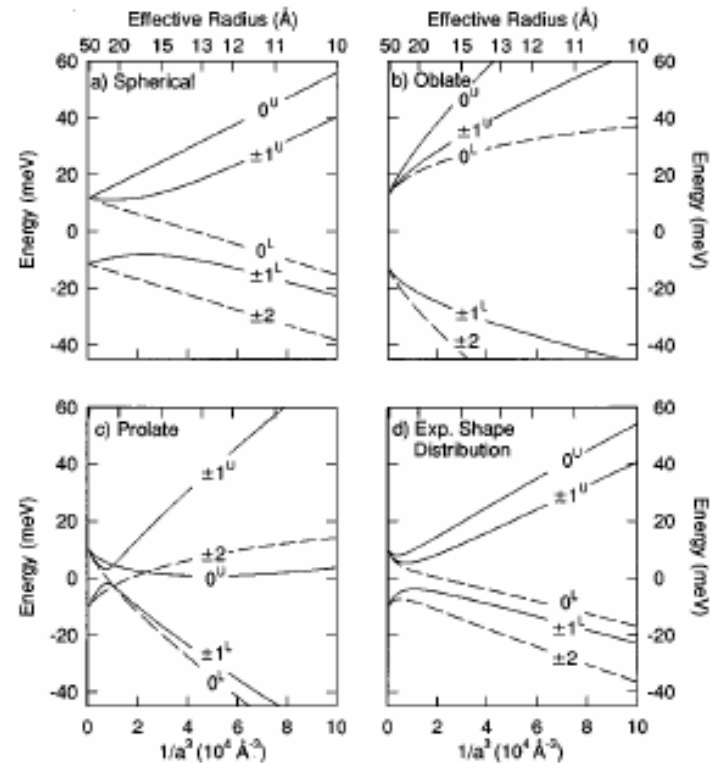


FIG. 2. The size dependence of the exciton band-edge structure in ellipsoidal hexagonal CdSe quantum dots with ellipticity μ : (a) spherical dots ($\mu = 0$); (b) oblate dots ($\mu = -0.28$); (c) prolate dots ($\mu = 0.28$); (d) dots having a size dependent ellipticity as determined from SAXS and TEM measurements. Solid (dashed) lines indicate optically active (passive) levels.

Self-Healing of CdSe Nanocrystals: First-Principles Calculations

Aaron Puzder,* A. J. Williamson,† François Gygi, and Giulia Galli
Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California 94550, USA
(Received 8 September 2003; published 25 May 2004)

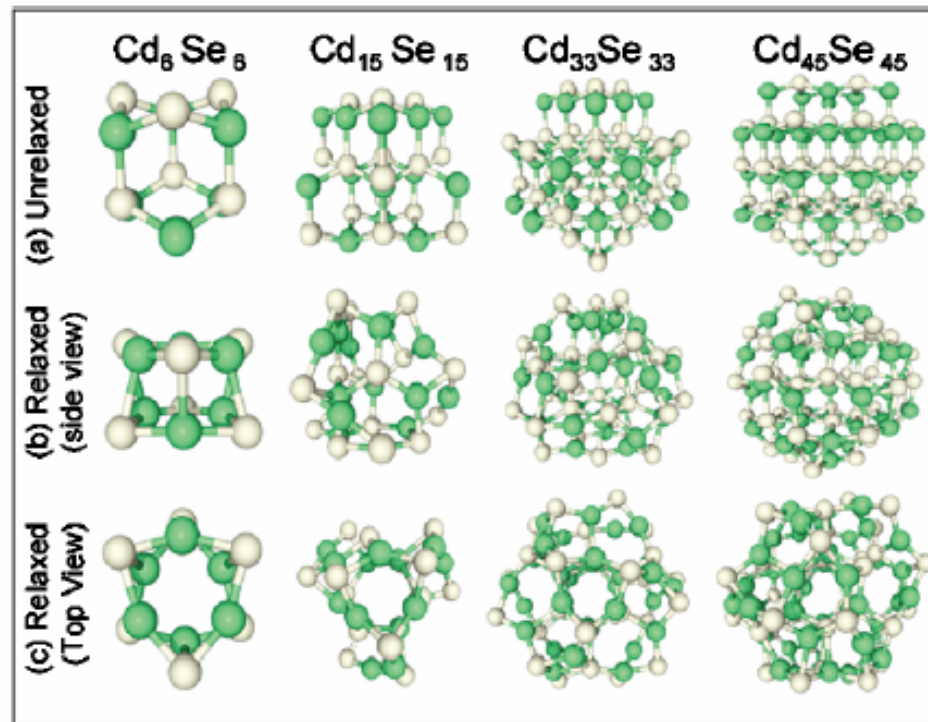
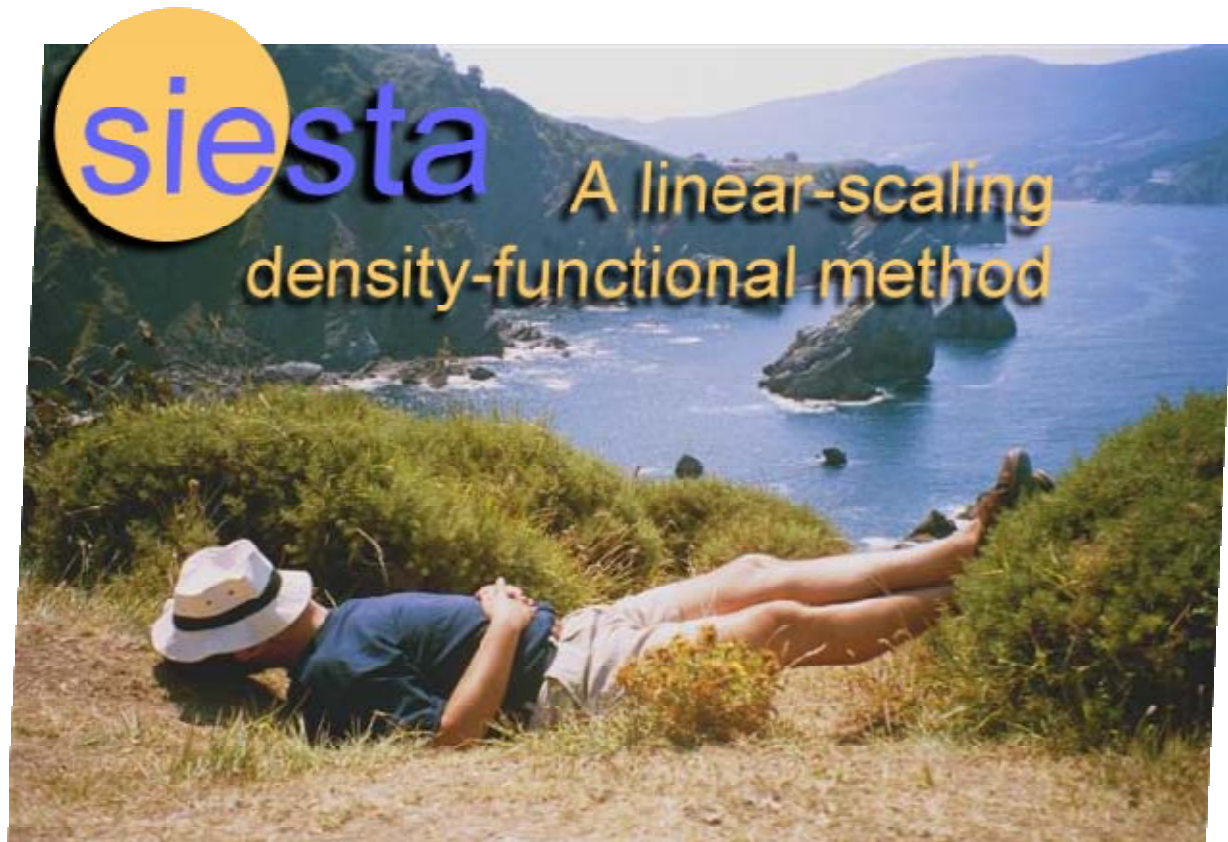


FIG. 1 (color). Unrelaxed (a) and relaxed (b),(c) wurtzite structures of Cd_xSe_x , $x = 6, 15, 33,$ and 45 . The Cd is green and the Se is yellow in the ball and stick models. The side (top) view is parallel (along) the c axis.

SIESTA(Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms)



User's Guide 2.0



Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Сергей Кашин
мнс, лаб. «Теория
наноструктур», НИФТИ ННГУ

Параллельные вычисления

Современные задачи вычислительной физики (равно как и других наук и инженерных расчетов) требуют больших вычислительных мощностей для достижения требуемой точности.

Развитие микроэлектроники и технологий в последние десятилетия позволило увеличить производительность компьютеров на порядки и расширило их «универсальность», приспособив к решению самых разных задач. Однако, потребности в производительности растут еще большими темпами.

Единственный выход из такой ситуации – заставить работать несколько вычислительных устройств над разными частями одной задачи **одновременно (параллельно)**. Все, что связано с большими компьютерами и большими задачами, сейчас сопровождается характерным словом «параллельный». В настоящее время самые мощные компьютеры содержат тысячи вычислительных узлов, даже персональные компьютеры уже оснащаются 2-х или 4-х ядерными процессорами.

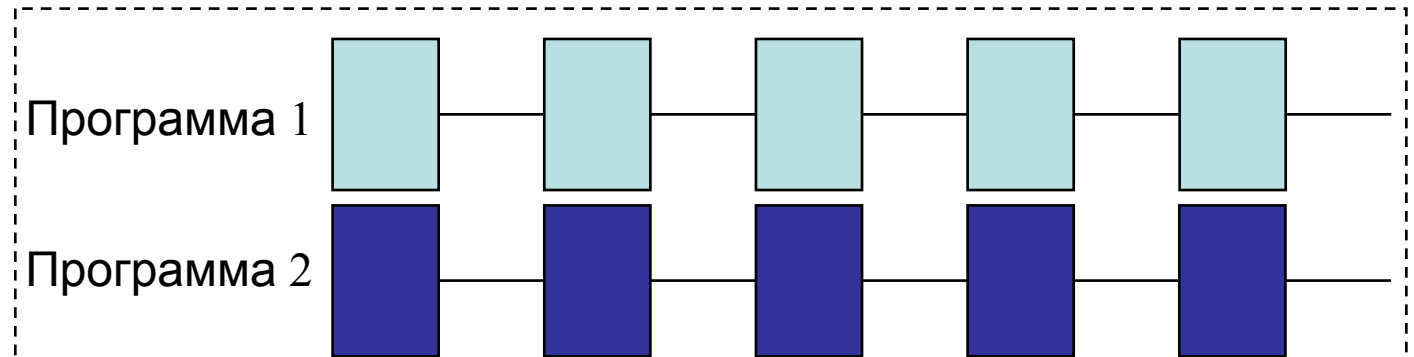
Конечно, активно развиваются и средства разработки приложений для «параллельных» компьютеров. Этим технологиям и посвящена большая часть данного цикла лекций.



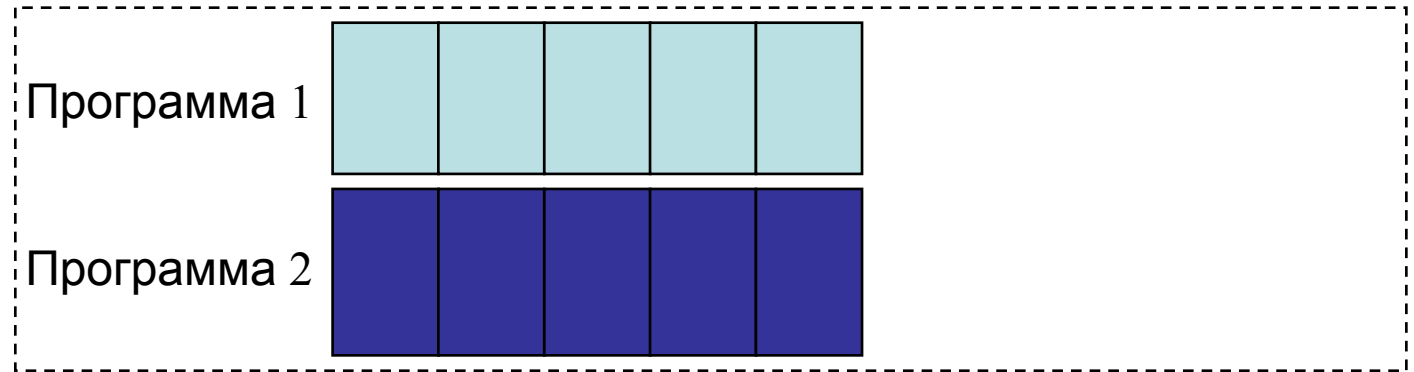
Параллельные вычисления

Под **параллельными вычислениями** понимаются процессы обработки данных, в которых одновременно могут выполняться несколько операций **компьютерной системы**

многозадачн
й
режим



параллельн
ое
выполнение



время



Параллельные вычисления

Сейчас современные персональные компьютеры предоставляют пользователю возможность создавать и запускать параллельные приложения благодаря наличию процессоров с несколькими ядрами, но для серьезных расчетов требуются куда более мощные комплексы – **суперкомпьютеры** – вычислительные системы, обладающие предельными характеристиками по производительности среди имеющихся в каждый конкретный момент времени компьютеров.

Отдельно можно выделить – **кластеры** – группы компьютеров, объединенных в локальную вычислительную сеть (ЛВС) и способных работать в качестве единой вычислительной системы.



Классификация вычислительных систем

Существует несколько широко распространенных классификаций вычислительных систем (классификации М. Флинна, Р. Хокни, Т. Фенга, В. Хендлера, Л. Шнайдера, Д. Скилликорна).

Каждый может без труда разобраться с этим вопросом с помощью [2].

Мы же рассмотрим классификацию многопроцессорных систем по способу организации оперативной памяти.



Классификация вычислительных систем

Многопроцессорные системы. Какие они бывают?
Будем разделять их по способу организации оперативной памяти:

multiprocessors (мультипроцессоры или системы с общей разделяемой памятью),

multicomputers (мультикомпьютеры или системы с распределенной памятью).



Классификация вычислительных систем

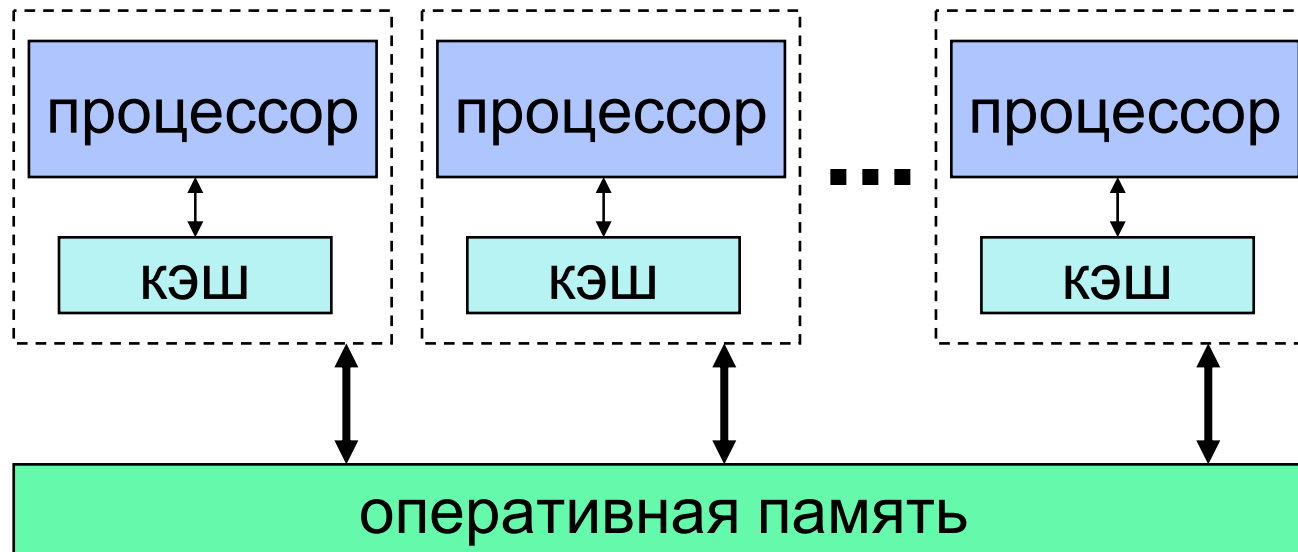
В свою очередь мультипроцессоры можно разделить на две группы:

- мультипроцессоры с использованием единой общей памяти (*shared memory*), когда обеспечивается однородный доступ к памяти (*uniform memory access or UMA*);
- мультипроцессоры с использованием физически распределенной памяти, в этом случае имеет место неоднородный доступ к памяти (*non-uniform memory access or NUMA*).



Классификация вычислительных систем

Схема доступа к памяти в мультипроцессорах с общей памятью:

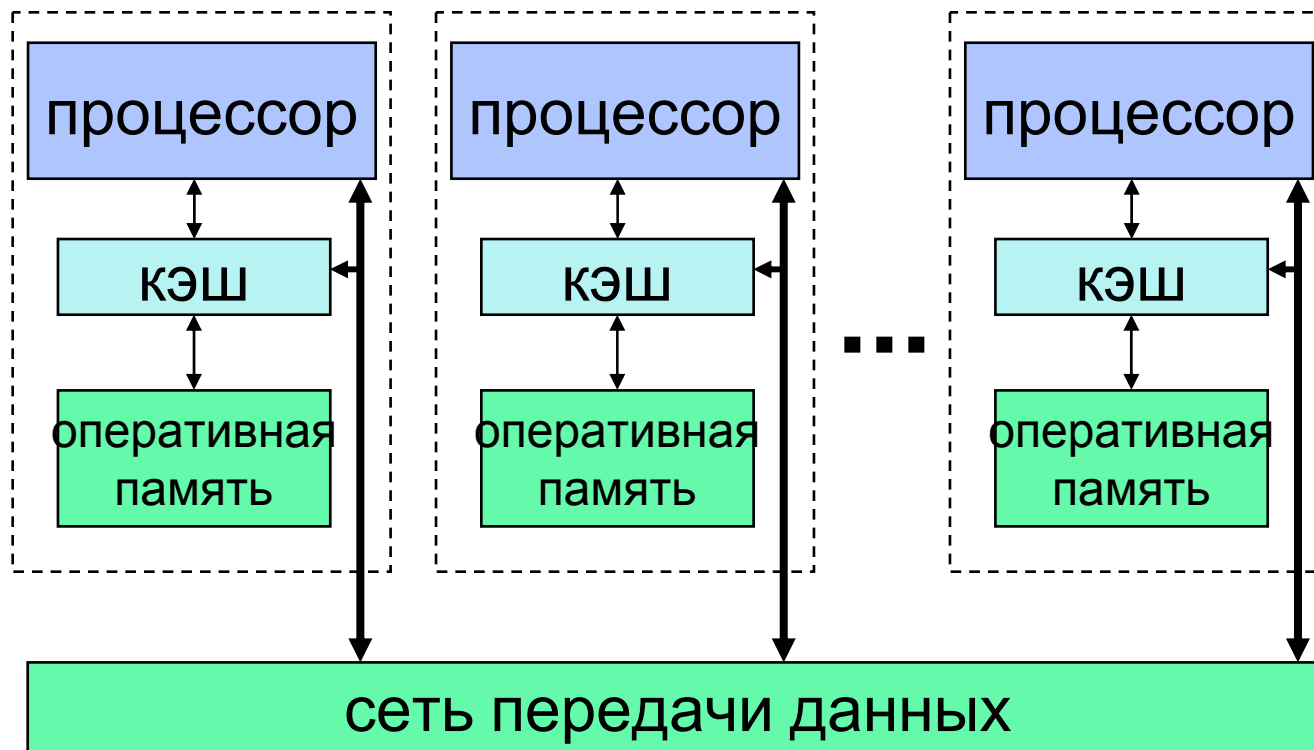


Каждый процессор имеет **однородный прямой** доступ ко всей оперативной памяти в рамках единого адресного пространства.



Классификация вычислительных систем

Доступ к памяти в мультипроцессорах с использованием физически распределенной памяти:



Каждый процессор (или группа процессоров) имеет прямой доступ к некоторой части памяти и доступ посредством сети передачи данных к остальной памяти.



Классификация вычислительных систем

Необходимо очень хорошо понимать разницу между мультипроцессорами с общей и физически распределенной памятью. В UMA-системах каждый процессор имеет один и тот же механизм доступа ко всей оперативной памяти, в то время как в NUMA-системах память распределена, и доступ к одним адресам с данного процессора может оказаться медленнее, чем к другим, за счет того, что связь осуществляется через дополнительную сеть передачи данных. Тем не менее вся память в NUMA-системах остается логически общей. Это позволяет обращаться с разных процессоров к одной переменной, изменять ее значение.



Классификация вычислительных систем

Типичные представители семейства UMA-компьютеров – это распространенные ныне многоядерные ПК.

NUMA-компьютеры можно встретить среди многопроцессорных серверов с несколькими платами.

Недостаток UMA-систем заключается в плохой масштабируемости и высокой стоимости. Идея NUMA частично решает эту проблему, однако создает другие – для разработчиков программ, поскольку эффективность работы программ на NUMA сильно зависит от использования памяти, необходимо учитывать неоднородный доступ к памяти.



Классификация вычислительных систем

Обратимся к другому важному и широко распространенному типу многопроцессорных систем: мультикомпьютерам.

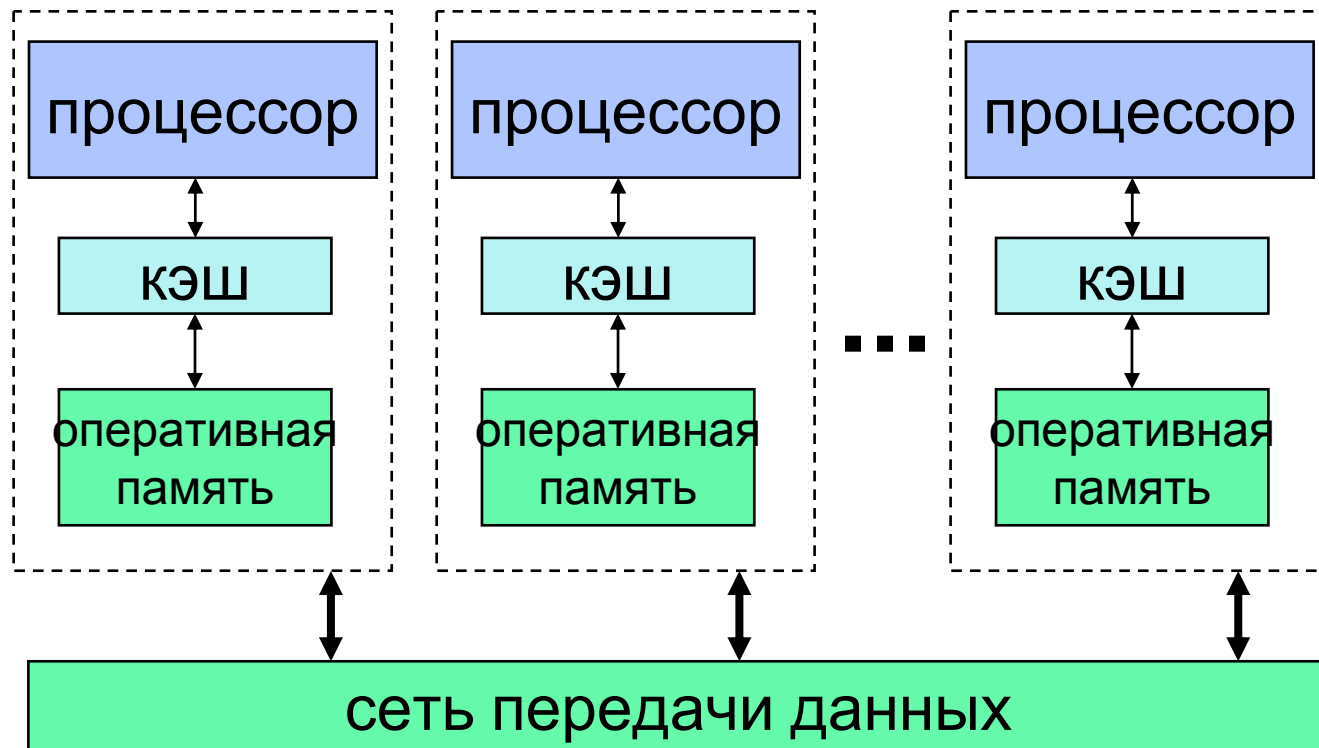
Мультикомпьютеры

- не обеспечивают общий доступ ко всей имеющейся в системах памяти (*no-remote memory access or NORMA*),
- каждый процессор системы может использовать только свою локальную память,
- для доступа к данным, располагаемым на других процессорах, необходимо явно выполнить операции передачи сообщений.



Классификация вычислительных систем

Схема организации оперативной памяти в мультикомпьютерах



Каждый процессор имеет доступ только к своей локальной памяти, доступ к данным других процессоров осуществляется путем передачи сообщений по локальной сети.



Классификация вычислительных систем

Идея мультикомпьютеров используется при построении двух важных типов многопроцессорных вычислительных систем:

- массивно-параллельных систем (*massively parallel processor or MPP*);
- кластеров.

Кластер – это множество отдельных компьютеров, объединенных в сеть, для которых при помощи специальных аппаратно-программных средств обеспечивается возможность унифицированного управления, надежного функционирования и эффективного использования.



Классификация вычислительных систем

Огромным преимуществом кластеров является высокая масштабируемость и низкая стоимость (по сравнению с UMA и NUMA-системами). В кластер можно объединить несколько ПК и расширить его в любой момент, добавив новые узлы.

С другой стороны необходимость обмена данными между узлами посредством передачи сообщений усложняет создание программ для кластеров, также следует помнить, что именно сеть передачи данных является узким местом кластеров, поскольку скорости самых быстрых ЛВС не сравнимы со скоростью доступа к локальной памяти компьютера.



Использованные источники информации

1. В.П. Гергель. Курс лекций «Параллельное программирование», Н. Новгород, ННГУ, 2005
2. В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. Параллельные вычисления, СПб: БХВ-Петербург, 2004 г.
3. <http://parallel.ru>





Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ТЕХНОЛОГИЯ ПРОГРАММИРОВАНИЯ OpenMP

Сергей Кашин
мнс, лаб. «Теория
наноструктур», НИФТИ ННГУ

Технологии параллельного программирования

В настоящее время при создании параллельных программ для мультикомпьютеров широко применяется интерфейс обмена сообщениями *MPI*.

Для мультипроцессоров одним из наиболее популярных средств является технология *OpenMP*.

Важно: MPI также можно использовать и для программирования мультипроцессоров.



Технология OpenMP

Интерфейс OpenMP задуман как стандарт для программирования систем с общей памятью. Разработкой стандарта занимается организация OpenMP ARB (ARchitecture Board), в которую вошли представители крупнейших компаний – разработчиков SMP-архитектур и программного обеспечения.

Полную информацию об OpenMP, включая описание стандартов, можно найти на ресурсе <http://openmp.org>. Текущая версия стандарта – OpenMP 3.0.

OpenMP является по сути функционалом компилятора и представляет собой набор директив компилятора, библиотечных процедур и переменных окружения, предназначенных для программирования многопоточных приложений.



Технология OpenMP

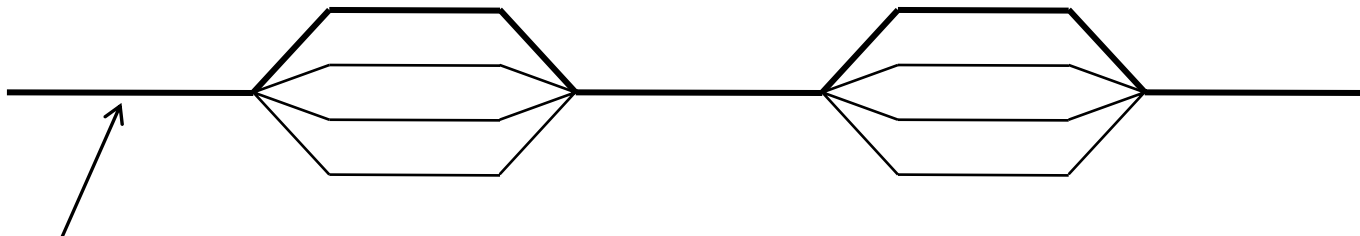
Популярность OpenMP объясняется простотой программирования, возможностью использования готовой последовательной программы без необходимости изменения ее структуры.



Технология OpenMP

Как в рамках правил OpenMP пользователь должен представлять параллельную программу?

В нашей воображаемой последовательной программе мы несомненно можем выделить область (или несколько областей), части которой можно выполнять независимо друг от друга – это и будет параллельная область.



поток-мастер порождается при запуске программы, живет вплоть до ее завершения и всегда имеет номер 0.



Технология OpenMP

Весь багаж OpenMP – это набор директив, процедур и переменных, большая часть из которых (вам) никогда не пригодится.

Все директивы располагаются в комментариях и начинаются с комбинации:

!\$OMP (C\$omp, *\$omp)



Технология OpenMP

Описание параллельных областей

```
!$omp parallel
```

```
<параллельный код>
```

```
!$omp end parallel
```

В этот момент потоком-мастером порождается
`omp_num_threads - 1` потоков

*Могут ли быть параллельные секции
вложенными друг в друга? – Да*

*Можно ли менять число потоков в
параллельной секции? - Да*



Технология OpenMP

`omp_num_threads` – переменная, содержит общее число потоков;

`omp_set_num_threads` – позволяет изменить число потоков;

`omp_get_num_threads` – возвращает число потоков;

`omp_get_thread_num` – возвращает номер потока;



Технология OpenMP

Примером использования номера потока является создание уникального кода для разных потоков:

```
if (omp_get_thread_num() .EQ. 3) then
    <ИНДИВИДУАЛЬНЫЙ КОД ДЛЯ ПОТОКА 3>
else
    <КОД ДЛЯ ВСЕХ ОСТАЛЬНЫХ ПОТОКОВ>
end if
```



Технология OpenMP

Если в параллельной секции встретился оператор цикла, то он будет выполнен **всеми** потоками в полном объеме.

Для распределения итераций между потоками нужно использовать директиву `do`

```
!$omp do [ОПЦИИ]
    <do-цикл>
!$omp end do
```

Опция `schedule` определяет способ распределения итераций:

```
schedule(static,m)
schedule(dynamic,m)
schedule(guided,m)
schedule(runtime)
```



Технология OpenMP

Все переменные в параллельной секции делятся на =

shared() – общие для всех потоков

private() – уникальные для каждого потока

Если переменная объявлена как `private`, то для каждого потока будет создана ее копия, дальнейшее изменение этой переменной каждым потоком никак не влияет на ее значение в других потоках.

Если же переменная объявлена как `shared`, то она является единой для всех потоков.



Технология OpenMP

В некоторых случаях появляется необходимость синхронизации потоков для корректной работы программы. Для этого в OpenMP имеется несколько директив:

!\$omp nowait – по умолчанию директивы OpenMP (например, `do`, `sections`) содержат в конце неявную синхронизацию, данная директива позволяет избежать ее.

!\$omp barrier – обеспечивает барьерную синхронизацию, дальнейшее выполнение программы продолжится только после достижения данной точки всеми потоками.



Технология OpenMP

!\$omp flush – выполнение данной директивы предполагает, что значения всех переменных, хранящихся в регистрах, будут занесены в основную память, все изменения переменных станут видимыми всем потокам, буферы будут сброшены и т.д.

!\$omp critical

<код>

!\$omp end critical

– данная структура описывает «критическую область», код критической области будет выполнен всеми потоками, но последовательно, то есть в каждый момент времени код критической области может выполняться только одним потоком.

Технология OpenMP

Пример программы сложения двух векторов с применением OpenMP

```
program vec
integer, parameter :: N = 1000
integer, parameter :: nt = 100
integer :: i
real, dimension(N) :: A, B, C
do i = 1, N
    A(i) = i*1.0
    B(i) = A(i)
end do
!$omp parallel do schedule(dynamic,nt) shared(A,B,C)
private(i)
    do i = 1, N
        C(i) = A(i) + B(i)
    end do
!$omp end do nowait
end program vec
```

Использованные источники информации

1. В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. Параллельные вычисления, СПб: БХВ-Петербург, 2004 г.
2. М.П. Левин. Параллельное программирование с использованием OpenMP, М: Бином, 2008 г.
3. С. Немнюгин, О. Стесик. Фортран в задачах и примерах, СПб: БХВ-Петербург, 2008 г.
4. <http://parallel.ru>
5. <http://openmp.org>



Квантовая информация, квантовые компьютеры: современное состояние и перспективы

А. И. Гельман

“... and if you want to make a simulation of Nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy.”

— Richard P. Feynman, “Simulating Physics with Computers”, May 1981

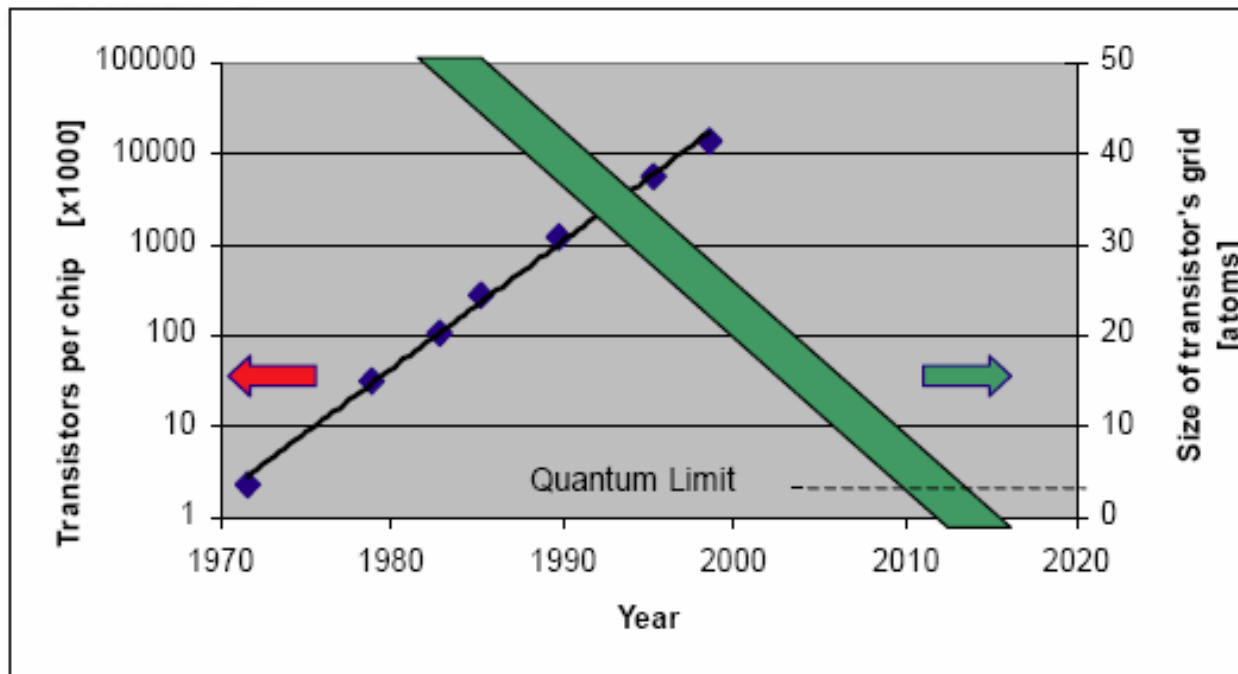
Введение

Квантовая механика

теория информации

физика квантовой информации

- Тьюринг, 1936 – начала современной информатики, машина Тьюринга
- Транзистор, развитие компьютеров, закон Мура – но квантовые эффекты..



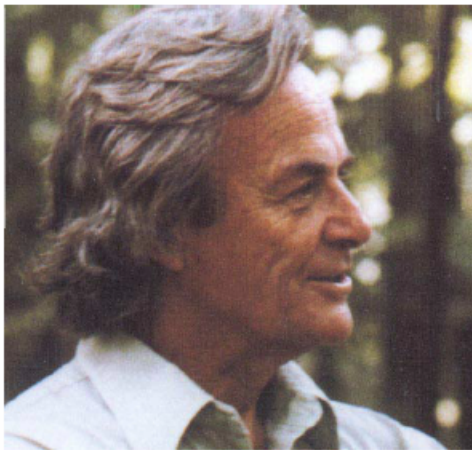
Д. Бауместер, А. Экерт, А. Цайлингер, Физика квантовой информации, Москва (2002).
М. Нильсен, И. Чанг, Квантовые вычисления и квантовая информация, Мир, Москва (2006).

Введение

Квантовый компьютер может работать лучше

-Тезис Черча-Тьюринга – любой алгоритмический процесс может быть эффективно смоделирован на машине Тьюринга

A computer that operates on quantum states can perform tasks that are beyond the capability of any conceivable classical computer.



Feynman '81



Deutsch '85



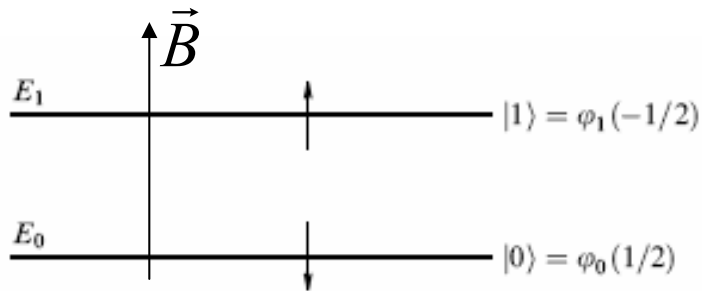
Shor '94

Введение

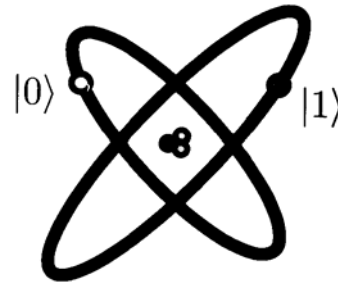
1. Введение
2. Физика квантовой информации
 - 2.1. Основные понятия, кубит, запутанность
 - 2.2 Основные алгоритмы
 - квантовая телепортация
 - квантовая криптография
 - 2.3. Основные достижения и планы
3. Квантовые компьютеры
 - 3.1 Критерий Дивинченцо, обзор направления
 - 3.2. Квантовый компьютер на ЯМР
 - 3.3. Квантовый компьютер на ионной ловушке
 - 3.4. Квантовый компьютер на твердотельных полупроводниках
 - 3.5. Основные направления развития, финансирование
 - 3.6. Заключение

Кубит - квантовый бит

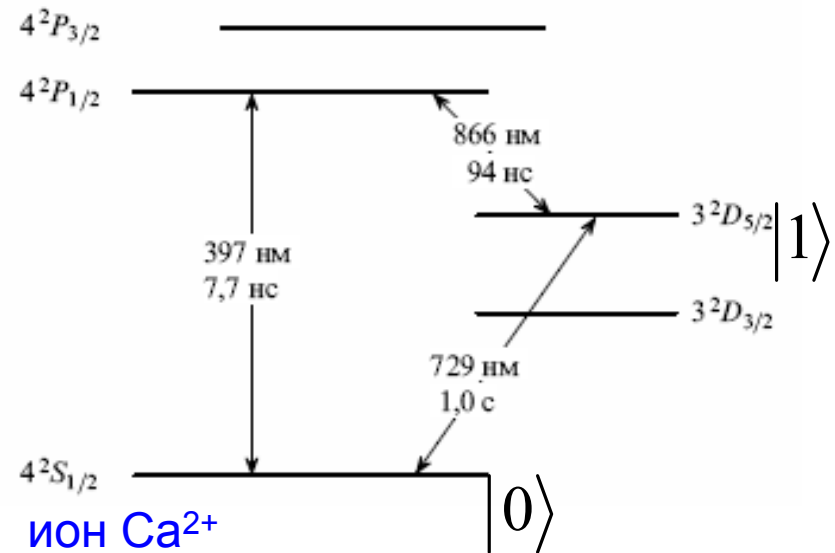
$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$



Ядерный, электронный спин $1/2$
в постоянном магнитном поле



Два электронных
уровня в атоме



ион Ca^{2+}

Большое время жизни перехода – 1 с

А также:

- Электронны в квантовых точках
- В сверхпроводнике - заряд куперовской пары
- Фотоны (любые 2 состояния с ортогональной поляризацией)

Перепутанность (entanglement)

Два кубита,
4 состояния

$$|\psi\rangle_A = \alpha_A |0\rangle_A + \beta_A |1\rangle_A \quad |\psi\rangle_B = \alpha_B |0\rangle_B + \beta_B |1\rangle_B$$

$$|\psi\rangle_{AB} = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{11} |11\rangle$$

Чистое состояние:

$$|\psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A |\psi\rangle_B$$

Перепутанное 2-х
атомное состояние:
ЭПР-пара

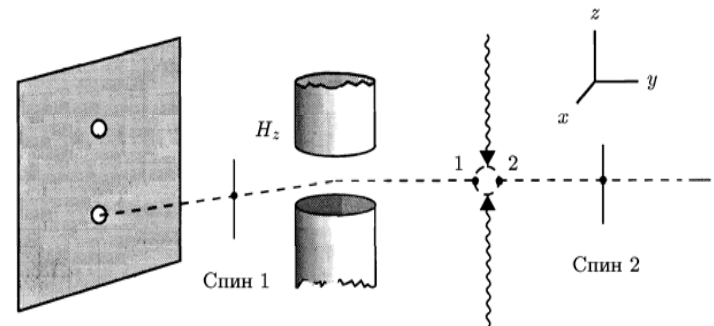
$$|\psi\rangle_{AB} = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{11} |11\rangle$$

Одноатомные
состояния

$$|\psi\rangle_A \quad \text{Не определено} \quad |\psi\rangle_B \quad \text{Не определено}$$

Распад двухкомпонентной системы
с нулевым моментом импульса на 2 частицы
Со спином $\frac{1}{2}$ (эксперимент Штерна-Гелаха)

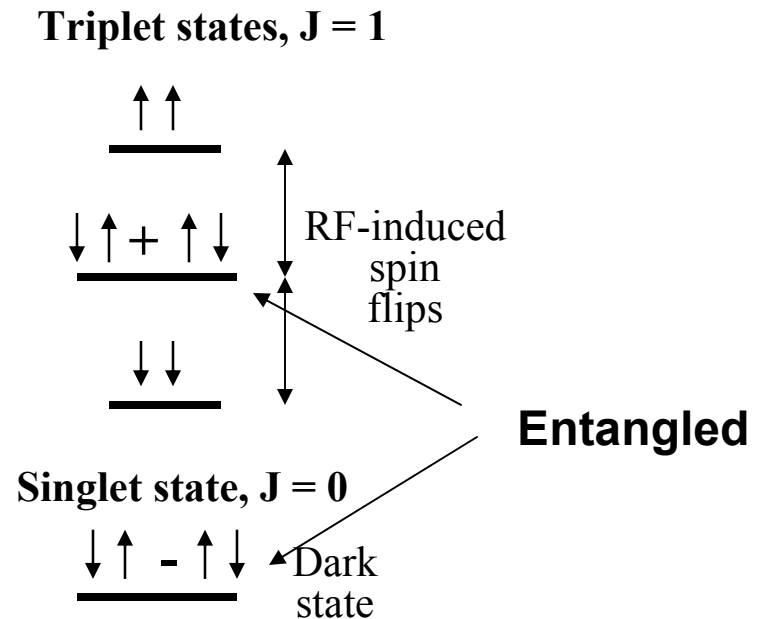
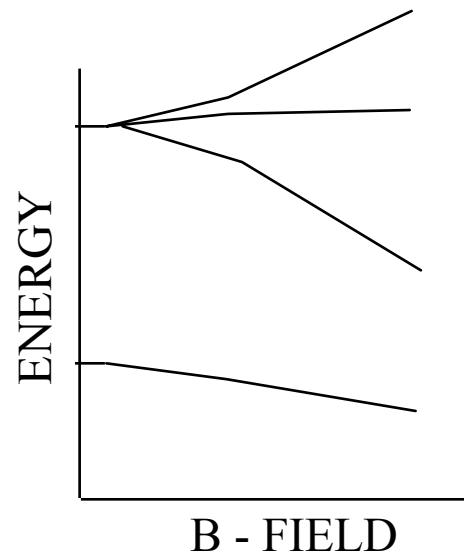
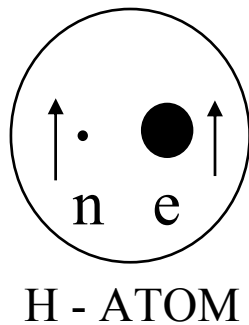
$$|\psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle)$$



Перепутанность (entanglement)

Водород в слабом поле

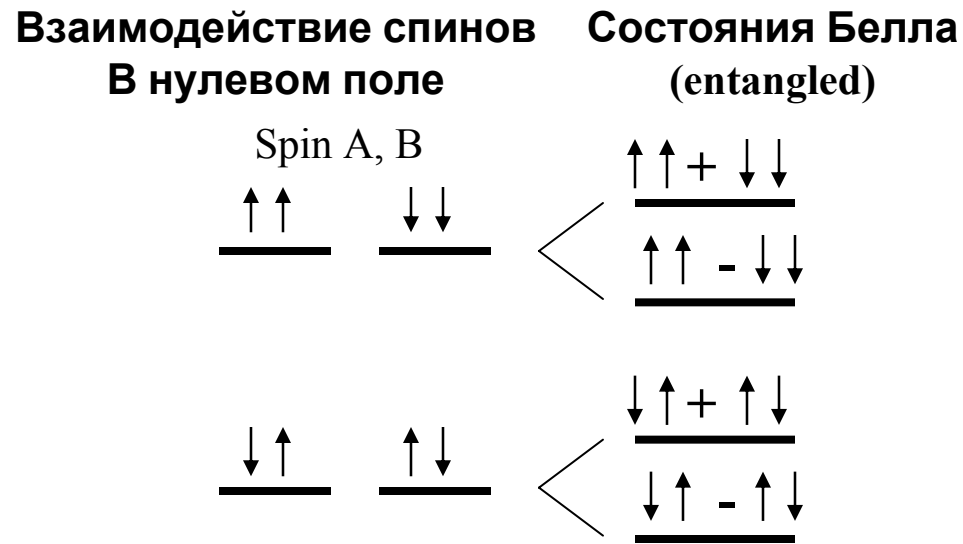
- Взаимодействие ядерного и электронного спинов
 - ядерный спин I , электронный спин S , полный спин J
- Сверхтонкая структура
- При $m=0$ состояния перепутаны



Перепутанность (entanglement)

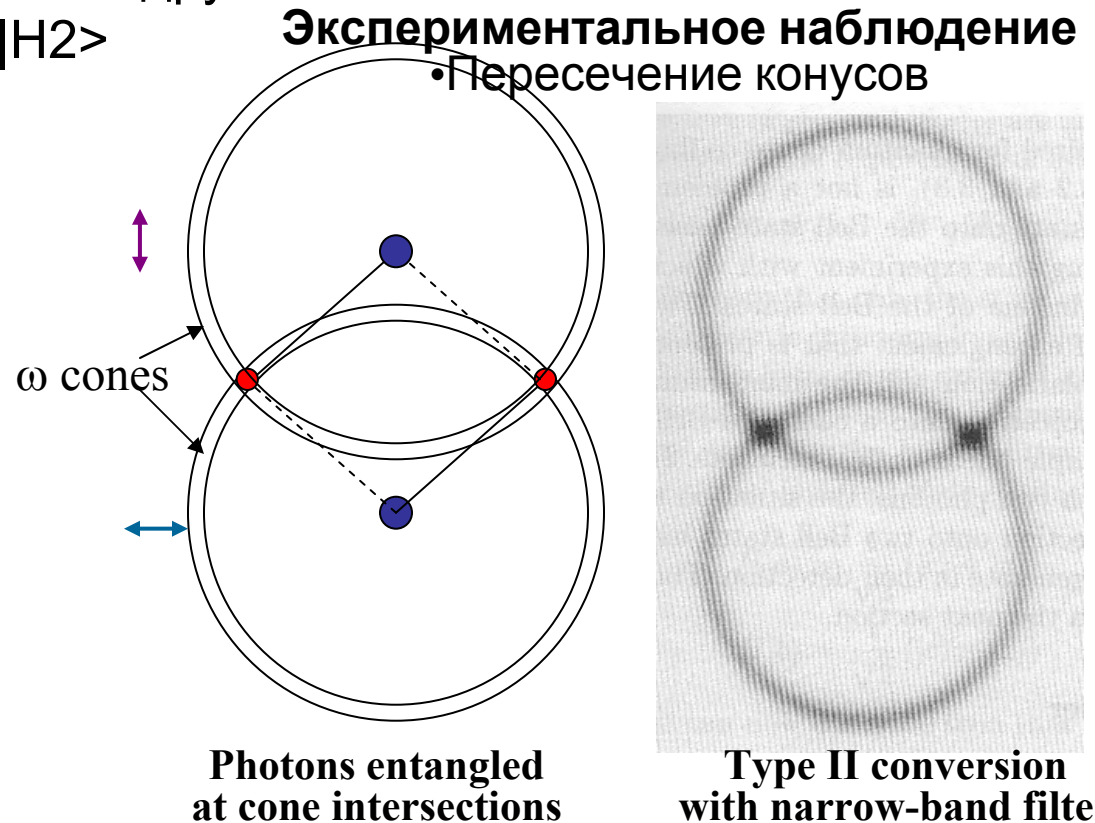
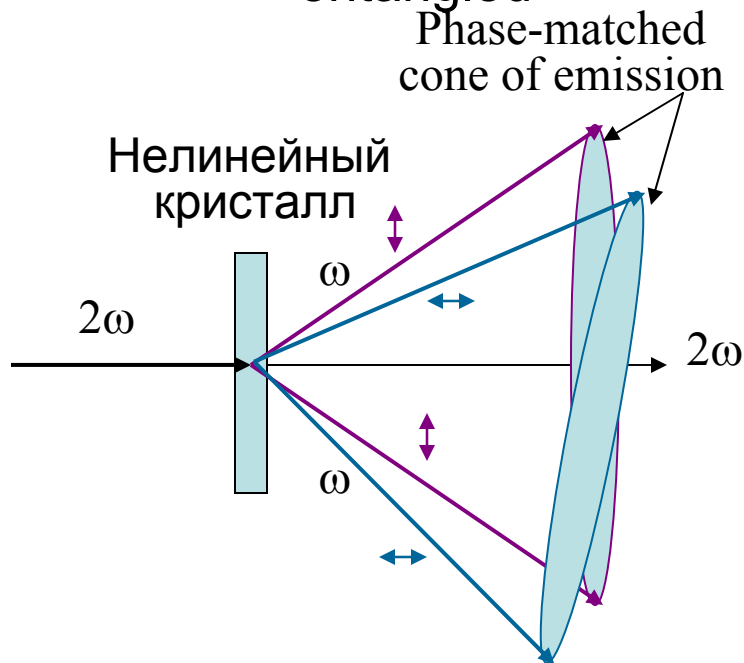
Взаимодействие двух спинов

- **Нулевое внешнее поле**
 - Взаимодействие только с магнитным полем соседа
- Расщепление по энергиям
- Состояния Белла



Перепутывание фотонных пар

- Тип II параметрическая внизконверсия (распад)
- Фотоны излучаются парами ортогональной поляризации
- Наблюдаем H поляризацию в одном пересечении
 - Должны получить V - в другом
 - $|H1\rangle|V2\rangle + e^{i\phi} |V1\rangle|H2\rangle$
 - entangled

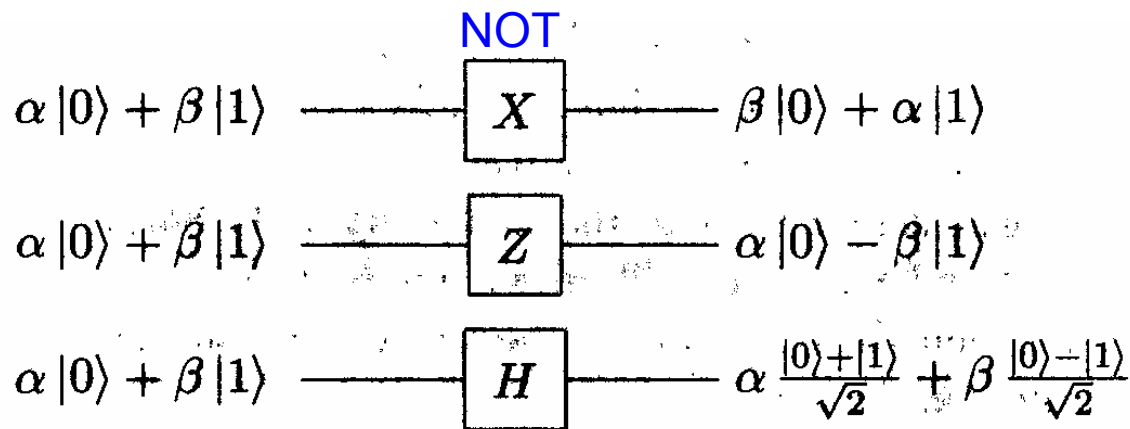


Операции над кубитами

В общем виде – унитарная матрица

$$U = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

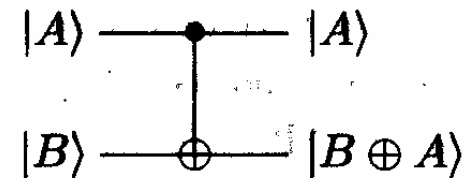
Однокубитовые операции



Элемент Адамара

множкубитовые операции

Controlled NOT

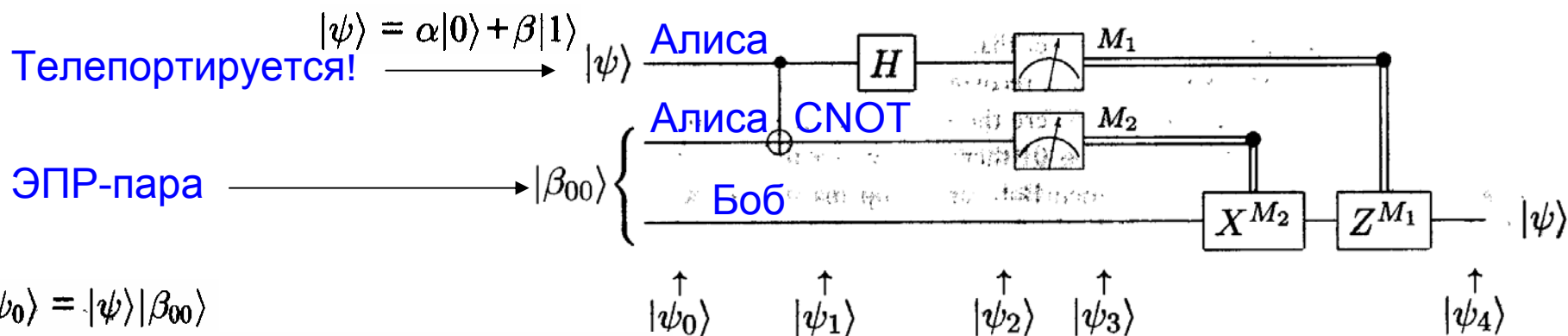


$$U_{CN} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$|10\rangle \rightarrow |11\rangle; |11\rangle \rightarrow |10\rangle$$

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle; |01\rangle \rightarrow |01\rangle;$$

Квантовая телепортация



$$|\psi_0\rangle = |\psi\rangle|\beta_{00}\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha|0\rangle(|00\rangle + |11\rangle) + \beta|1\rangle(|00\rangle + |11\rangle)]$$

CNOT

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha|0\rangle(|00\rangle + |11\rangle) + \beta|1\rangle(|10\rangle + |01\rangle)]$$

Элемент Адамара

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2} [\alpha(|0\rangle + |1\rangle)(|00\rangle + |11\rangle) + \beta(|0\rangle - |1\rangle)(|10\rangle + |01\rangle)]$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2} [|00\rangle (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) + |01\rangle (\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) + |10\rangle (\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle) + |11\rangle (\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)]$$

Измерение Алисой каждого кубита в базисе Белла

$$|\psi\rangle_3$$

$$00 \mapsto |\psi_3(00)\rangle \equiv [\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle]$$

$$01 \mapsto |\psi_3(01)\rangle \equiv [\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle]$$

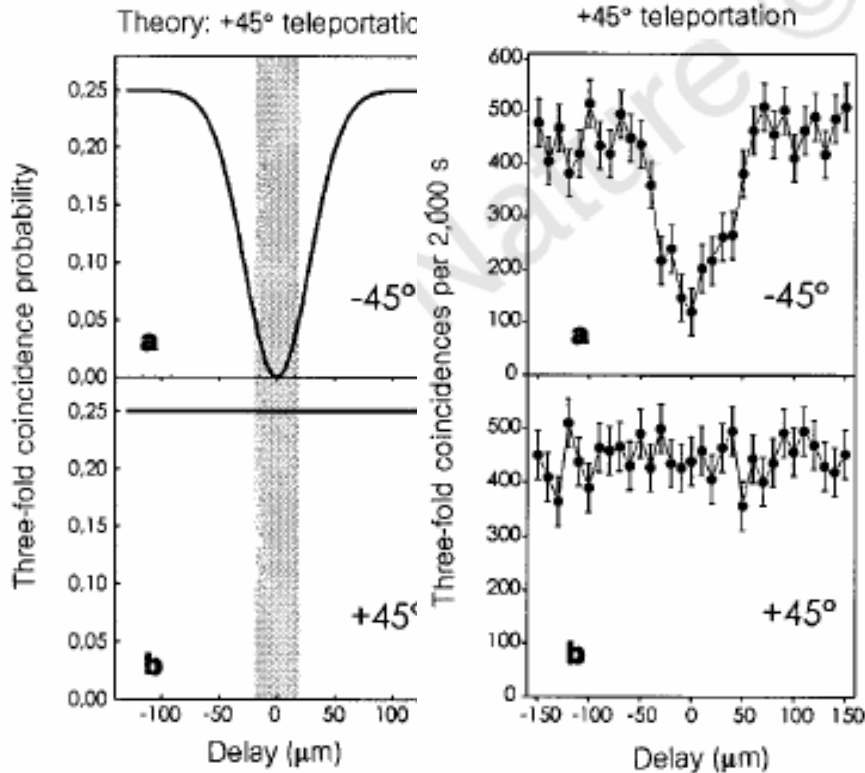
$$10 \mapsto |\psi_3(10)\rangle \equiv [\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle]$$

$$11 \mapsto |\psi_3(11)\rangle \equiv [\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle]$$

Передача классической Информации к Бобу

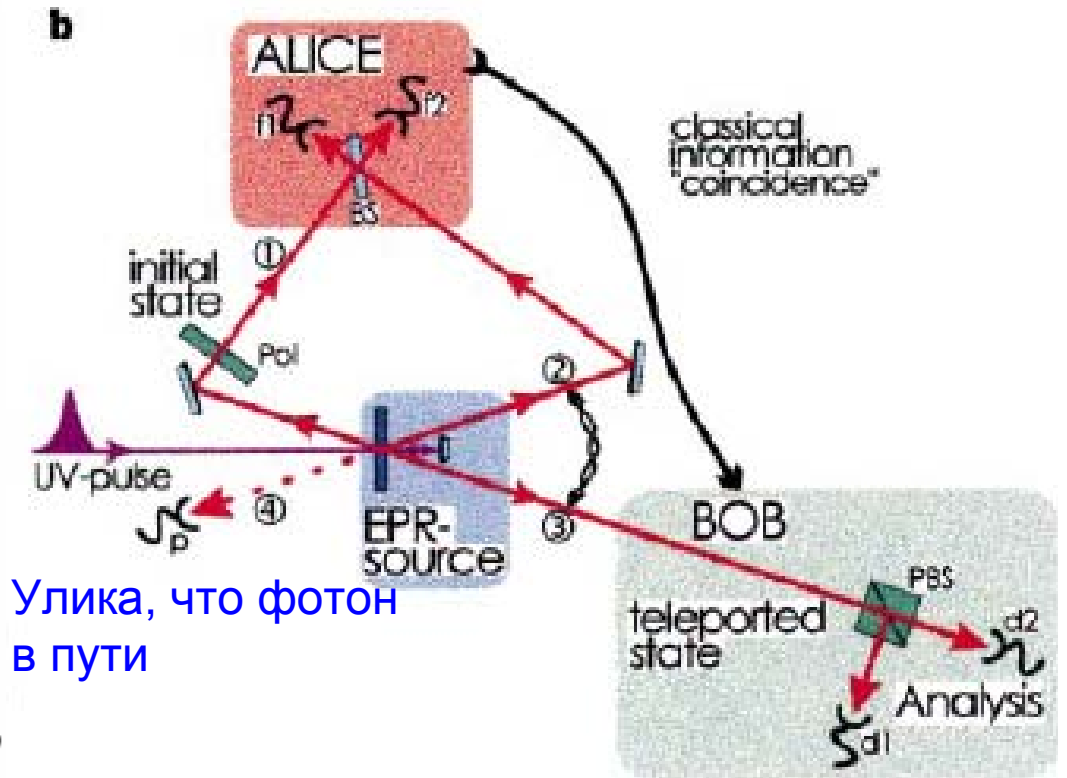
Выполнение логических операций над кубитом Боба при необходимости

Квантовая телепортация



теория

эксперимент



Улика, что фотон в пути

Нет передачи со скоростью
Большой скорости света!!!

Нет клонирования!!!

Experimental quantum Teleportation, D. Bouwmeester, Ji. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter & A. Zeilinger, Nature, 190, 1997

Квантовая криптография

Системы с секретным ключом

Как распределять ключи???

Системы с открытым ключом

Нет проблемы распределения ключей, но можно взломать за большое? время

RSA

RSA-129 (129 digits = 428 bits)

- The initial 1979 challenge posed in *Scientific American*
- « 428 bits key secure for 40 quadrillion years!!! »

Factored in 3 months in 1994 !!!

RSA-155 (155 digits = 512 bits) factored in 1999

RSA-160 (160 digits) factored in 2003

RSA-576 (174 digits = 576 bits) factored in 2003

RSA-640 (193 digits = 640 bits) factored in **NOV 2005**

- Публичный ключ для шифрования – большое число
- Секретный ключ для дешифровки
 - Простые сомножители большого числа
- Факторизация – нет эффективного алгоритма, экспоненциальное время расчета, ОДНАКО...
- **Квантовый компьютер может делать эту операцию эффективно!!!**
 - **Алгоритм Шора, 1994**

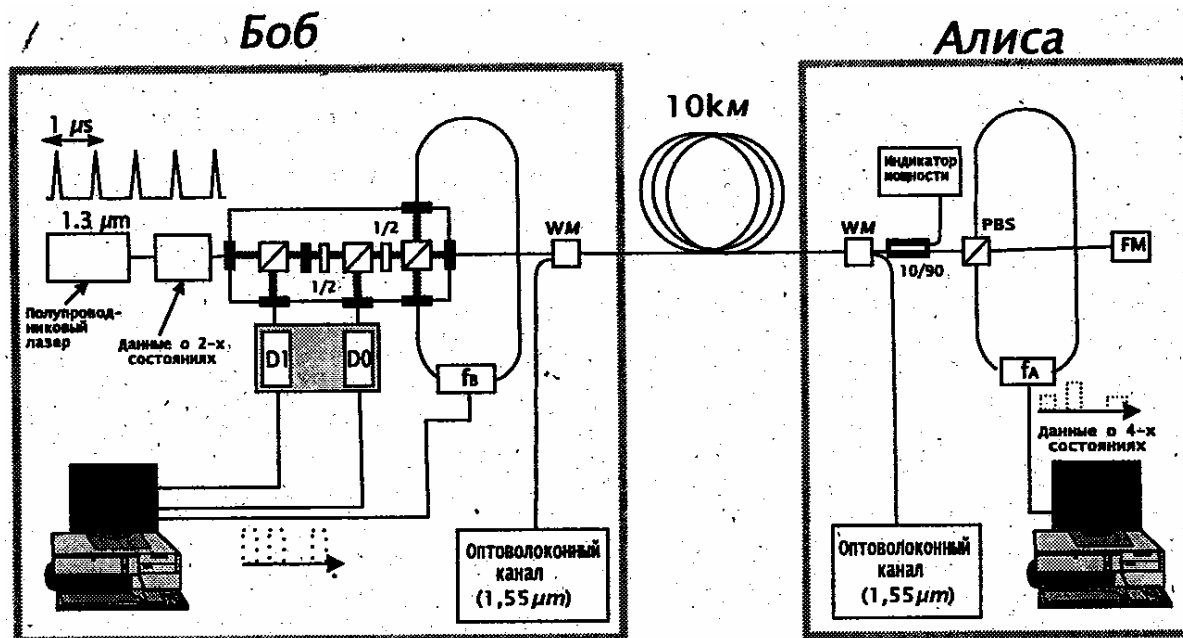
P. W. Shor. Algorithms for quantum computation, IEEE pres, LA, CA, 1994

Квантовая криптография

Квантовое распределение ключей

- Доказанная принципиальная безопасность на основе квантовой механики.
- Измерение (подслушивание) возмущает систему (канал связи для согласования ключа), что будет замечено!!!
 - Уже реализовано
 - Высокие скорости передачи

Установка IBM



Квантовая криптография

Quantum Security...
at last

Quantum Key Distribution System



Key distribution over optical fiber
with absolute security

Main features

- ▶ First quantum cryptography system
- ▶ Security guaranteed by quantum physics
- ▶ Point-to-point key distribution
- ▶ Standard optical fiber
- ▶ Distances up to 70 km
- ▶ Key rate up to 1000 bits/s
- ▶ Compact and reliable

Key distribution is a central problem in cryptography. Currently, public key cryptography is commonly used to solve it. However, these algorithms are vulnerable to increasing computer power. In addition, their security has never been formally proven.

Quantum cryptography exploits a fundamental principle of quantum physics - observation causes perturbation - to distribute cryptographic keys with absolute security.

id Quantique is introducing the first quantum key distribution system. It consists of an emitter and a receiver, which can be connected to PCs through the USB port.

id Quantique

15 rue Copernic, 13000 Marseille, France
Tel: +33 (0)20 701 46 20 Fax: +33 (0)20 701 46 21
e-mail: info@idquantique.com
web: <http://www.idquantique.com>



© Quantique Key by a Copernic group

Performance

Key exchange rate / over	Units
10 km :	4000 Bits/s
20 km :	1500 Bits/s
50 km :	100 Bits/s

Notes

*: The key exchange rate depends on the actual fiber attenuation.

Interface

Platform	Windows 98 2 nd ed., 2000, ME, XP
Interface	USB version 1.0, 12 Mbit/s Plug & Play connection

USB
Plug & play

General information

	Emitter	Receiver	
Optical connector *		FC/PC	
Operating temperature	+10 to +30		°C
Dimension (L x W x H)	32 x 46 x 16		cm
Weight	10	7	kg
Power supply	110 - 230		VAC

Notes

*: Other connector types available upon request.

Sales Contact

For further information on this or other products, please contact id Quantique by phone: (+41) 022 701 46 20 or e-mail: info@idquantique.com

Disclaimer

The information and specification set forth above are subject to change at any time by id Quantique without prior notice. February 2002.

Квантовая криптография

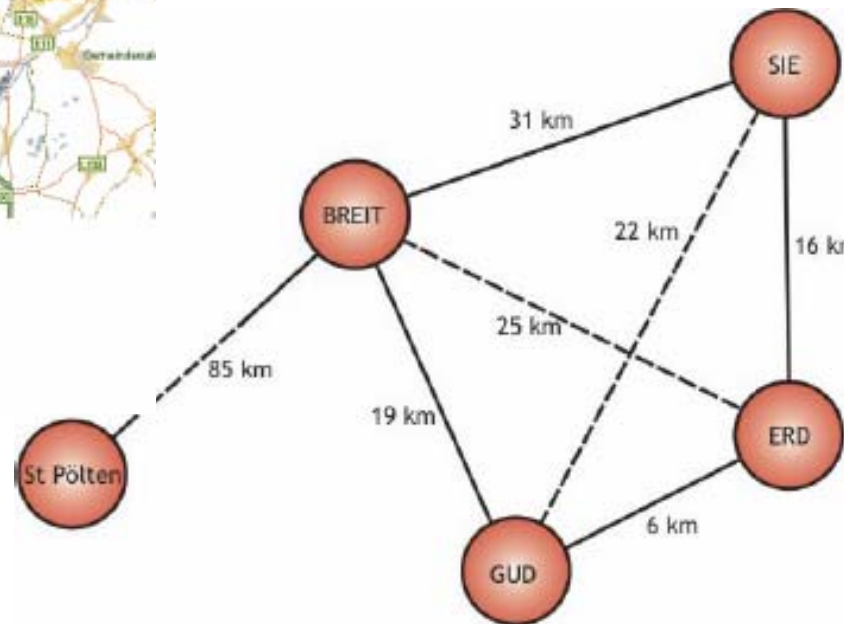
- Протокол BB84
 - Алиса кодирует данные последовательностью импульсов (кубитов – фотонов) используя H , V или $+45$, -45 базис по поляризации
 - Максимум один фотон в импульсе (кубит)
- Боб по открытому каналу объявляет о получении и измеряет полученные кубиты в случайном базисе из возможных.
 - часть фотонов не доходит, малая интенсивность
 - Скорость – несколько сотен в секунду, растет
- Алиса объявляет базис в котором она измеряла
 - Оставляются только те биты, измеренные в правильном базисе (Алисы), остальные отбрасываются
- Проверка на прослушивание – сравнение контрольных битов
- При прослушивании измеряются кубиты в произвольном базисе
 - нет возможности получить информацию
 - При попытке послать ложную информацию – произвольный базис, Боб будет знать.

Квантовая криптография



Vienna, September 2008

- 5 QKD Technologies
- 5 Nodes / 7 Links



Квантовая криптография

- Проблемы
 - Требуются слабые импульсы для получения одного фотона (кубита)
 - Как результат – большинство импульсов без фотона,
 - Медленные скорости
 - Требуются управляемые источники одиночных фотонов, область интенсивно исследуется

Квантовая информация, Квантовая коммуникация

1. Системы на основе волоконной оптики 1550 нм, 1300 нм

Текущее состояние:

Реализованы основные протоколы на длинах не более 100 км при текущем оборудовании и волокне

Направления развития:

- **Повышение скорости передачи информации** (улучшение детекторов, поиск новых протоколов, развитие источников одиночных фотонов с повышением частоты генерации)
2. **Увеличение дистанций** (улучшение детекторов, улучшение волокна – Фотонные Кристаллы, использование эффектов квантовой телепортации, передачи запутанности, создание квантовых повторителей)
 3. Использование непрерывных переменных (только начинает развиваться, замена концепции кубита, использование квадратур света)
 4. Поиск новых приложений и протоколов

Квантовая информация, Квантовая коммуникация

2. Системы на основе распространения в свободном пространстве Free space systems

Текущее состояние:

Далеко не все реализовано, только в лаборатории

Направления развития:

- Передача перепутанности на расстояния более 5 км
- Телепортация (через спутник)
- Криптография (через спутник)

3. Квантовые интерфейсы, квантовая память, квантовые повторители

Текущее состояние:

Направления развития:

- Разработка интерфейсов преобразования кубитов света (фотонов) в атомные кубиты (CQED, атомные ансамбли и эффект ЭИП – до 4 мсек)

B. Julsgaard, J. Sherson, J.I. Cirac, J. Fiurášek, and E.S. Polzik,

Experimental demonstration of quantum memory for light, Nature 432, 482 (2004)

Квантовый компьютер

A Quantum Information Science and Technology Roadmap

Part 1: Quantum Computation

Report of the Quantum Information Science and Technology Experts Panel

“... it seems that the laws of physics present no barrier to reducing the size of computers until bits are the size of atoms, and quantum behavior holds sway.”
Richard P. Feynman (1985)

Disclaimer:
The opinions expressed in this document are those of the Technology Experts Panel members and are subject to change. They should not be taken to indicate in any way an official position of U.S. Government sponsors of this research.

April 2, 2004
Version 2.0



QIPC
QUANTUM INFORMATION PROCESSING AND COMMUNICATION

Strategic report on current status, visions and goals for research in Europe

Version 1.6, February 2008


Roadmap Committee Members


Th. Beth [†] (Karlsruhe)	A. Imamoglu (ETH Zürich)	G. Rempe (MPQ Garching)
R. Blatt (Innsbruck)	A. Karlson [†] (EC Brussels)	A. Sergienko (Boston)
H. Briegel (Innsbruck)	J. Kempe (LRI Orsay)	D. Suter (Dortmund)
D. Bruss (Düsseldorf)	L. Kouwenhoven (TU Delft)	R. Thew (Geneva)
T. Calarco (Trento)	S. Kröll (Lund)	J. Twamley (Maynooth)
J.I. Cirac (MPQ Garching)	G. Leuchs (Erlangen)	G. Wendin (Göteborg)
D. Deutsch (Oxford)	M. Lewenstein (Barcelona)	R. Werner (Braunschweig)
J. Eisert (London & Potsdam)	D. Loss (Basel)	A. Winter (Bristol)
A. Ekert (Cambridge)	N. Lütkenhaus (Erlangen)	J. Wrachtrup (Stuttgart)
C. Fabre (Paris)	S. Massar (Brussels)	P. Zanardi (Torino)
N. Gisin (Geneva)	J. E. Mooij (TU Delft)	A. Zeilinger (Vienna)
P. Grangier (Orsay)	M. B. Plenio (London)	P. Zoller [*] (Innsbruck)
M. Grassl (Karlsruhe)	E. Polzik (Copenhagen)	
S. Haroche (ENS Paris)	S. Popescu (Bristol)	

Document coordination: ERA-Pilot WorkPackage 1 – QUROPE WorkPackage 2

Editing & Composing: D. Binosi

[†]Deceased
^{*}Editing author

 <http://qst.elect.it>

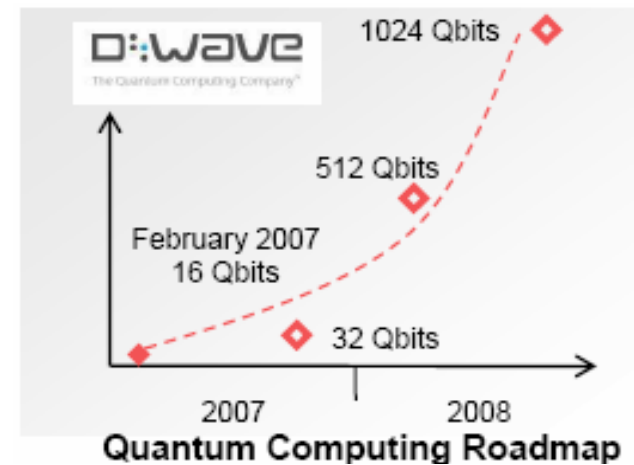
 <http://www.qurope.net>

to develop by 2012 a suite of viable emerging-QC technologies of sufficient complexity to function as quantum computer-science test-beds in which architectural and algorithmic issues can be explored.

Квантовый компьютер

Идеальный квантовый компьютер

Цифровой компьютер с аналоговым управлением



К. А. Валиев, УФН, 175 (2005)

Моделирование квантового компьютера на классическом: 2^n комплексных амплитуд

$n=16$ - 65536 чисел

$n=400$ - больше чем частиц во вселенной

$n=1000$ - для нормального функционирования кв. компьютера

Квантовая теория релаксации. Общие методы исследования.

Общий вид уравнения для оператора плотности -
форма Линдблада

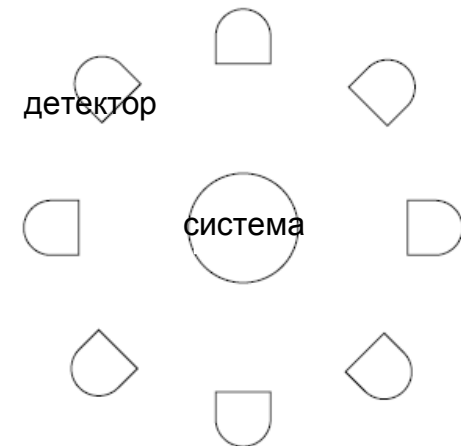
G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976).

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H_{\text{sys}}, \rho] + \sum_{j=1}^{N_c} \frac{1}{2} \gamma_j (2c_j \rho c_j^+ - \rho c_j^+ c_j - c_j^+ c_j \rho) = -\frac{i}{\hbar}(H_{\text{eff}} \rho - \rho H_{\text{eff}}^+) + \sum_{j=1}^{N_c} J_j \rho$$

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{sys}} - \frac{i}{2} \hbar \sum_{j=1}^{N_c} \gamma_j c_j^+ c_j \quad \text{неэрмитов эффективный Гамильтониан}$$

$$J_j \rho = \gamma_j c_j \rho c_j^+ \quad \text{оператор квантового скачка}$$

N_c - число резервуаров c_j оператор системы,
взаимодействующий
с j -ым резервуаром



Возможна следующая интерпретация

M. B. Plenio, P.L. Knight, Rev. Mod. Phys., 70(1), 101-143 (1998).

H. Carmichael, An Open System Approach to Quantum Optics (Springer, Berlin, 1993).

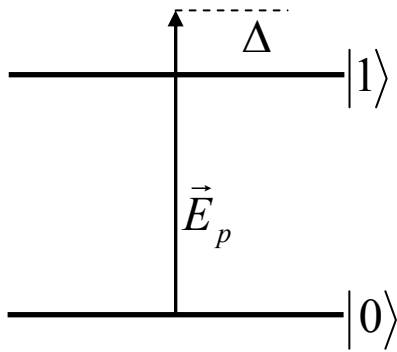
J. Dalibard, Y. Castin, et.al., Phys. Rev. Lett. **68**, 580 (1992).

N. Gisin and I. Percival, J. Phys. A **25**, 5677 (1992); **26**, 2233(1993).

C. Gardiner, A. Parkins, and P. Zoller, Phys. Rev. A **46** 4363 (1992).

Результаты тестирования

1. Двухуровневый атом под действием резонансного поля, в вакууме



$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H_{sys}, \rho] + \frac{\Gamma}{2}(2\sigma_{01}\rho\sigma_{10} - \sigma_{11}\rho - \rho\sigma_{11})$$

$$\Delta = \omega_p - \omega_{10}$$

$$H_{sys} = -\hbar\Delta\sigma_{11} + \hbar\Omega(\sigma_{01} + \sigma_{10})$$

$$\Omega = \frac{\mu_{01}E_p}{\hbar}$$

$$\sigma_{ij} = |i\rangle\langle j|, \quad i, j = 0, 1$$

$$H_{eff} = \hbar(-\Delta - i\frac{\Gamma}{2})\Delta\sigma_{11} + \hbar\Omega(\sigma_{01} + \sigma_{10})$$

$$c_1 = \sigma_{01}$$

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H_{eff}(t)|\psi(t)\rangle$$

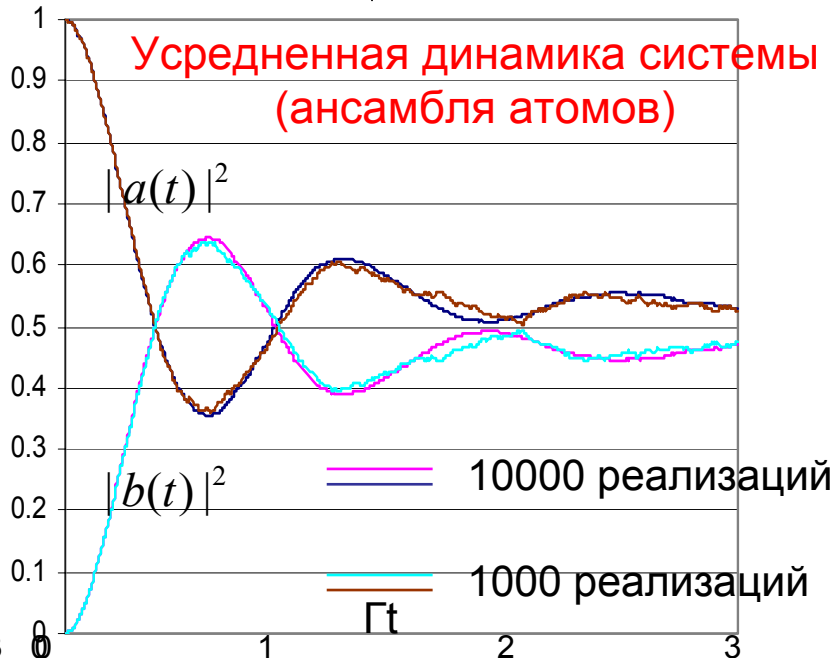
$$|\psi(t)\rangle = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle$$

$$\dot{a}(t) = -i\Omega b(t)$$

$$\dot{b}(t) = -(\Gamma - i\Delta)b(t) - i\Omega a(t)$$

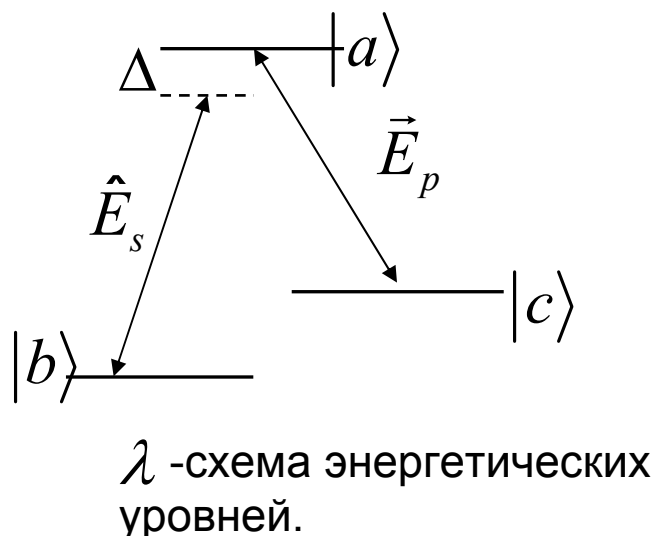
$$c_1|\psi(t)\rangle = b(t)|0\rangle$$

$$\Delta P_1(t) = \Gamma\Delta t |b(t)|^2$$



$$\Delta = 0$$

Взаимодействие лямбда-атома с квантованным полем. Метод Гейзенберга-Ланжевена



$|b\rangle \rightarrow |c\rangle$ - Запрещенный переход

$$\omega_p = \omega_{ac} \quad \Delta = \omega_{ab} - \omega_s$$

$\sigma_{ij} = |i\rangle\langle j|$ - операторы атомных переходов

$\{|i\rangle\}$ полный набор собственных энергетических состояний атома $\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{I}$

Сигнальное поле описывается оператором

$$\hat{E}_s = \hat{E}_s^+ + \hat{E}_s^- = \vec{e} \varepsilon(\omega_s) \hat{a}(\xi, t) e^{-i\omega_s t + ik_s z} + \vec{e} \varepsilon(\omega_s) \hat{a}^\dagger(\xi, t) e^{i\omega_s t - ik_s z}$$

$$\varepsilon(\omega) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} \quad V - \text{Объем квантования} \quad [a(\xi), a^\dagger(\xi')] = \frac{L}{c} \delta(\xi - \xi')$$

1. D. Akamatsu et.al. *Ultraslow Propagation of Squeezed Vacuum Pulses with Electromagnetically Induced Transparency* **Phys. Rev. Lett.** **2007.** V. 99. P. 153602.
2. K. Honda et. al. *Storage and Retrieval of a Squeezed Vacuum* **Phys. Rev. Lett.** **2008.** V. 100. P. 093601
3. J. Appel et. al. *Quantum Memory for Squeezed Light* **Phys. Rev. Lett.** **2008.** V. 100. P. 093602

Взаимодействие лямбда-атома с квантованным полем. Метод Гейзенберга-Ланжевена

В зависимости от параметра сжатия r наблюдается уменьшение дисперсии оператора σ_3 вблизи резонанса (ограничено шумом)

Передача квантовых характеристик поля среде






































А. И. Гельман, В. А. Миронов. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВОЙ РЕЛАКСАЦИИ В МНОГОУРОВНЕВЫХ АТОМНЫХ СИСТЕМАХ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО, Препринт ИПФ, 2008 г.
А. И. Гельман, В. А. Миронов. Подавление шума в атомной системе под действием поля в сжатом когерентном состоянии, Отправлено в ЖЭТФ.

Квантовый компьютер

Критерий Дивенченцо

- #1. Масштабируемая физическая система, понятно представленные кубиты.
- #2. Возможность готовить начальное состояние
- #3. Времена декогерентизации много больше времени операции
- #4. Выполнение универсального набора логических операций
- #5. Измерение конечного состояния

QC Approach	Quantum Computation				
	#1	#2	#3	#4	#5
NMR					
Trapped Ion					
Neutral Atom					
Cavity QED					
Optical					
Solid State					
Superconducting					

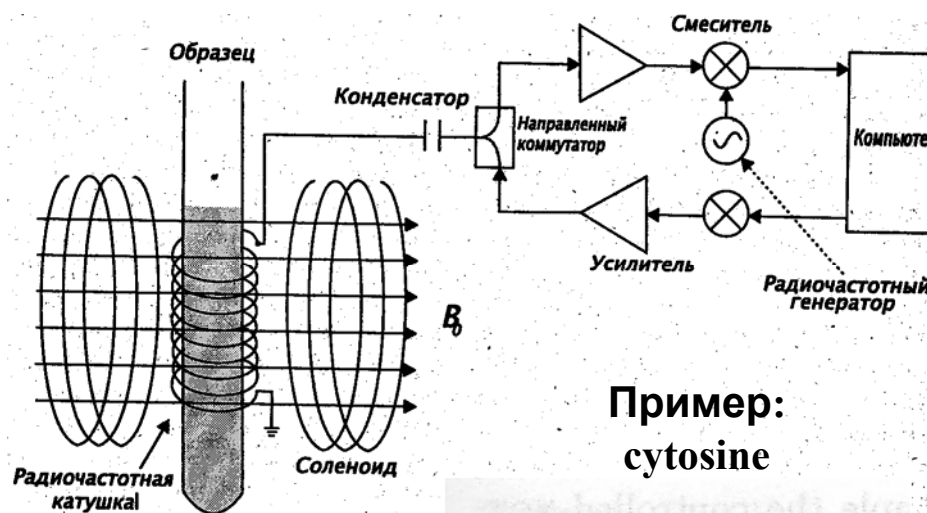
Квантовый компьютер

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР, NMR)

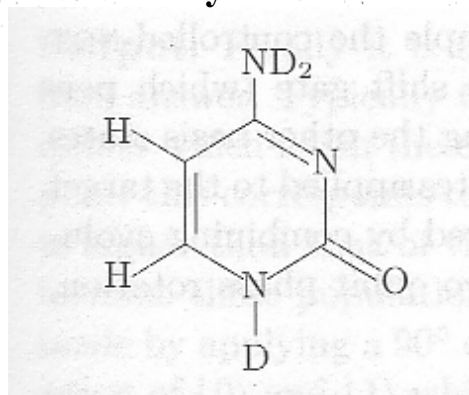
Cory, D.G., A.F. Fahmy and T.F. Havel, "Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy," *Proceedings of the National Academy of Science (USA)* **94**, 1634–1639 (1997).

Ollerenshaw, J.E., D.A. Lidar, and L.E. Kay, "Magnetic resonance realization of decoherence-free quantum computation," *Physical Review Letters* **91**, 217904 (2003).

Физическая реализация



Пример:
cytosine



$$B_0 \sim 11,7 \text{ Тл}$$

$$\omega_0 \sim 500 \text{ МГц} \quad \text{Частота ЯМР протонов}$$

1. Последовательность импульсов осуществляет нужное преобразование над состояниями Ядер.
2. Измеряется конечное состояние спинов (сигнал свободно затух. индук)
3. По пикам в спектре можно определить состояние соответствующих спинов

Квантовый компьютер

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР, NMR)

1. **Представление кубита.** Ядерный спин
2. **Унитарная эволюция.** Произвольное преобразование можно реализовать, действуя импульсными магнитными полями на спины, находящиеся в сильном магнитном поле. Спин-спиновое взаимодействие обеспечивается химической связью атомов
3. **Приготовление начального состояния.** Состояние термодинамического равновесия, поляризация спинов в сильном магнитном поле.
4. **Получение конечного результата.** Измерение сигнала индукции, возникающего при прецессии магнитного момента
5. Времена релаксации $T \sim 1$ с, много больше времени логической операции 0,005 с, около 100 операций/сек

Особенность: усреднение по многим квантовым компьютерам (молекулам)

Недостатки: если поляризация спинов в начальном состоянии не достаточно высока, амплитуда выходного сигнала экспоненциально убывает с ростом числа кубитов.

низкие скорости логических операций (< 1 кГц)

не больше 10 кубитов – невозможно различить

Достоинства: реализованы основные протоколы ФКИ

хорошо разработан механизм, аппаратура доступна

Квантовый компьютер

Ионная ловушка

Cirac, J.I. and P. Zoller, "Quantum computations with cold trapped ions," *Physical Review Letters* **74**, 4091–4094 (1995).

Kielinski, D., C. Monroe, and D.J. Wineland, "Architecture for a large-scale ion-trap quantum computer," *Nature* **417**, 709–711 (2002).

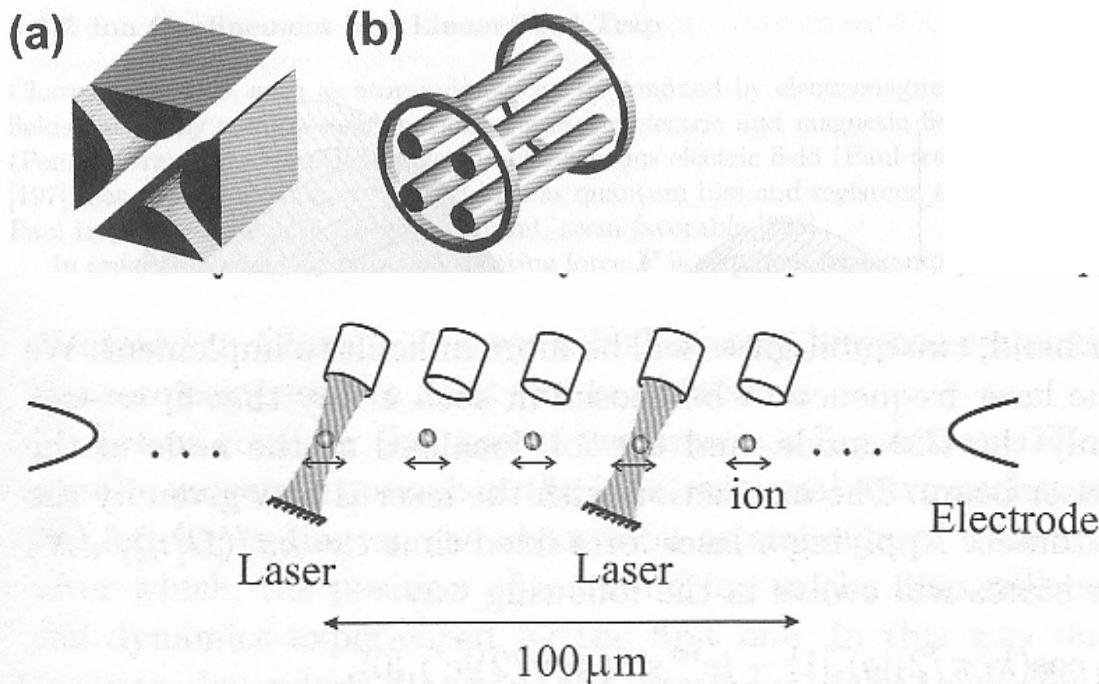
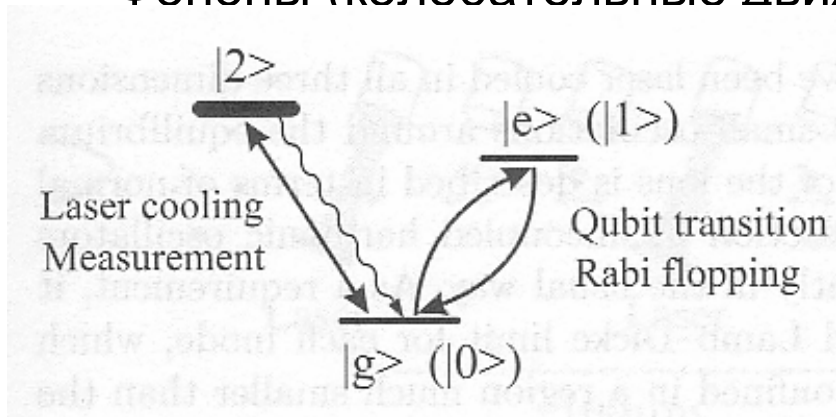


Fig. 4.10. N ions in a linear trap interacting with laser light. The motion of the ions is used as a data bus among qubits.

Квантовый компьютер

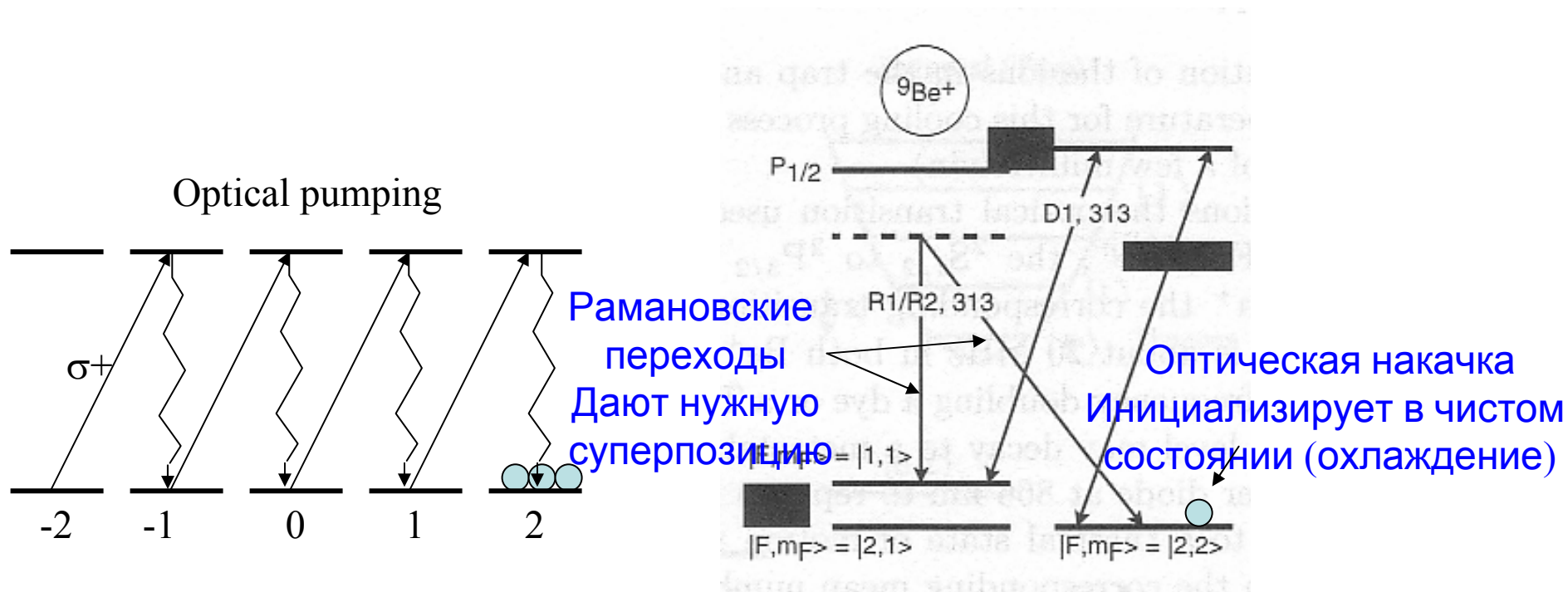
Ионная ловушка

- Одиночные ионы в вакууме помещены в магнитную ловушку
- Каждый ион имеет два типа переходов
 - С коротким временем жизни, для лазерного охлаждения, считывания информации
 - С большим временем жизни – qubit
 - Внутренние состояния иона характеризуются электронным и ядерным спином
- Связь между ионами
 - Фононы (колебательные движения вдоль оси)



Квантовый компьютер

Ионная ловушка. Начальное состояние



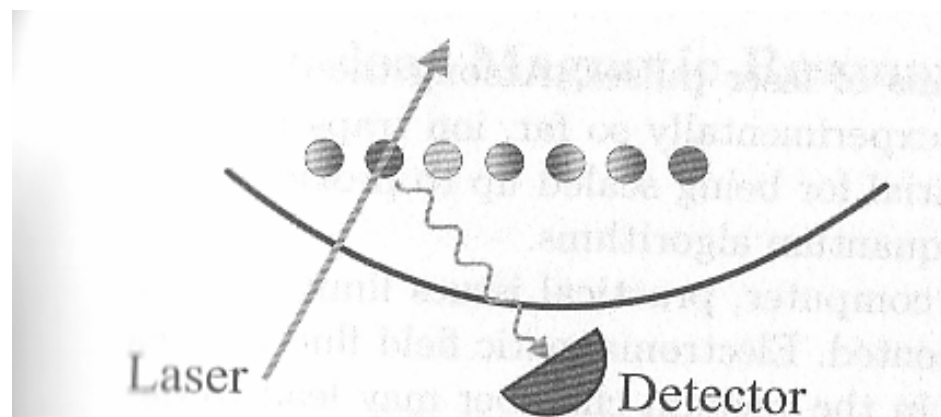
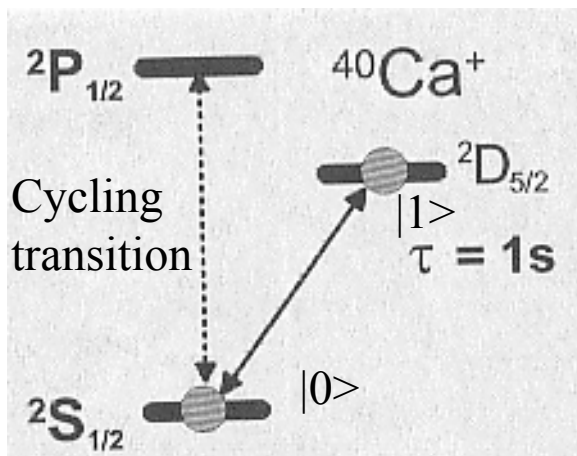
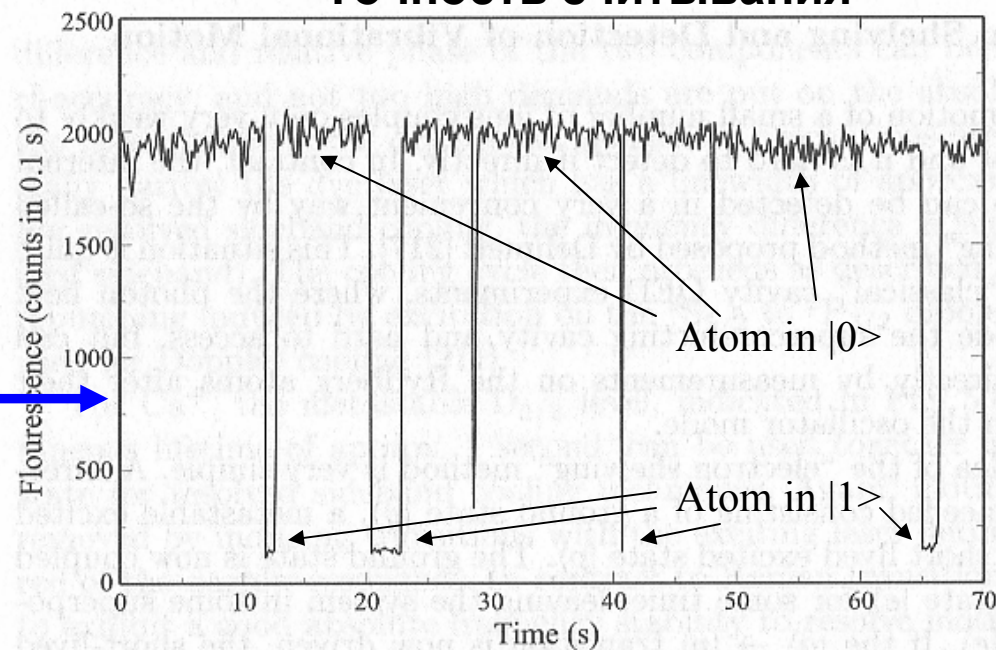
- Стандартная оптическая накачка отдельных ионов
- Осцилляции Раби
- Лазерное охлаждение

Квантовый компьютер

Ионная ловушка. Считывание данных

- Каждый ион может быть адресован отдельно
- Квантовые скачки

Точность считывания



Квантовый компьютер

Ионная ловушка. Итоги

1. **Представление кубита.** Ядерный спин и фононы атомов в ловушке
2. **Унитарная эволюция.** Произвольное преобразование реализуется последовательностью лазерных импульсов, гамильтониан Джейнса-Каммингса. Взаимодействие между кубитами – через фононное состояние
3. **Приготовление начального состояния.** Лазерное охлаждение, лазерными импульсами в любое состояние.
4. **Получение конечного результата.** Измерение населенности уровней сверхтонкой структуры (спина)
5. Времена релаксации $T \sim 10$ мин, много больше времени логической операции 1-мкс

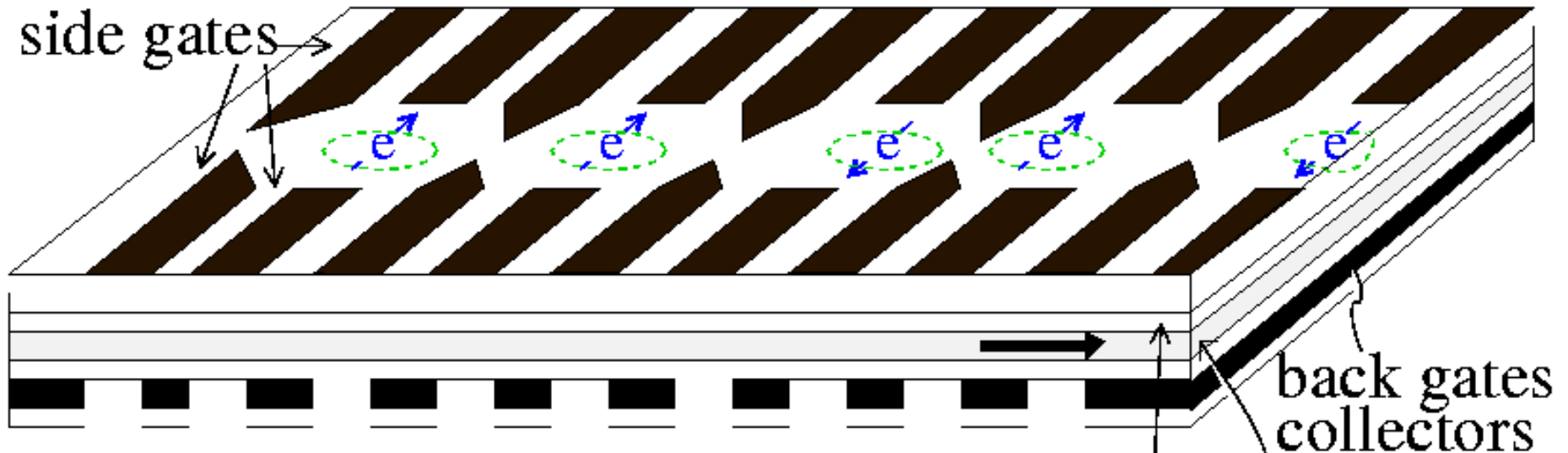
Недостатки: не больше 10 кубитов – сложная структура, не цепочка, **но есть предложения**
шум (лазера, движение ионов, флуктуации эм поля)
короткое время жизни фононов

Достоинства: реализованы основные протоколы ФКИ
хорошо разработан механизм, аппаратура доступна
квантовая память (большие времена релаксации)

Квантовый компьютер.




































Твердотельный на полупроводниках

Loss & DiVincenzo, Phys. Rev. A 57, 120 (1998).



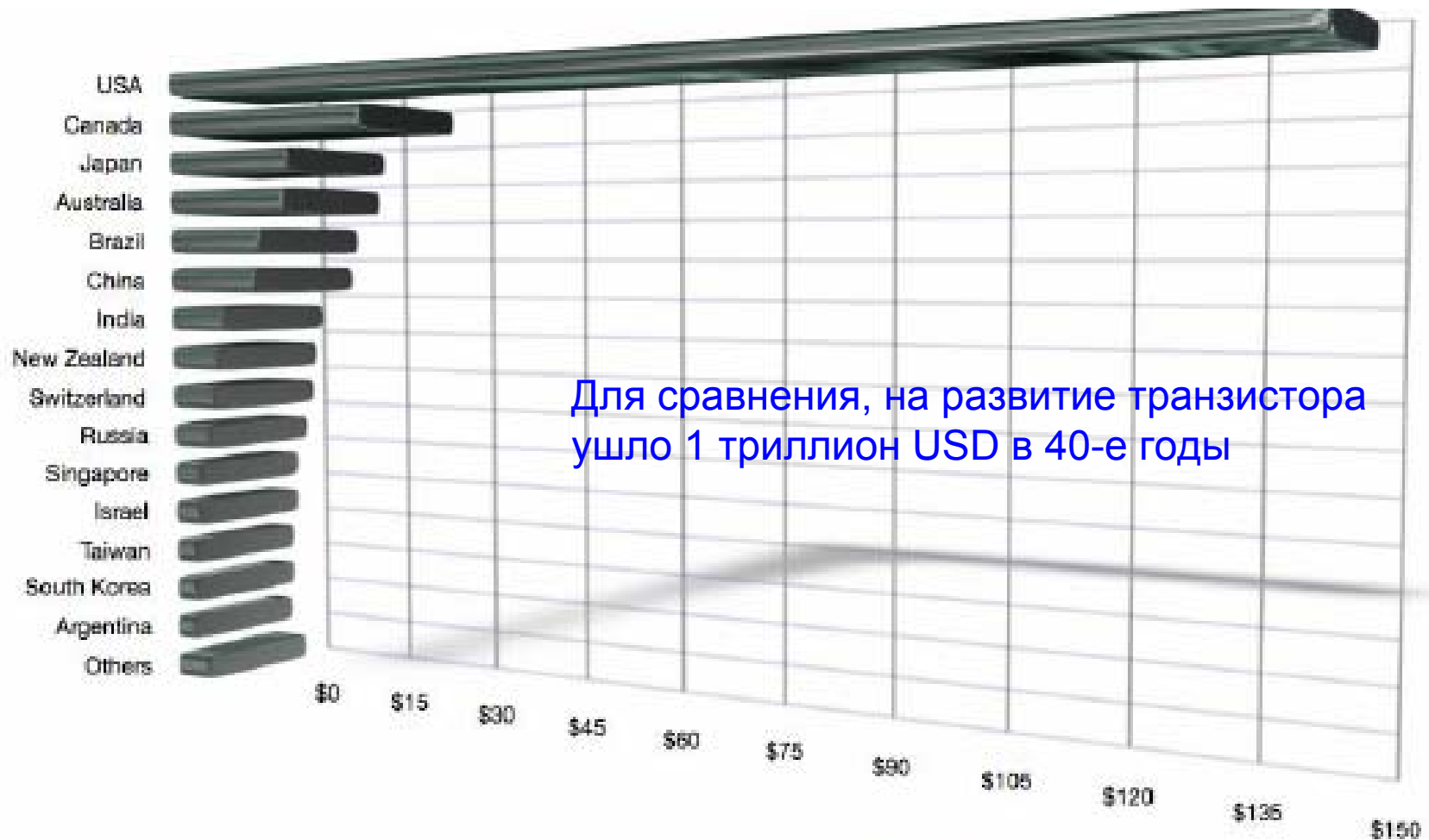
- quantum dots defined in 2DEG by side gates
- Coulomb blockade used to fix electron number at one per dot
- spin of electron is qubit
- gate operations: controllable coupling of dots by point-contact gate voltage
- readout by gatable magnetic barrier

Квантовый компьютер

QC Approach	Quantum Computation				
	#1	#2	#3	#4	#5
NMR					
Trapped Ion					
Neutral Atom					
Cavity QED					
Optical					
Solid State					
Superconducting					

1. What is the true power of a general purpose quantum computer, what problems does it allow us to compute efficiently, and what does it teach us about nature?
2. Are there fundamental limits to our ability to control and manipulate quantum systems, and what constraints do they place on technology and QIS?
3. Are there exotic new states of matter that emerge from collective quantum systems, what are they useful for, how robust are they to environmental interactions, and do these collective quantum phenomena limit the complexity of the quantum computing devices we can build?

Финансирование ФКИ на 2008 г.



Estimated funding of QIPC outside Europe in Million USD. Salaries represent 64% of the direct costs (costs without any overhead), whereas experimental equipment represents 36% of the direct costs. Overhead costs that are customary in the place have been added

Квантовый метод Монте-Карло (метод квантовых скачков)

1. Квантовая теория релаксации.
Общие методы исследования.
2. Метод волновой функции. Теория.
3. Результаты тестирования
4. Заключение

Метод оператора плотности

$$H |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t}$$

Уравнение Шредингера

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \equiv \int \psi^* \psi dV$$

$$H_0 |u_k\rangle = E_k |u_k\rangle$$

$$|u_k\rangle, E_k$$

$$\langle u_k | u_l \rangle = \delta_{kl}$$

Ортонормированный базис
 H_0 -невозмущенный гам.

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k e^{-i\omega_k t} |u_k\rangle$$

$$|c_k|^2$$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

Разложение по с. ф. невозм.
Гамильтониана.
Матричная запись.

$$H = H_0 + H_1$$

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k(t) e^{-i\omega_k t} |u_k\rangle$$

H_0 -возмущение
Разложение по с. ф. невозм.
Гамильтониана.
Уравнения на C_k

Метод оператора плотности

Нет полной информации о системе

$$|\psi_a(t_0)\rangle = \sum_k a_k |u_k\rangle$$

$$|\psi_b(t_0)\rangle = \sum_k b_k |u_k\rangle$$

$$N_a, N_b$$

Две группы осцилляторов,
ортонормированная система
базисных векторов, смешиваются,
не взаимодействуют.

$$\langle A \rangle = p_a \langle \psi_a(t) | A | \psi_a(t) \rangle + p_b \langle \psi_b(t) | A | \psi_b(t) \rangle$$

$$p_a = \frac{N_a}{N_a + N_b}$$

$$\langle A \rangle = \sum_k p_n \langle \psi_n(t) | A | \psi_n(t) \rangle$$

Все вероятности можно
определить путем измерений,
статистическая смесь, отличие

$$\langle A \rangle = \sum_{k,n} p_n \langle \psi_n(t) | A | u_k \rangle \langle u_k | \psi_n(t) \rangle = \sum_k |\langle u_k | \rho A | u_k \rangle| = \text{Sp}(\rho A)$$

$$\rho \equiv \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

$$\rho_{mj} \equiv \sum_n p_n c_{nm} c_{nj}^* e^{-i(\omega_m - \omega_j)t}$$

$$\rho_{jj} = \sum_n p_n |c_{nj}|^2$$

$$i\hbar \frac{\partial |\rho\rangle}{\partial t} = [H, \rho]$$

$$\rho_{jj} = |c_j|^2$$

$$\rho = \rho^\dagger \quad \text{Эрмитов}$$

$$\text{Sp}(\rho) = 1$$

Квантовая теория релаксации.

Общие методы исследования.

диссипация в системе

взаимодействие системы с резервуаром (гораздо большей системой) с большим числом степеней свободы

H_{sys} , H_B , H_{int} - Гамильтониан системы, резервуара, взаимодействия

Метод оператора плотности

$$\dot{\rho}_{tot}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_{tot}, \rho_{tot}(t)]$$

Оператор плотности «система+резервуар»

$$\hat{\rho} = Tr_B(\rho_{tot})$$

Оператор плотности системы

Метод Гейзенберга-Ланжевена

$$\dot{c}_i(t) = \frac{i}{\hbar} [H, c_i(t)] \quad \dot{b}_j(t) = \frac{i}{\hbar} [H, b_j(t)]$$

$i = 1, n$
 $j = 1, m$

c_i, b_j - полный набор операторов системы, резервуара

Марковское приближение

времена корреляции параметров резервуара
времена изменения параметров системы

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' Tr_B([H_{int}(t'), [H_{int}(t), \rho(t) \otimes \rho_B]])$$

общее решение уравнения 1 порядка по времени в представлении взаимодействия

$$U_I = e^{-\frac{i}{\hbar}(H_{sys} + H_B)t} \quad \rho = Tr_B(\rho_I) \quad \rho_I = U_I^+ \rho_{tot} U_I$$

Решение уравнений для элементов оператора плотности, nхn штук

$$\dot{c}_i(t) = f(c_1, \dots, c_n) + F_{c_i}(t)$$

$F_{c_i}(t)$ - операторы шума Ланжевена

$$\langle F_{c_i}(t) F_{c_j}(t') \rangle = D_{ij}(t, t') \quad D_{ij}(t, t') = D_{ij} \delta(t - t')$$

- белый шум

Соответствует флуктуационно-диссипационной теореме
Решение стохастических дифференциальных уравнений

Метод волновой функции. Теория.

$$H_{tot} = H_{sys} + H_B + H_{int}$$

$$H_B = \int_0^{\infty} d\omega \hbar \omega b^+(\omega) b(\omega) \quad [b(\omega), b^+(\omega')] = \delta(\omega - \omega')$$

$$H_{int} = i\hbar \int_0^{\infty} d\omega k(\omega) [c - c^+][b^+(\omega) + b(\omega)]$$

Представление взаимодействия

$$U_I = e^{-\frac{i}{\hbar}(H_{sys} + H_B)t}$$

$$|\Psi_I(t)\rangle = U_I^+(t) |\Psi_S(t)\rangle$$

$$H_{int}^g(t) = i\hbar \sqrt{\lambda} [b^g(t)^+ c - b^g(t) c^+] \quad b^g(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\omega_0 - g}^{\omega_0 + g} d\omega b(\omega) e^{-i(\omega - \omega_0)t}$$

$$\int_{\omega_0 - g}^{\omega_0 + g} d\omega \quad \omega_0 \gg g \gg \nu_j$$

Резонансное приближение

Марковское приближение

$$k(\omega) \rightarrow \sqrt{\gamma / 2\pi}$$

$$b^g(t) \rightarrow b(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega b(\omega) e^{-i(\omega - \omega_0)t} \quad [b(t), b^+(t')] = \delta(t - t')$$

$$|\Psi_I(t)\rangle = U(t) |\Psi_I(0)\rangle$$

$$\frac{d}{dt} U(t) = -\frac{i}{\hbar} H_{int}(t) U(t)$$

Оператор эволюции

$$\frac{d}{dt} U(t) = \left(-\frac{i}{\hbar} H + \sqrt{\lambda} b(t)^+ c - \sqrt{\lambda} c^+ b(t) \right) U(t)$$

при наличии дополнительных полей
в системе

МЕТОД ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ. ТЕОРИЯ. Квантовые стохастические уравнения

Форма Стратоновича

$$(S) dU(t) = \left(-\frac{i}{\hbar} H dt + \sqrt{\lambda} dB + c - \sqrt{\lambda} dBc \right) U(t)$$

$$B(t) = \int_0^t ds b(s) \quad B^+(t) = \int_0^t ds b^+(s) \quad dB(t) = B(t + \Delta t) - B(t)$$

Форма Ито

$$(I) dU(t) = \left(\left[-\frac{i}{\hbar} H - \frac{1}{2} \gamma c^+ c \right] dt + \sqrt{\lambda} dB + c - \sqrt{\lambda} dBc \right) U(t)$$

$$[U(t), dB] = [U(t), dB^+] = 0 \quad \langle b(t)b^+(t') \rangle = \delta(t-t'),$$

$$\langle b(t)b(t') \rangle = \langle b(t)^+ b(t') \rangle = \langle b(t)^+ b^+(t') \rangle = 0$$

Различие

$$(S) \int_0^t f(s) dB(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n \frac{f(t_i) + f(t_{i+1})}{2} [B(t_{i+1}) - B(t_i)]$$

$$(I) \int_0^t f(s) dB(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n f(t_i) [B(t_{i+1}) - B(t_i)]$$

$$d|\Psi(t)\rangle = \left(\left[-\frac{i}{\hbar} H - \frac{1}{2} \gamma c^+ c \right] dt + \sqrt{\lambda} dB + c - \sqrt{\lambda} dBc \right) |\Psi(t)\rangle$$

$$|\Psi(0)\rangle = |\varphi\rangle \otimes |vac\rangle$$

$$d|\Psi(t)\rangle = \left(-\frac{i}{\hbar} H_{eff} dt + \sqrt{\lambda} dB + c \right) |\Psi(t)\rangle$$

QSDE

$$H_{eff} = H - \frac{i}{2\hbar} \gamma c^+ c \quad \text{неэрмитовый}$$

$$b|vac\rangle = 0$$

Метод волновой функции. Теория.

Уравнение для оператора плотности

$$\hat{\rho} = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$$

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}(H_{eff}\rho - \rho H_{eff}^+) + J\rho$$

$$J\rho = \gamma c\rho c^+$$

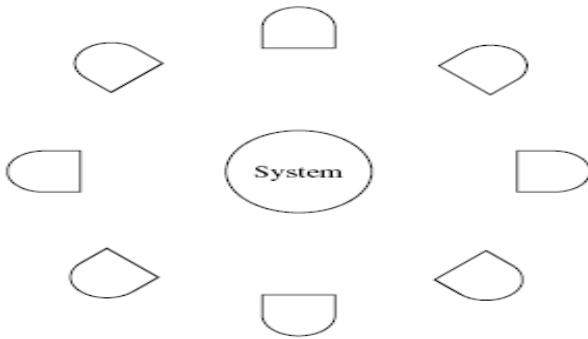
Обобщение на резервуаров.

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \sum_{j=1}^{N^c} \frac{1}{2} \gamma_j (2c_j\rho c_j^+ - \rho c_j^+ c_j - c_j^+ c_j \rho) \\ &= -\frac{i}{\hbar}(H_{eff}\rho - \rho H_{eff}^+) + \sum_{j=1}^{N^c} J_j \rho = L\rho \end{aligned}$$

Форма Линдблада.

$$H_{eff} = H - \frac{i}{2} \hbar \sum_{j=1}^{N^c} \gamma_j c_j^+ c_j$$

$$J_j \rho = \gamma_j c_j \rho c_j^+$$



Динамика системы – в условиях эксперимента (мысленного) по регистрации испущенных системой фотонов

$\Lambda(t) \equiv \int_0^t ds b^+(s)b(s)$ Полное число испущенных фотонов[0,t]

$d\Lambda(t)$ Полное число испущенных фотонов[t,t+dt]

$$d\Lambda(t)d\Lambda(t) = d\Lambda(t) \quad \lambda_i = 0, 1$$

$$dB(t)d\Lambda(t) = dB(t); \quad d\Lambda(t)dB^+(t) = dB^+(t)$$

Измерение в момент времени

t_i 2 варианта

$$P(1, t) \equiv d\Lambda(t), \quad P(0, t) \equiv 1 - d\Lambda(t)$$

Операторы проектирования в состояния с определенным числом фотонов

Метод волновой функции. Теория.

$$|\Psi(t_i + dt_i)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_{eff} dt_i + \sqrt{\gamma} dB^+(t_i)c\right) |\Psi(t_i)\rangle \quad \text{entangled state}$$

Динамика системы без регистрации фотонов

$$\begin{aligned} |\Psi(t_f)\rangle &= \prod_{i=0}^f \left((1 - d\Lambda(t_i)) \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_{eff} dt_i + \sqrt{\gamma} dB^+(t_i)c\right) \right) |\Psi(t_0)\rangle = \\ &= \prod_{i=0}^f \left((1 - d\Lambda(t_i)) \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_{eff} dt_i\right) \right) |\Psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

$$|\Psi(t_f)\rangle = U_{eff}(t_f, t_0) P(t_0, t_f) |\Psi(t_0)\rangle \quad P(t_0, t_f) = \prod_{i=0}^f (1 - d\Lambda(t_i))$$

$$|\tilde{\psi}(t_f)\rangle = U_{eff}(t_f, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad U_{eff}(t_f, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_{eff}(t_f - t_0)\right)$$

$$\delta P = \langle \tilde{\psi}(t_f) | \psi(t_f) \rangle = \langle \psi(t_0) | U_{eff}^+(t_f, t_0) U_{eff}(t_f, t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

Сразу после регистрации фотона

$$\begin{aligned} |\Psi(t_1 + dt_1)\rangle &= \left(d\Lambda(t_1) \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_{eff} dt_1 + \sqrt{\gamma} dB^+(t_1)c\right) \right) |\Psi(t_1)\rangle \\ &= \sqrt{\gamma} dB^+(t_1)c |\Psi(t_1)\rangle. \end{aligned}$$

КВАНТОВЫЙ СКАЧОК

$$|\tilde{\psi}(t_1 + dt_1)\rangle = \sqrt{\gamma} c |\psi(t_1)\rangle$$

вероятность скачка

$$\Delta P = \gamma dt_1 \langle \varphi(t_1) | c^+ c | \varphi(t_1) \rangle$$

ФОТООТСЧЕТЫ В МОМЕНТЫ

t_1, t_2

$$\begin{aligned} |\Psi(t_f)\rangle &= U_{eff}(t_f, t_2) P(t_f, t_2 + dt_2) \\ &\times \sqrt{\lambda} dB^+(t_2)c U_{eff}(t_2, t_1) P(t_2, t_1 + dt_1) \\ &\times \sqrt{\lambda} dB^+(t_1)c U_{eff}(t_1, t_0) P(t_1, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

КВАНТОВАЯ
траектория
условная
динамика

Метод волновой функции. Теория.

Для матрицы плотности

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\tilde{\rho}_c(t) = -\frac{i}{\hbar}(H_{eff} \tilde{\rho} - \tilde{\rho} H_{eff}^+)$$

$$\tilde{\rho}_c(t_1 + dt_1) = J(t_1) \rho_c(t_1)$$

$$\rho(t) = e^{L t} \rho(0) = e^{(L-J)t + J t} \rho(0) =$$

$$= S(t, 0) \rho + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 S(t, t_n) J(t_n) S(t_n, t_{n-1}) \dots S(t_2, t_1) J(t_1) S(t_1, 0) \rho$$

$$S(t, t_0) \rho = U_{eff}(t, t_0) \rho U_{eff}^+(t, t_0)$$

Усреднение по всевозможным траекториям дает исходное уравнение

Алгоритм численного моделирования

Имеется волновая функция системы в момент времени t

1. расчет вероятности излучения фотона

$$\Delta P_m(t) = \gamma_m \Delta t \langle \psi(t) | c_m^+ c_m | \psi(t) \rangle,$$

$$\Delta P(t) = \sum_m \Delta P_m \ll 1$$

2. генерация случайного числа r , равномерно распределенного на отрезке $[0, 1]$

$r \geq \Delta P$ нет излучения

$r < \Delta P$ излучился фотон

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \frac{\exp(-iH_{eff} \Delta t / \hbar) |\psi(t + \Delta t)\rangle}{\sqrt{1 - \Delta P}}$$

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \frac{c_m |\psi(t + \Delta t)\rangle}{\sqrt{\Delta P_m / \Delta t}}$$

$$P_m = \Delta P_m / \Delta P$$

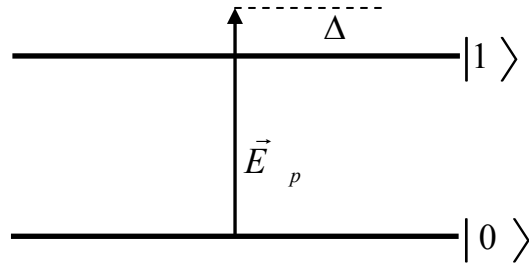
усреднение по реализациям

Преимущества метода

1. Возможность моделировать единичные реализации процессов в квантовых системах (другие методы дают усредненное описание). Возможность прямого численного моделирования экспериментов квантовой оптики.
 2. Размерность системы дифференциальных уравнений n вместо $n \times n$ в методе оператора плотности
 3. Простота распараллеливания алгоритма на систему из нескольких компьютеров (кластер)
 4. Возможность расчета не только волновой функции, но и средних значений, корреляционных функций операторов системы, спектральных и других характеристик системы.
-
1. Справедлив для расчета систем в **Марковском приближении** (возможно расширение метода на немарковские системы)
(W. T. Strunz et.al, Phys.rev.lett, 82, 1999)
 2. **Точность.**
Достигается увеличением числа реализаций и применением более точных схем решения дифференциальных уравнений
(M. B. Plenio, P.L. Knight, Rev. Mod., Phys. V70, N1, 1998)

Результаты тестирования

1. Двухуровневый атом под действием резонансного поля, в вакууме (вакуумном резервуаре)



$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H_{sys}, \rho] + \Gamma (2\sigma_{01}\rho\sigma_{10} - \sigma_{11}\rho - \rho\sigma_{11})$$

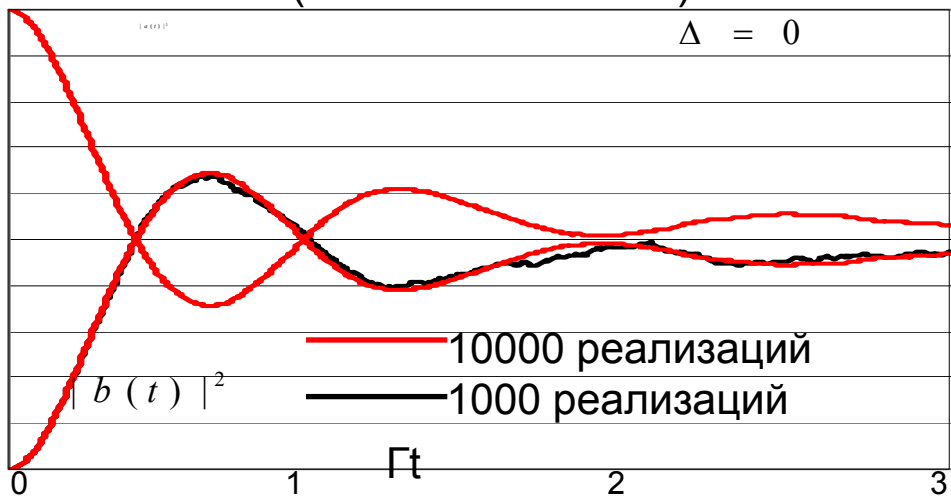
$$H_{sys} = -\hbar\Delta\sigma_{11} + \frac{\hbar\Omega}{2}(\sigma_{01} + \sigma_{10}) \quad \Omega = \frac{2\mu_{01}E}{\hbar}$$

$$\sigma_{ij} = |i\rangle\langle j|, \quad i, j = 0, 1 \quad \Delta = \omega_p - \omega_{10}$$

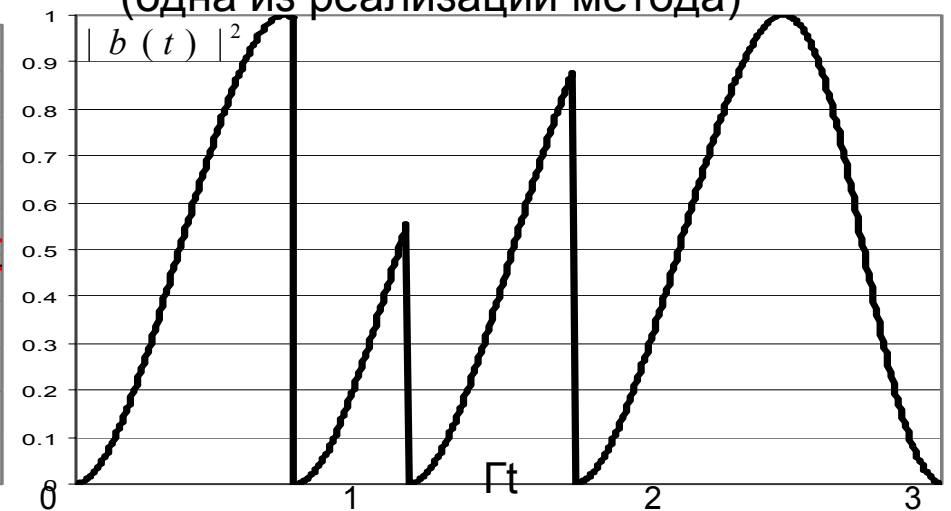
$$H_{eff} = -\hbar\Delta\sigma_{11} + \frac{\hbar\Omega}{2}(\sigma_{01} + \sigma_{10}) - i\hbar\Gamma\sigma_{11} \quad c_1 = \sqrt{\Gamma}\sigma_{01}$$

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H_{eff}(t)|\psi(t)\rangle \quad \left| \begin{array}{l} \dot{a}(t) = -\frac{i\Omega}{2}b(t) \\ \dot{b}(t) = -(\Gamma - i\Delta)b(t) - \frac{i\Omega}{2}a(t) \end{array} \right. \quad \left| \begin{array}{l} c_1|\psi(t)\rangle = \sqrt{\Gamma}b(t)|0\rangle \\ |\psi(t)\rangle = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle \end{array} \right.$$

Усредненная динамика системы (ансамбля атомов)



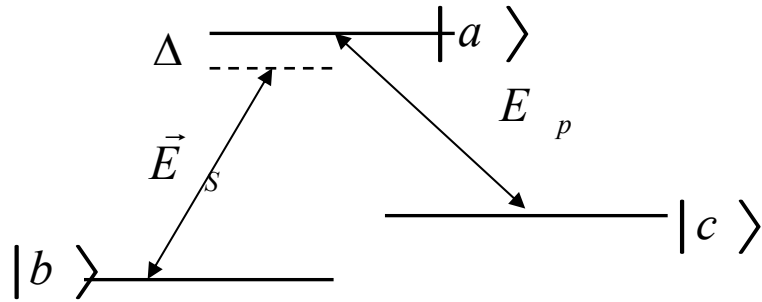
Динамика одного атома (одна из реализаций метода)



При $N=10000$ реализаций результат не отличается от точного (методом оператора плотности)

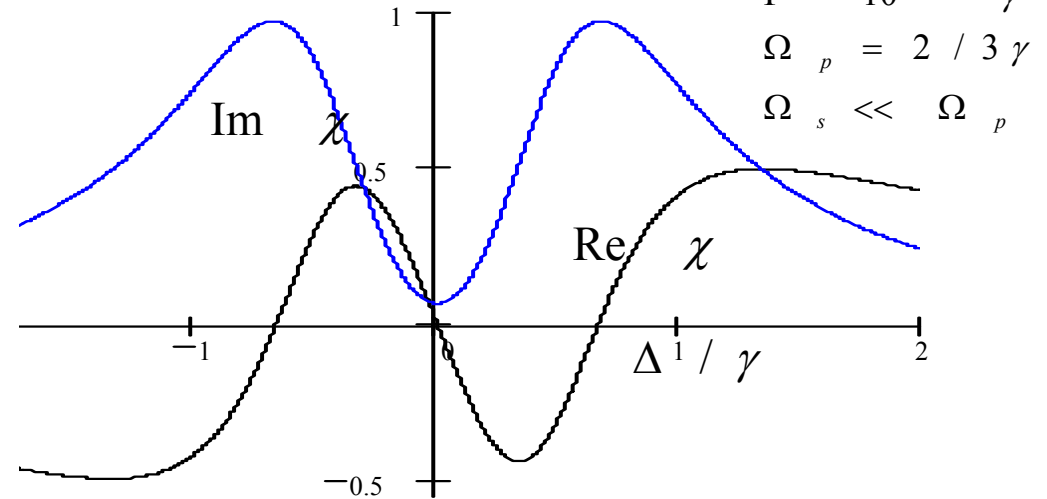
Результаты тестирования

2. Трехуровневый атом с лямбда-конфигурацией электронных уровней под действием полей, в вакууме



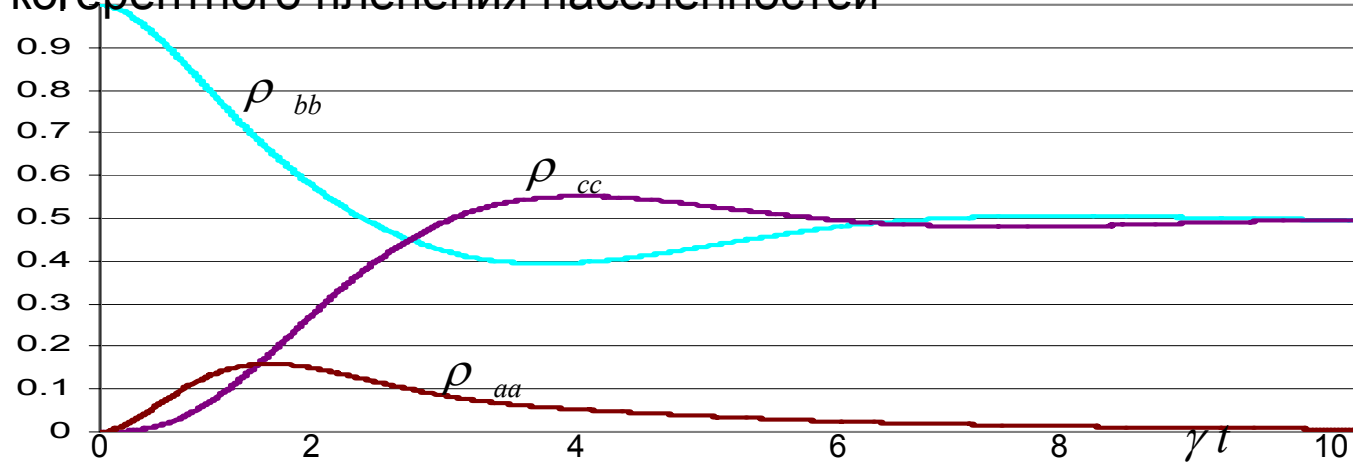
Воздействие на среду сильного и слабого полей. На рис. - восприимчивость среды на воздействие слабого поля

Эффект электромагнитно-индуцированной прозрачности



Эффект

когерентного пленения населенностей



$$\Gamma = 0$$

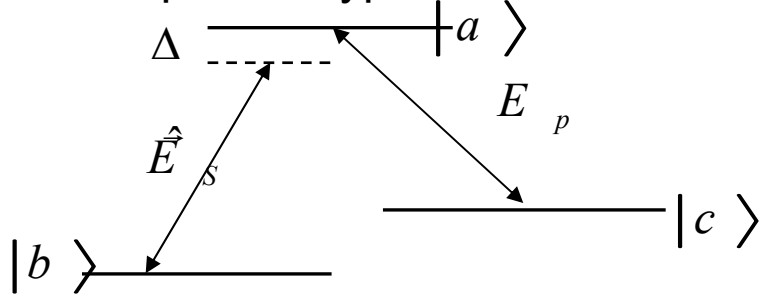
$$\Omega_p = 2 / 3 \gamma$$

$$\Omega_s = \Omega_p = 0.7 \gamma$$

N=5000, Результат неотличим от точного решения

Результаты тестирования

3. Трехуровневый атом с лямбда-конфигурацией электронных уровней под действием квантованных полей



$$\hat{E}_s = \hat{E}_s^+ + \hat{E}_s^- = \bar{e} \varepsilon(\omega_s) \hat{a}(z, t) e^{-i\omega_s t + ik_s z} + h.c.$$

$|\psi_f\rangle$ - волновая функция

\hat{a} - оператор уничтожения
 $\langle \hat{a} \rangle = \langle \psi_f | \hat{a} | \psi_f \rangle$

Рассмотрим поле в сжатом вакуумном состоянии

$$|\psi_f\rangle = |\beta, \zeta\rangle = \exp(\beta a^\dagger - \beta^* a) \exp\left[\frac{1}{2}(\zeta^* a^2 - \zeta a^{\dagger 2})\right] |0\rangle$$

$|\zeta|$ - параметр сжатия

$$|\psi_f\rangle = \sum_n a_n |n\rangle \quad |n\rangle - n\text{-фотонное (фоковское) состояние поля}$$

При сильном сжатии

$$\exp(2|\zeta|) \geq |\beta|^{2/3} \quad \text{можно ограничиться}$$

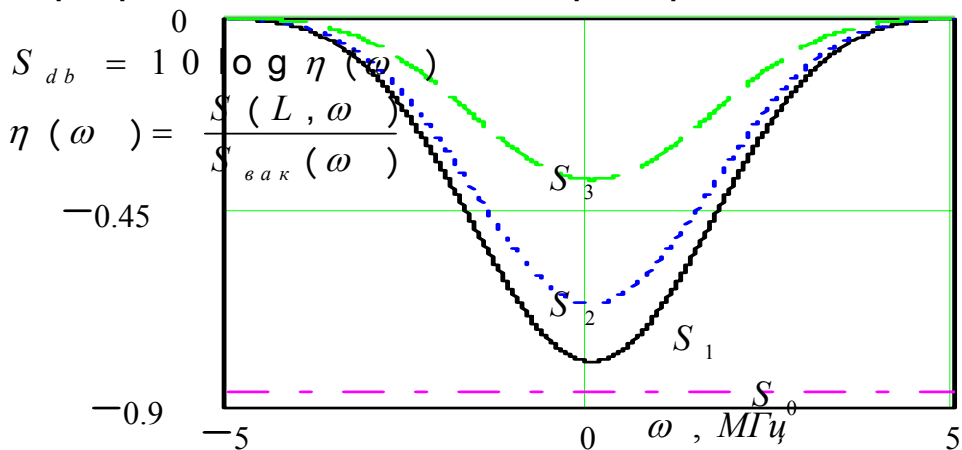
$n \sim 100$ членами разложения

$$|\psi_{sys}\rangle = \sum_{i,n} a_{in} |i, n\rangle, \quad |i\rangle = |a\rangle, |b\rangle, |c\rangle$$

Итого размерность системы

«поле + атом» $\text{Dim} = 300$

При расчете методом оператора плотности – $300 \times 300 = 90000$ Ду



Изменение уровня сжатия поля при прохождении через среду атомов в режиме электромагнитно-индуцированной прозрачности для различных коэффициентов прохождения поля, в Дб

$N = 10000$ траекторий

Совпадение с теорией

Возможность расчета более сложных задач

$$\gamma_{ab} = 6 M \Gamma \mu$$

$$\Omega \approx 2 \gamma_{ab}$$

Заключение

- Написана программа, реализующая метод Монте-Карло (квантовых траекторий) расчета динамики малой системы, связанной с большим резервуаром, с помощью волновой функции малой системы. Подход имеет существенные преимущества с точки зрения практической реализации при численных расчетах сложных систем и может быть применен к описанию широкого класса задач, допускающих Марковское приближение.
- Приведены результаты тестирования программы при исследовании динамики двухуровневых и трехуровневых атомных систем под действием оптических полей, получен известный эффект электромагнитно-индуцированной прозрачности в трехуровневой атомной системе.
- Метод применен к исследованию особенностей взаимодействия квантованного света со средой атомов, изучению квантово-статистических свойств квантованного света при прохождении через атомную среду. Получены соответствия с существующими теоретическими данными, в том числе и нашими. Продолжаются исследования более сложных систем.

**Численное моделирование квантовой
релаксации в атомных системах
методом Монте-Карло**

Метод оператора плотности

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \equiv \int \psi^* \psi dV$$

Уравнение Шредингера

$$H_0 |u_k\rangle = E_k |u_k\rangle$$

$$|u_k\rangle, E_k$$

$$\langle u_k | u_l \rangle = \delta_{kl}$$

Ортонормированный базис
 H_0 -невозмущенный гам.

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k e^{-i\omega_k t} |u_k\rangle$$

$$H = H_0 + H_1$$

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k(t) e^{-i\omega_k t} |u_k\rangle$$

$$|c_k|^2, |\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ \cdot \\ c_n \end{pmatrix}$$

H_0 -возмущение
Разложение по с. ф. невозм.
Гамильтониана.
Уравнения на C_k

Разложение по с. ф. невозм.
Гамильтониана.
Матричная запись.

Метод оператора плотности

Нет полной информации о системе

$$|\psi_a(t_0)\rangle = \sum_k a_k |u_k\rangle$$

$$|\psi_b(t_0)\rangle = \sum_k b_k |u_k\rangle$$

Две группы осцилляторов,
ортономмированная система
базисных векторов, смешиваются,
не взаимодействуют.

$$N_a, N_b, \langle A \rangle = p_a \langle \psi_a(t) | A | \psi_a(t) \rangle + p_b \langle \psi_b(t) | A | \psi_b(t) \rangle$$

$$p_a = \frac{N_a}{N_a + N_b}, \langle A \rangle = \sum_k p_n \langle \psi_n(t) | A | \psi_n(t) \rangle$$

Все вероятности можно
определить путем измерений,
статистическая смесь, отличие

$$\langle A \rangle = \sum_{k,n} p_n \langle \psi_n(t) | A | u_k \rangle \langle u_k | \psi_n(t) \rangle = \sum_k |\langle u_k | \rho A | u_k \rangle| = Sp(\rho A)$$

$$\rho \equiv \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

$$\rho_{mj} \equiv \sum_n p_n c_{nm} c_{nj}^* e^{-i(\omega_m - \omega_j)t}$$

$$i\hbar \frac{\partial |\rho\rangle}{\partial t} = [H, \rho]$$

$$\rho_{jj} = \sum_n p_n |c_{nj}|^2, \rho_{jj} = |c_j|^2$$

$$\rho = \rho^+$$

Эрмитов

$$Sp(\rho) = 1$$

Квантовая теория релаксации. Общие методы исследования.

марковское приближение

времена корреляции
параметров резервуара \ll времен изменения
параметров системы
общее решение - уравнения I порядка по времени

Метод оператора плотности

Решение уравнений для элементов оператора плотности, NxN штук

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' Tr_B ([H_{int}(t), [H_{int}(t'), \rho(t) \otimes \rho_B]]) \quad \text{в представлении взаимодействия}$$

$$U_I(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(H_{sys} + H_B)t} \quad \rho_I = U_I^+(t) \rho_{tot}(t) U_I(t) \quad \rho(t) = Tr_B(\rho_I(t))$$

Метод Гейзенберга-Ланжевена

Решение стохастических дифференциальных уравнений для операторов

$$\dot{c}_i(t) = f(c_1, \dots, c_n) + F_{c_i}(t) \quad F_{c_i}(t) \text{ - операторы шума Ланжевена}$$

$$\langle F_{c_i}(t) F_{c_j}(t') \rangle = D_{ij}(t, t') \quad D_{ij}(t, t') = D_{ij} \delta(t - t') \quad \text{- белый шум}$$

Соответствует флуктуационно-диссипационной теореме

Квантовая теория релаксации. Метод Монте-Карло

Общий вид уравнения для оператора плотности в Марковском приближении - форма Линдблада

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H_{sys}, \rho] + \sum_{j=1}^{N_c} \frac{1}{2} \gamma_j (2c_j \rho c_j^+ - \rho c_j^+ c_j - c_j^+ c_j \rho) = -\frac{i}{\hbar}(H_{eff} \rho - \rho H_{eff}^+) + \sum_{j=1}^{N_c} J_j \rho$$

$$H_{eff} = H_{sys} - \frac{i}{2} \hbar \sum_{j=1}^{N_c} \gamma_j c_j^+ c_j$$

неэрмитов эффективный
Гамильтониан

N_c число резервуаров
оператор системы,
взаимодействующий
с j резервуаром

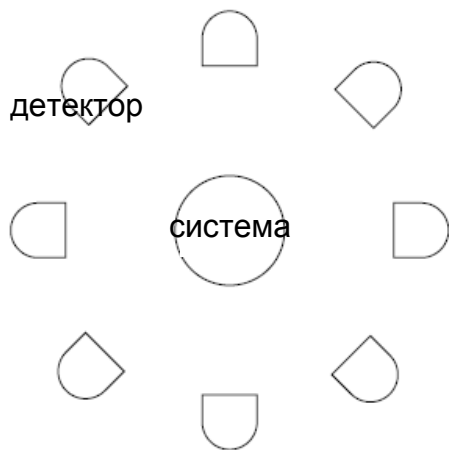
$$J_j \rho = \gamma_j c_j \rho c_j^+$$

оператор квантового скачка

Возможна следующая интерпретация

M. B. Plenio, P.L. Knight, Rev. Mod. Phys., 70(1), 101-143 (1998).

Динамика системы – в условиях эксперимента (мысленного) по регистрации спонтанно испущенных системой фотонов



отсутствие
фотоотсчета

зарегистрирован
фотоотсчет

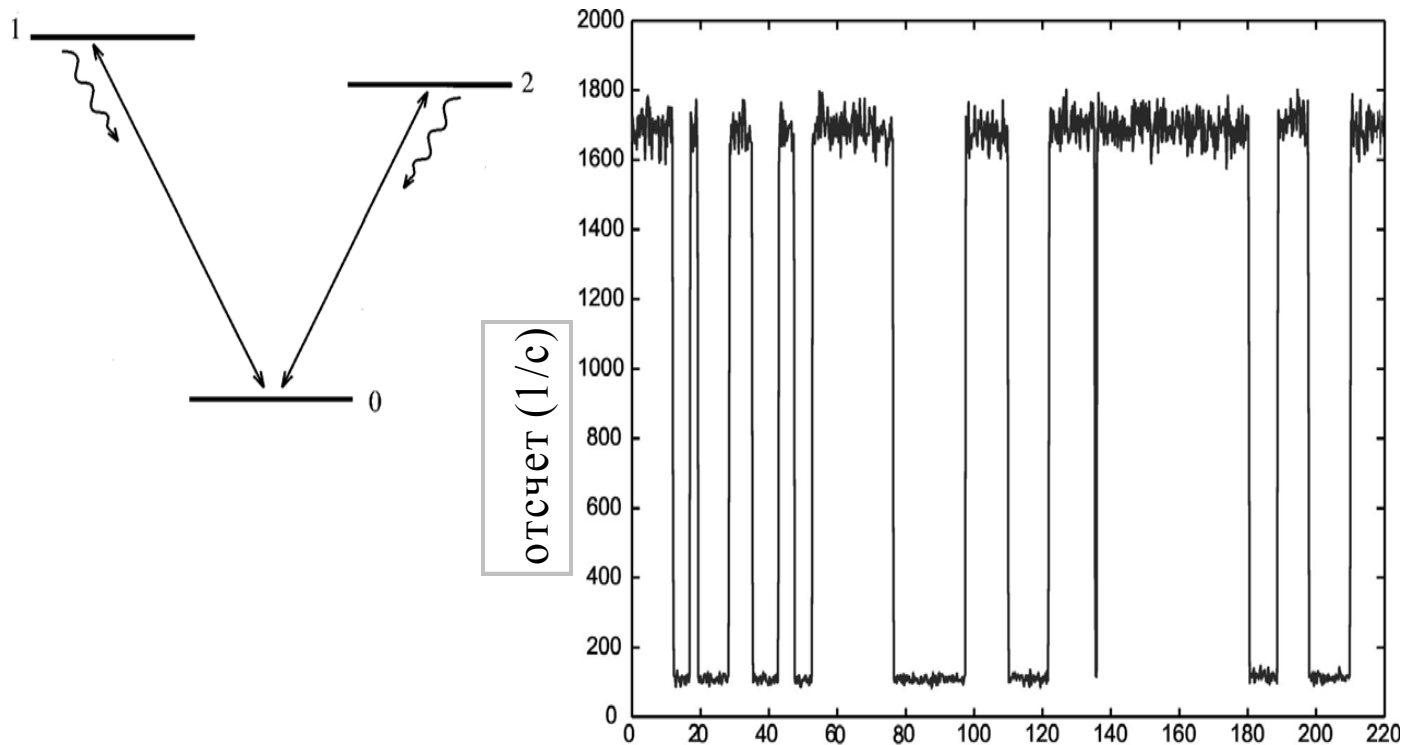
динамика под действием H_{eff}

квантовый скачок

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}(H_{eff} \rho - \rho H_{eff}^+)$$

$$\rho \rightarrow J_j \rho$$

Квантовая теория релаксации. Метод Монте-Карло



Резонансная флуоресценция одиночного иона $^{138}\text{Ba}^{+}$,. Оптические поля действуют на оба перехода. Если ион переходит в состояние 2 (метастабильное), флуоресценция исчезает.

Через промежуток времени, обычно равный времени жизни уровня 2 (32 сек. в данном эксперименте) атом возвращается в состояние 0, и флуоресценция на переходе 0-1 восстанавливается.

Квантовая теория релаксации. Метод Монте-Карло

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad \text{Рассмотрим } p_i = p_1 = 1$$

$$\dot{\rho} = \underbrace{-\frac{i}{\hbar} (H_{eff} |\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi| H_{eff}^+)}_{|\dot{\psi}\rangle} + \underbrace{\sum_{j=1}^{N_c} \gamma_j c_j |\psi\rangle\langle\psi| c_j^+}_{|\psi\rangle \rightarrow |\phi_j\rangle = c_j |\psi\rangle}$$

$$|\dot{\psi}\rangle = -\frac{i}{\hbar} H_{eff} |\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle \rightarrow |\phi_j\rangle = c_j |\psi\rangle$$

Стохастическая эволюция. Δt -дискретное время

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = (1 - \frac{i}{\hbar} H_{eff} \Delta t) |\psi(t)\rangle \quad \text{В первом порядке по } \Delta t$$

$$\langle\psi(t + \Delta t)|\psi(t + \Delta t)\rangle = 1 - \Delta P(t)$$

$$\Delta P_j(t) = \Delta t \gamma_j \langle\psi(t)|c_j^+ c_j|\psi(t)\rangle \quad \Delta P(t) = \sum_{j=1}^{N_c} \Delta P_j(t)$$

$$|\tilde{\psi}(t + \Delta t)\rangle = \frac{(1 - \frac{i}{\hbar} H_{eff} \Delta t)}{\sqrt{1 - \Delta P(t)}} |\psi(t)\rangle$$

аналогично

$$|\tilde{\phi}_j\rangle = \sqrt{\frac{\Delta t \gamma_j}{\Delta P_j}} |\phi_j\rangle$$

$$\rho(t + \Delta t) = (1 - \Delta P(t)) |\tilde{\psi}(t + \Delta t)\rangle\langle\tilde{\psi}(t + \Delta t)| + \sum_{j=1}^{N_c} \Delta P_j(t) |\tilde{\phi}_j\rangle\langle\tilde{\phi}_j|$$

В среднем динамика унитарна

Квантовая теория релаксации. Метод Монте-Карло

Алгоритм численного моделирования

Имеется волновая функция системы $\psi(t)$ в момент времени t

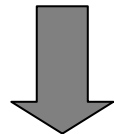
1. расчет вероятности
излучения фотона

$$\Delta P_j(t) = \gamma_j \Delta t \langle \psi(t) | c_j^\dagger c_j | \psi(t) \rangle,$$

$$\Delta P(t) = \sum_j \Delta P_j(t) \ll 1$$

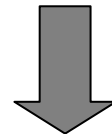
2. генерация **случайного** числа r , равномерно распределенного на отрезке $[0, 1]$

$r \geq \Delta P$ нет излучения



$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \frac{(1 - i/\hbar H_{eff} \Delta t) |\psi(t)\rangle}{\sqrt{1 - \Delta P(t)}}$$

$r < \Delta P$ излучился фотон



$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \frac{c_j |\psi(t)\rangle}{\sqrt{\Delta P_j(t) / (\Delta t \gamma_j)}} \quad \Pi_j = \Delta P_j / \Delta P$$

3. повтор шагов 1,2 для расчета эволюции за требуемое время – квантовая траектория
4. повтор шагов 1-3 n раз для получения статистического ансамбля квантовых траекторий

Квантовая теория релаксации. Метод Монте-Карло

Расчет среднего

$$a(t) = \langle A \rangle(t) = \text{Tr}[\rho(t)A]$$

A, B - операторы системы



$$\langle A \rangle_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \langle \psi^i(t) | A | \psi^i(t) \rangle$$

Расчет двухвременных корреляционных функций

$$C(t, \tau) = \langle A(t + \tau)B(t) \rangle$$

Квантовая теорема регрессии



K. Molmer, Y. Castin, J. Dalibard,
J. Opt. Soc. Am. B, 10, 524 (1993)

моделирование единичных реализаций процессов в квантовых системах

размерность системы дифференциальных уравнений N

Простота и эффективность распараллеливания алгоритма

Расчет систем в **Марковском приближении**
W. T. Strunz et.al, Phys. Rev. Lett, 82, 1999

Точность

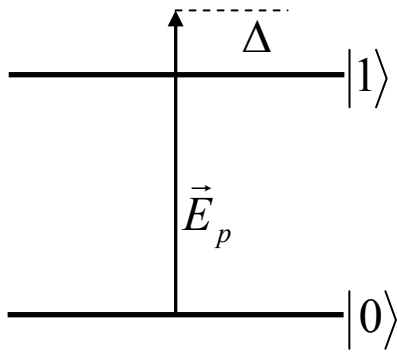
$$(\delta A)_{(n)}^2(t) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n \left(\langle \psi^i(t) | A | \psi^i(t) \rangle - \langle A \rangle_n(t) \right)^2$$

$$\delta A_{(n)} \sim \frac{1}{\sqrt{n}}$$

Статистически
независимые
реализации

Результаты тестирования

1. Двухуровневый атом под действием резонансного поля, в вакууме



$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H_{sys}, \rho] + \frac{\Gamma}{2}(2\sigma_{01}\rho\sigma_{10} - \sigma_{11}\rho - \rho\sigma_{11})$$

$$\Delta = \omega_p - \omega_{10}$$

$$H_{sys} = -\hbar\Delta\sigma_{11} + \hbar\Omega(\sigma_{01} + \sigma_{10})$$

$$\Omega = \frac{\mu_{01}E_p}{\hbar}$$

$$\sigma_{ij} = |i\rangle\langle j|, \quad i, j = 0, 1$$

$$H_{eff} = \hbar(-\Delta - i\frac{\Gamma}{2})\Delta\sigma_{11} + \hbar\Omega(\sigma_{01} + \sigma_{10})$$

$$c_1 = \sigma_{01}$$

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H_{eff}(t)|\psi(t)\rangle$$

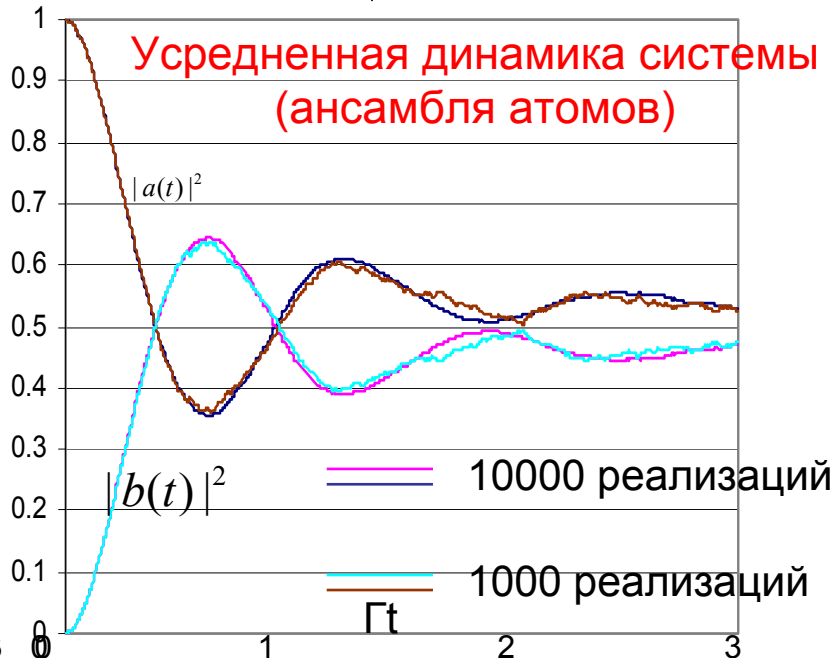
$$|\psi(t)\rangle = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle$$

$$\dot{a}(t) = -i\Omega b(t)$$

$$\dot{b}(t) = -(\Gamma - i\Delta)b(t) - i\Omega a(t)$$

$$c_1|\psi(t)\rangle = b(t)|0\rangle$$

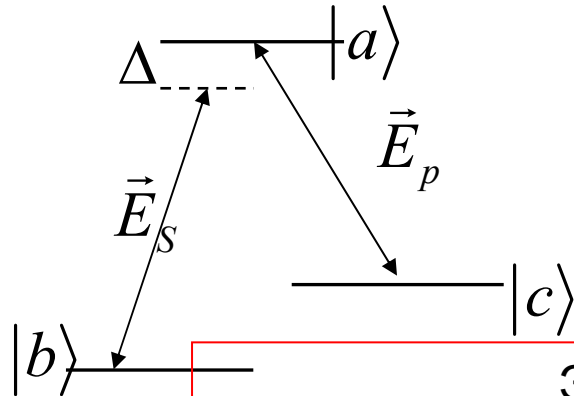
$$\Delta P_1(t) = \Gamma\Delta t |b(t)|^2$$



$$\Delta = 0$$

Результаты тестирования

2. Трехуровневый атом с лямбда-конфигурацией электронных уровней под действием резонансных полей, в вакууме



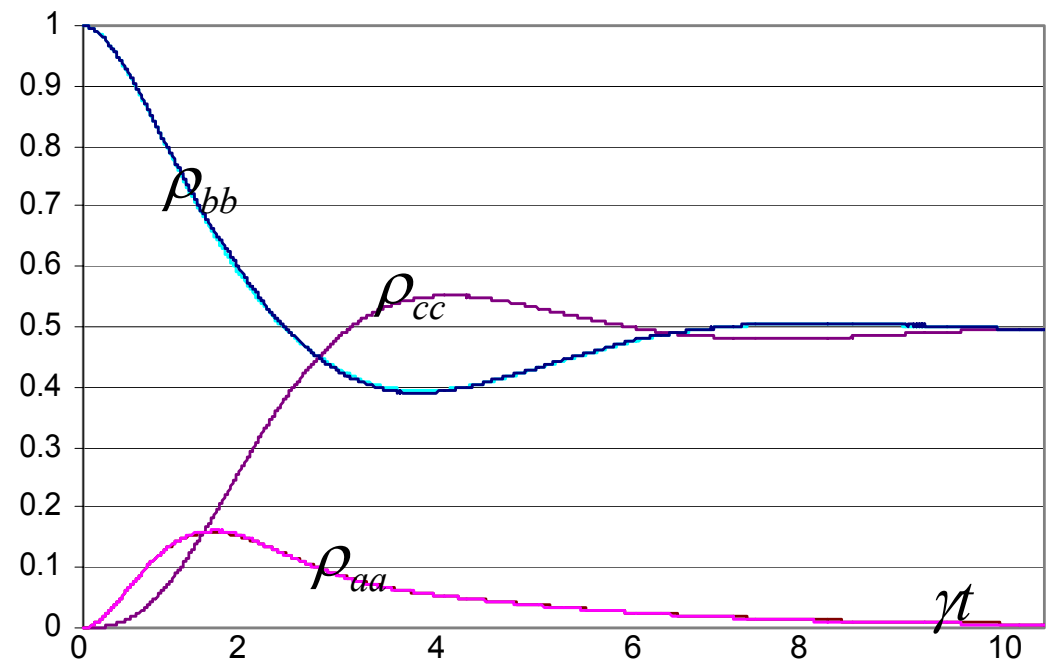
$$H_{eff} = \tilde{H} - \frac{i\hbar}{2} (\gamma_b + \gamma_c) \rho_{aa} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\Gamma}{2} (\sigma_{bb} + \sigma_{cc})$$

$$c_{ab} = c_1 = \sigma_{ba}; \quad \gamma_1 = \gamma_b$$

$$c_{ac} = c_2 = \sigma_{ca}; \quad \gamma_2 = \gamma_c$$

$$c_{cb} = c_3 = \sigma_{cc} - \sigma_{bb}; \quad \gamma_3 = \Gamma/2$$

Эффект когерентного пленения населенностей

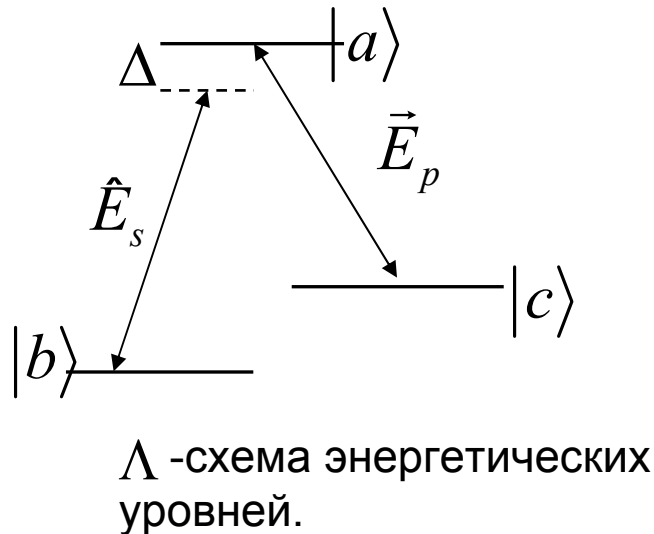


$$\Gamma = 0$$

$$\Omega_s = \Omega_p = 0.7\gamma$$

N=5000, N=10000, результат неотличим от точного решения
Агапьев Б.Д и др., УФН 163, 9 (1993)

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем



$|b\rangle \rightarrow |c\rangle$ - Запрещенный переход

$$\omega_p = \omega_{ac} \quad \Delta = \omega_{ab} - \omega_s$$

$\sigma_{ij} = |i\rangle\langle j|$ - операторы атомных переходов

$\{|i\rangle\}$ полный набор собственных энергетических состояний атома $\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{I}$

$$\Omega = \frac{E_p \mu_{ac}}{\hbar} - \text{частота Раби}$$

Сигнальное поле описывается оператором

$$\hat{\vec{E}}_s(\vec{r}, t) = \hat{\vec{E}}_s^+ + \hat{\vec{E}}_s^- = \vec{e} \varepsilon(\omega_s) \hat{\mu}(\vec{r}, t) e^{-i\omega_s t + ik_s z} + \vec{e} \varepsilon(\omega_s) \hat{\mu}^+(\vec{r}, t) e^{i\omega_s t - ik_s z}$$

$$\varepsilon(\omega_s) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_s}{V}} \quad V - \text{объем квантования}$$

Эффект ЭИП
Интенсивности \hat{E}_s до одного фотона

Нормировка оператора уничтожения

$$[a(\vec{r}, t), a^+(\vec{r}', t')] = \frac{L}{c} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t')$$

Взаимодействие Л-атома с квантованным полем.

Метод Гейзенберга-Ланжевена

$$H = H_0 + H_f + V \quad \text{Гамильтониан системы}$$

$$H_0 = \sum_i E_i \sigma_{ii} \quad \text{Невзаимодействующего атома}$$

$$\hat{H}_f = \hbar \omega_s \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \hbar \omega_s \quad \text{Свободного поля}$$

В гамильтониан взаимодействия (в резонансном приближении) явно входит оператор поля

$$V = - (\bar{\mu}_{ab} \sigma_{ab} \hat{E}_s^+(\zeta, t) + H.c.) - \hbar \sigma_{ac} \Omega(\zeta, t) e^{-i\omega_p t + ik_p z} + H.c.)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [H, \sigma_{ij}] - \gamma_{ij} \sigma_{ij} + \hat{F}_{ij} \quad \text{Уравнение Гейзенберга-Ланжевена}$$

Диссипация ↔ Операторы шума Ланжевена - Флуктуации

Флуктуационно-диссипационная теорема

$$\langle \hat{F}_{ij} \rangle = 0 \quad \langle \hat{F}_{ij}(\zeta, t) \hat{F}_{ij}^+(\zeta', t') \rangle = D_{ij} \delta(\zeta - \zeta') \delta(t - t')$$

$$\langle \hat{F}_{ij}(\zeta, t) \hat{F}_{ij}(\zeta', t') \rangle = \langle \hat{F}_{ij}^+(\zeta, t) \hat{F}_{ij}^+(\zeta', t') \rangle = 0, \quad D_{ij} - \text{коэффициенты диффузии}$$

Взаимодействие Л-атома с квантованным полем.

Система уравнения для атома

Получаем уравнения описывающие эволюцию операторов атомных переходов во времени

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{aa} &= -\gamma_a \sigma_{aa} - ig (\hat{a}^+ \sigma_{ba} - c.c.) - i (\Omega^* \sigma_{ca} - c.c.) + F_{aa} \\ \dot{\sigma}_{bb} &= \gamma_b \sigma_{aa} + ig (\hat{a}^+ \sigma_{ba} - c.c.) + F_{bb} \\ \dot{\sigma}_{cc} &= \gamma_c \sigma_{aa} + i (\Omega^* \sigma_{ca} - c.c.) + F_{cc} \\ \dot{\sigma}_{ba} &= -(\gamma + i\Delta) \sigma_{ba} + ig \hat{a} (\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) + i\Omega \sigma_{bc} + F_{ba} \\ \dot{\sigma}_{ca} &= -\gamma_{ca} \sigma_{ca} + ig \hat{a} \sigma_{cb} + i\Omega (\sigma_{cc} - \sigma_{aa}) + F_{ca} \\ \dot{\sigma}_{bc} &= -(\Gamma + i\Delta) \sigma_{bc} - ig \hat{a} \sigma_{ac} + i\Omega^* \sigma_{ba} + F_{bc} \end{aligned}$$

Константа связи

$$g = \mu_{ab} \sqrt{\frac{2\pi\omega_s}{\hbar V}}$$

$$\Omega = \frac{E_p \mu_{ac}}{\hbar} \text{ - частота Раби}$$

Учтем параметр малости
и начальные условия

$$\varepsilon = \frac{g\hat{a}}{\Omega}$$

$$\sigma_{bb}^0 = 1$$

$$\sigma_{aa}^0 = \sigma_{cc}^0 = \sigma_{ac}^0 = 0$$

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем. Поле в когерентном состоянии

Получаем в первом приближении по $\varepsilon = \frac{g\hat{a}}{\Omega}$ отделившуюся систему уравнений

$$\begin{aligned} \sigma_{bb}^0 &= 1 & \dot{\sigma}_{ba} &= -(\gamma + i\Delta)\sigma_{ba} + ig\hat{a} + i\Omega\sigma_{bc} + F_{ba} \\ \text{НУ: } \sigma_{aa}^0 &= \sigma_{cc}^0 = \sigma_{ac}^0 = 0 & \dot{\sigma}_{bc} &= -(\Gamma + i\Delta)\sigma_{bc} + i\Omega^*\sigma_{ba} + F_{bc} \end{aligned}$$

Поле в когерентном состоянии

$$\langle \hat{a} \rangle_{\text{ког}} = \alpha \quad \langle \hat{a} \rangle = \langle \psi_f | \hat{a} | \psi_f \rangle \quad | \psi_f \rangle - \text{волновая функция состояния поля}$$

$$\langle \dot{\sigma}_{ba} \rangle = -(\gamma + i\Delta) \langle \sigma_{ba} \rangle + i\Omega \langle \sigma_{bc} \rangle + ig\alpha$$

$$\langle \dot{\sigma}_{bc} \rangle = -(\Gamma + i\Delta) \langle \sigma_{bc} \rangle + i\Omega^* \langle \sigma_{ba} \rangle$$

В аналогии с классикой получаем (стационарное решение)

$$\langle \sigma_{ab} \rangle = \frac{ig\alpha (\Gamma + i\Delta)}{(\gamma + i\Delta) (\Gamma + i\Delta) + |\Omega_p|^2}$$

Эффект электромагнитно-индуцированной прозрачности
Harris S. E., Phys. Today, 50, 36 (1997)

Взаимодействие Л-атома с квантованным полем. Поле в сжатом когерентном состоянии

$$|\psi_{\text{сж}}\rangle = |\beta, \xi\rangle = \exp(\beta \hat{a}^+ - \beta^* \hat{a}) \exp\left[\frac{1}{2}(\xi^* \hat{a}^2 - \xi \hat{a}^{+2})\right] |0\rangle$$

$$\langle \hat{a} \rangle_{\text{сж}} = \alpha(\beta, r, \theta) = \beta \operatorname{ch}(\xi) - \beta^* e^{i\theta} \operatorname{sh}(\xi); \quad \xi = r e^{i\theta} \quad r - \text{параметр сжатия}$$

$$\langle \sigma_{ab} \rangle = \frac{ig(\Gamma + i\Delta)}{(\gamma + i\Delta)(\Gamma + i\Delta) + |\Omega_p|^2} \alpha(\beta, r, \theta)$$

$$\hat{X} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{2}, \hat{Y} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{2i}, \delta\hat{X} = \hat{X} - \langle \hat{X} \rangle_{\text{сж}}, \delta\hat{Y} = \hat{Y} - \langle \hat{Y} \rangle_{\text{сж}}$$

$$\langle (\delta X)^2 \rangle_{\text{сж}} = \frac{1}{4} e^{-2r}, \langle (\delta Y)^2 \rangle_{\text{сж}} = \frac{1}{4} e^{2r} \quad \theta = 0$$

Дисперсия квадратуры X в сжатом состоянии
уменьшена по сравнению с когерентным состоянием

$$\langle (\delta X)^2 \rangle_{\text{ког}} = \frac{1}{4}$$

$$\langle \hat{a} \rangle = 0 \quad \longrightarrow \quad \langle \sigma_{ab} \rangle = 0$$

$\beta = 0$ – сжатый вакуум

Необходимо рассматривать флуктуации параметров

$$\delta\sigma_{ba} = \sigma_{ba} - \langle \sigma_{ba} \rangle, \delta\sigma_{bc} = \sigma_{bc} - \langle \sigma_{bc} \rangle, \delta\hat{a} = \hat{a} - \langle \hat{a} \rangle$$

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем. Уравнения на флуктуации атомных операторов

Получаем систему уравнений на флуктуации параметров

$$\delta\dot{\sigma}_{ba} = -(\gamma_{ba} + i\Delta) \delta\sigma_{ba} + ig\delta a + i\Omega\delta\sigma_{bc} + F_{ba}$$

$$\delta\dot{\sigma}_{bc} = -(\Gamma + i\Delta) \delta\sigma_{bc} + i\Omega^* \delta\sigma_{ba} + F_{bc}$$

Применяем преобразование Фурье

$$\delta\sigma_{ba}(t) = \int_S d\omega \delta\sigma_{ba}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad \delta\sigma_{bc}(t) = \int_S d\omega \delta\sigma_{bc}(\omega) e^{-i\omega t}$$

$$\hat{a}(t) = \int_S d\omega \hat{a}(\omega) e^{-i\omega t} \quad S \ll \omega_s - \text{Эффективная полоса частот}$$

Получаем зависимость амплитуды флуктуаций от параметров поля и среды. Явно виден вклад шума.

$$\delta\sigma_{ba}(\omega) = \frac{(\Gamma + i\bar{\Delta})(g\delta\hat{a}(\omega) + F_{ba}(\omega)) + i\Omega F_{bc}(\omega)}{(\gamma_{ba} + i\bar{\Delta})(\Gamma + i\bar{\Delta}) + |\Omega|^2}$$

$$\bar{\Delta} = \Delta - \omega$$

$$\delta\sigma_{bc}(\omega) = \frac{i\Omega^*(g\delta\hat{a}(\omega) + F_{ba}(\omega)) + (\gamma_{bc} + i\bar{\Delta})F_{bc}(\omega)}{(\gamma_{ba} + i\bar{\Delta})(\Gamma + i\bar{\Delta}) + |\Omega|^2}$$

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем. Низкочастотный переход

Подробнее остановимся на переходе $|b\rangle \rightarrow |c\rangle$

низкочастотный переход перспективен с точки зрения организации квантовой памяти (большое время жизни когерентности)

Для описания процессов в атомной системе введем квадратурные операторы

$$\sigma_3 = \frac{\sigma_{bc} + \sigma_{bc}^+}{2}, \quad \sigma_4 = \frac{\sigma_{bc} - \sigma_{bc}^+}{2i}$$

$$\langle (\delta\sigma_3)^2 \rangle = \frac{Lg^2\Omega^2}{4c|\det|^4} \left[e^{-2r} (|\Omega^2| - \Delta^2 + \mathcal{H}\Gamma)^2 + e^{2r} \Delta^2 (\Gamma + \gamma)^2 \right] + \frac{(\Delta^2 + \gamma^2)\Gamma + \gamma|\Omega^2|}{2|\det|^2}$$

$$\langle (\delta\sigma_4)^2 \rangle = \frac{Lg^2\Omega^2}{4c|\det|^4} \left[e^{2r} (|\Omega^2| - \Delta^2 + \mathcal{H}\Gamma)^2 + e^{-2r} \Delta^2 (\Gamma + \gamma)^2 \right] + \frac{(\Delta^2 + \gamma^2)\Gamma + \gamma|\Omega^2|}{2|\det|^2}$$

$$|\det|^2 = (\mathcal{H}\Gamma - \Delta^2 + |\Omega^2|)^2 + \Delta^2 (\Gamma + \gamma)^2 \quad \text{Для упрощения расчетов считаем } \omega = 0$$

$$\bar{\Delta} = \Delta - \omega$$

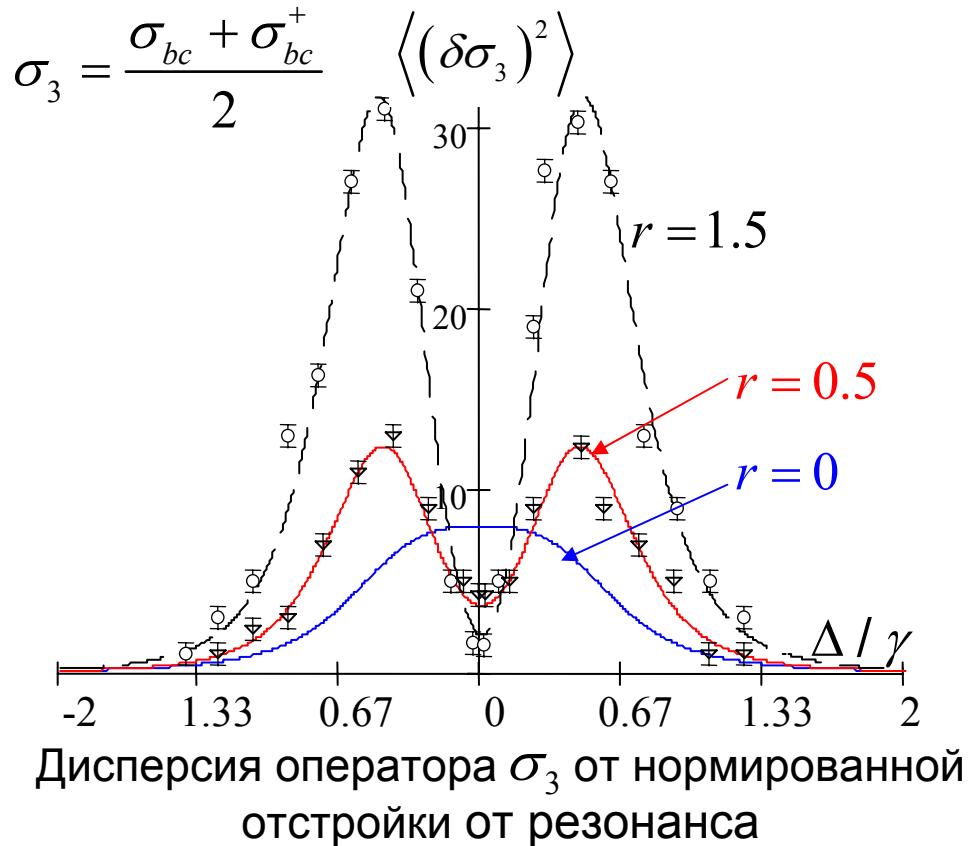
Видно, что дисперсия операторов существенно зависит от квантовых характеристик поля и параметров шума

Коэффициент сжатия: $\eta_{\hat{\sigma}} = \frac{\langle (\delta\hat{\sigma})^2 \rangle_{r=0}}{\langle (\delta\hat{\sigma})^2 \rangle_r}$ $\eta_{\sigma_3} \approx \frac{1 + c/2}{1 + c/2 e^{-2r}}$ $C = \frac{Lg^2}{c\gamma}$

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем.

Основные результаты

Передача квантовых характеристик поля среде

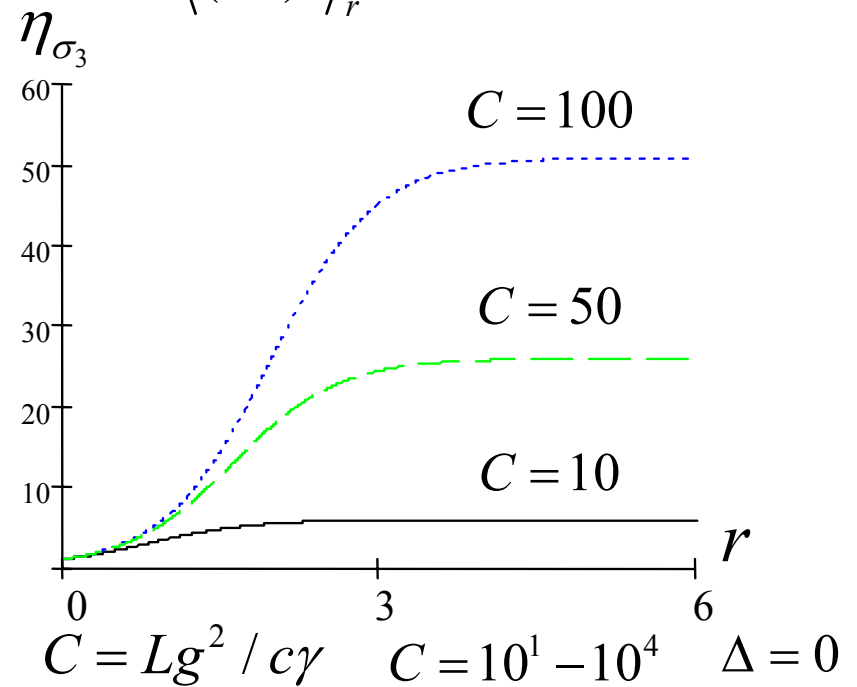


В зависимости от параметра сжатия r наблюдается уменьшение дисперсии вблизи резонанса

$$\Gamma = 10^{-3} \gamma, \Omega = 2/3\gamma, C = 50$$

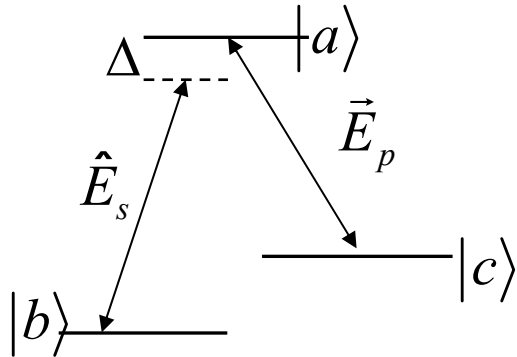
Коэффициент сжатия

$$\eta_\sigma = \frac{\langle (\delta\sigma)^2 \rangle_{r=0}}{\langle (\delta\sigma)^2 \rangle_r} \quad \eta_{\sigma_3} \approx \frac{1 + C/2}{1 + C/2 e^{-2r}}$$



А. И. Гельман, В. А. Миронов.
ЖЭТФ. 2010. Т. 137. С. 627-636.

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем. Метод Монте-Карло



Λ -схема энергетических уровней

Унитарное преобразование

$$\tilde{H} = U^{-1} H U - i\hbar U^{-1} \frac{dU}{dt} \quad U = e^{(i\omega_s \sigma_{ab} + i\omega_p \sigma_{ac})t}$$

$$\tilde{H} = \hbar\Delta\sigma_{cc} + \hbar\Delta\sigma_{aa} - \hbar g (\sigma_{ab} a + H.c.) - \hbar (\sigma_{ac} \Omega_p + H.c.)$$

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}, \rho] + L_{ab}\rho + L_{ac}\rho + L_{cb}\rho$$

$$L_{ab}\rho = \frac{\gamma_{ab}}{2} (2\sigma_{ba}\rho\sigma_{ab} - \sigma_{aa}\rho - \rho\sigma_{aa})$$

$$L_{ac}\rho = \frac{\gamma_{ac}}{2} (2\sigma_{ca}\rho\sigma_{ac} - \sigma_{aa}\rho - \rho\sigma_{aa})\sigma_{bb}$$

$$L_{cb}\rho = -\Gamma(\sigma_{cc}\rho\sigma_{bb} + \sigma_{bb}\rho\sigma_{cc})$$

$$= \frac{1}{4}\Gamma \left[-(\sigma_{cc} - \sigma_{bb})^2 \rho - \rho(\sigma_{cc} - \sigma_{bb})^2 + 2\Gamma(\sigma_{cc} - \sigma_{bb})\rho(\sigma_{cc} - \sigma_{bb}) \right]$$

Операторы квантовых скачков

$$c_{ab} = c_1 = \sigma_{ba}; \quad \gamma_1 = \gamma_{ab}$$

$$c_{ac} = c_2 = \sigma_{ca}; \quad \gamma_2 = \gamma_{ac}$$

$$c_{cb} = c_3 = \sigma_{cc} - \sigma_{bb}; \quad \gamma_3 = \Gamma/2$$

$$H_{eff} = \tilde{H} - \frac{i\hbar}{2} (\gamma_{ab} + \gamma_{ac} - \frac{\Gamma}{2}) \sigma_{aa}$$

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем.

Разложение по фоковским состояниям

$$|\beta, \xi\rangle = \exp(\beta a^+ + \beta^* a) \exp[(\xi^* a^2 - \xi a^{+2}) / 2] |0\rangle \quad \text{Поле в сжатом когерентном состоянии}$$

1. D. Akamatsu et.al. *Ultraslow Propagation of Squeezed Vacuum Pulses with Electromagnetically Induced Transparency Phys. Rev. Lett.* **2007.** V. 99. P. 153602.

2. K. Honda et. al. *Storage and Retrieval of a Squeezed Vacuum Phys. Rev. Lett.* **2008.** V. 100. P. 093601

3. J. Appel et. al. *Quantum Memory for Squeezed Light Phys. Rev. Lett.* **2008.** V. 100. P. 093602

Разложение по фоковским состояниям (с определенным числом фотонов) $|n\rangle$

$$|\beta, \xi\rangle = \sum_n \frac{(e^{i\varphi} th(r))^{n/2}}{2^{n/2} (n! ch(r))^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} (|\beta|^2 - e^{-i\varphi} \beta^2 th(r))\right) H_n\left(\frac{\beta e^{-i\varphi/2}}{\sqrt{2ch(r)sh(r)}}\right) |n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i,n} c_{i,n}(t) |i, n\rangle \quad \begin{array}{l} i = a, b, c \\ n = 0, 1, 2, \dots \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{полиномы Эрмита} \\ \xi = r e^{i\theta} \end{array} \quad r - \text{параметр сжатия}$$

$$\langle \sigma_{bc} \rangle = \langle \psi(t) | \sigma_{bc} | \psi(t) \rangle = \sum_{n,i,j} c_{n,i} c_{n,j}^* \langle i | \sigma_{bc} | j \rangle = \sum_n c_{n,b} c_{n,c}^* \quad |i, n\rangle = |i\rangle \otimes |n\rangle$$

При сильном сжатии ряд можно оборвать!!!

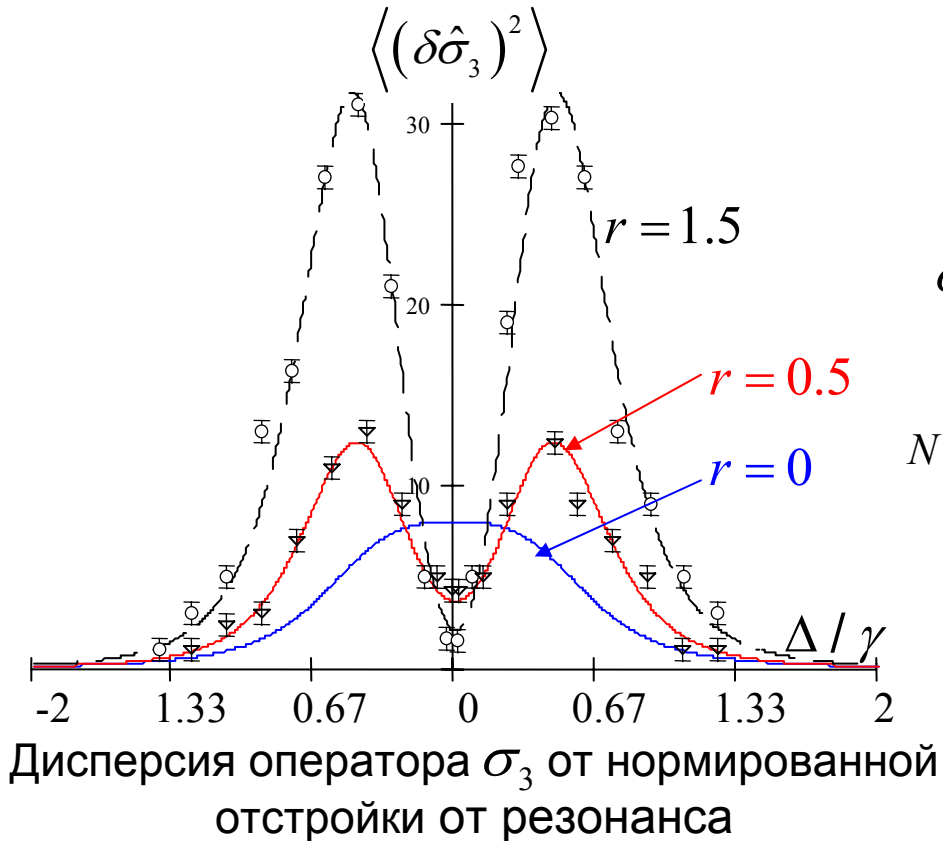
$$e^{2r} / |\beta|^2 \gg 1$$

Рассмотрим:

$$r = 1.5 \quad \langle n \rangle = 16 \quad e^{2r} / |\beta|^2 \approx 8.7$$

Достаточно 100 членов разложения (проверено экспериментально)

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем. Метод МК vs Гейзенберга-Ланжевена



$$\sigma_3 = \frac{\sigma_{bc} + \sigma_{bc}^+}{2} \quad \langle (\delta \sigma_3)^2 \rangle = \langle (\sigma_3 - \langle \sigma_3 \rangle)^2 \rangle$$

$$N = 100 \times 3 = 300$$

размерность системы

$$n = 100$$

число реализаций метода

$$\delta \sigma_{(n)} \leq 0.01$$

статистическая ошибка

$$t = 10 \gamma^{-1}$$

стационарное решение

$$0.01 \gamma^{-1}$$

шаг по времени

A. И. Гельман, В. А. Миронов. ЖЭТФ. 2010. Т. 137. С. 627-636.

A. Gelman, V. Mironov. Proc. SPIE. 2009. V. 7521. P. 75210F.

Уже показана возможность переноса квантовой информации из среды двухуровневых атомов на свет посредством Рамановского рассеяния

V. Poulsen et.al., Squeezed light from spin-Squeezed Atoms *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 87. P. 123601.

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем.

Изменение статистики сжатого света при распространении

Среда длины L В задаче распространения перейдем к операторам, непрерывно зависящим от координаты

$$\sigma_{ij}(\xi, t) = \frac{1}{N_z} \sum_{z_k \in N_z} \sigma_{ij}^k(\xi); \quad \hat{F}_{ij}(\xi, t) = \frac{1}{N_z} \sum_{z_k \in N_z} \hat{F}_{ij}^k(\xi) \quad N_z \gg 1$$

Δz

При этом, очевидно, справедливы все выкладки предыдущего раздела
Корреляционные функции операторов шума модифицируются:

$$\langle \hat{F}_{ij}(\xi, t) \hat{F}_{ij}^+(\xi', t') \rangle = D_{ij} \frac{L}{N} \delta(t - t') \delta(\xi - \xi')$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial z} \right) \hat{a}(\xi, t) = igN \hat{\sigma}_{ba}(\xi, t);$$

Укороченное уравнение для медленно меняющейся амплитуды сигнала в предст. Гейзенберга

Переходим к уравнению на флуктуации, используем преобразование Фурье:

$$\frac{\partial}{\partial z} \delta \hat{a}(\xi, \omega) = \frac{i\omega}{c} \delta \hat{a}(\xi, \omega) + \frac{igN}{c} \delta \hat{\sigma}_{ba}(\xi, \omega); \quad k(\omega) = \frac{i\omega}{c} - \frac{g^2 N}{c} \frac{\Gamma + i\bar{\Delta}}{(\xi + i\bar{\Delta})(\Gamma + i\bar{\Delta}) + |\Omega|^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \delta \hat{a}(\xi, \omega) = k(\omega) \delta \hat{a}(\xi, \omega) + \hat{F}(\xi, \omega); \quad \hat{F}(\xi, \omega) = \frac{igN}{c} \frac{\Gamma + i\bar{\Delta} \hat{F}_{ba}(\xi, \omega) + i\Omega \hat{F}_{bc}(\xi, \omega)}{(\xi + i\bar{\Delta})(\Gamma + i\bar{\Delta}) + |\Omega|^2}$$

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем.

Изменение статистики сжатого света при распространении

$$\frac{\partial}{\partial z} X(z, \omega) = k(\omega) X(z, \omega) + F_1(z, \omega)$$

Мы рассматриваем

$$F_1(z, \omega) = \frac{F(z, \omega_s + \omega) + F^+(z, \omega_s - \omega)}{2}$$

$$\Delta = 0 \quad k(\omega) = k^*(-\omega);$$

$$\bar{\Delta} = \Delta - \omega$$

Переходим к уравнению на спектр флуктуаций

$$\frac{\partial}{\partial z} S(z, \omega) = 2 \operatorname{Re} k(\omega) S(z, \omega) + \frac{c}{L} \int d\omega' \left(\langle F_1(z, \omega) X(z, \omega') \rangle \right) +$$

$$+ \frac{c}{L} \int d\omega' \langle X(z, \omega) F_1(z, \omega') \rangle$$

Вид частотной корреляции не изменился

$$\langle \delta X(z, \omega) \delta X(z, \omega') \rangle = \frac{L}{c} S(z, \omega) \delta(\omega + \omega')$$

Формально интегрируя уравнение на : $\hat{X}(\xi, \omega)$

$$\hat{X}(\xi, \omega) = \hat{X}(\xi = 0, \omega) e^{k(\omega)\xi} + \int_0^\xi dz' \hat{F}_1(\xi', \omega) e^{k(\omega)(\xi - z')}$$

$$\langle \hat{F}_1(\xi, \omega) \hat{X}(\xi = 0, \omega') \rangle = \langle \hat{X}(\xi = 0, \omega) \hat{F}_1(\xi, \omega') \rangle = 0$$

Поле на входе
не коррелирует
с шумом

Широкополосный сжатый вакуум

В качестве сигнальной волны рассматриваем широкополосный сжатый вакуум, ширина полосы S

Введем оператор квадратуры поля

$$X(\xi, \omega) = \frac{a(\xi, \omega_s + \omega) + a^\dagger(\xi, \omega_s - \omega)}{2}$$

Спектр флуктуаций определяется как, $z=0$

$$S(\omega) = \frac{c}{L} \int d\omega' \langle \delta X(\omega) \delta X(\omega') \rangle$$

Для широкополосного сжатого вакуума имеем

$$\langle \delta X(\omega) \delta X(\omega') \rangle = \begin{cases} \frac{L}{c} S(\omega) \delta(\omega + \omega'), & \text{если } \omega, \omega' \in S \\ \frac{L}{c} \frac{1}{4} \delta(\omega + \omega'), & \text{если } \omega, \omega' \notin S \end{cases}$$

$$S(\omega) = \frac{1}{4} \left(ch^2(r) + sh^2(r) - 2ch(r)sh(r) \cos(\theta) \right) \quad \text{Не зависит от частоты в полосе } S$$

$$\theta = 0$$

$$r = 0$$

$$S(\omega) = \frac{e^{-2r}}{4}$$

$$S(\omega) = \frac{1}{4}$$

Вакуумное состояние

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем.

Изменение статистики сжатого света при распространении

Корреляционная функция шума

$$\langle \hat{F}_1(z, \omega) \hat{F}_1^\dagger(z', \omega') \rangle = D(\omega) \frac{L}{N} \delta(\omega + \omega') \delta(z - z')$$

ИТОГО

$$\frac{\partial}{\partial z} S(z, \omega) = 2 \operatorname{Re} k(\omega) S(z, \omega) + D(\omega) \frac{c}{N}$$

Изменение спектра сжатия при распространении

Коэффициент вычисляется из флуктуационно-диссипационной теоремы

$$\langle \hat{F}_{bc}(z, \omega) \hat{H}_{bc}^\dagger(z', \omega') \rangle = 2\Gamma \frac{L}{N} \delta(\omega + \omega') \delta(z - z')$$

$$\langle \hat{F}_{ba}(z, \omega) \hat{H}_{ba}^\dagger(z', \omega') \rangle = 2\gamma \frac{L}{N} \delta(\omega + \omega') \delta(z - z')$$

Все остальные операторы
не коррелируют в приближении
что основная населенность
на уровне $|b\rangle$

$$\langle \sigma_{aa} \rangle \ll \langle \sigma_{bb} \rangle \approx 1, \langle \sigma_{cc} \rangle \ll \langle \sigma_{bb} \rangle \approx 1$$

$$\langle \sigma_{ba} \rangle = \langle \sigma_{ca} \rangle = \langle \sigma_{bc} \rangle = 0$$

Взаимодействие Λ -атома с квантованным полем. Изменение спектра флуктуаций при распространении

Переходим к уравнению на спектр флуктуаций

$$\frac{\partial}{\partial z} S(\xi, \omega) = 2 \operatorname{Re} k(\omega) S(\xi, \omega) + D(\omega) \frac{c}{N}$$

Флуктуационно-диссипационная теорема

$$\langle \hat{F}_1(\xi, \omega) \hat{F}_1(\xi', \omega') \rangle = D(\omega) \frac{L}{N} \delta(\omega + \omega') \delta(\xi - \xi') \langle \hat{F}_{bc}(\xi, \omega) \hat{F}_{bc}^+(\xi', \omega') \rangle = 2\Gamma \frac{L}{N} \delta(\omega + \omega') \delta(\xi - \xi')$$

$$\hat{F}_1(\xi, \omega) = (\hat{F}(\xi, \omega_s + \omega) + \hat{F}^+(\xi, \omega_s - \omega)) / 2 \quad \langle \hat{F}_{ba}(\xi, \omega) \hat{F}_{ba}^+(\xi', \omega') \rangle = 2\gamma \frac{L}{N} \delta(\omega + \omega') \delta(\xi - \xi')$$

Населенность на уровне $|b\rangle$

$$S(L, \omega) = S(0, \omega) e^{2L \operatorname{Re} k(\omega)} + \frac{c}{N} \frac{D(\omega)}{2 \operatorname{Re} k(\omega)} (e^{2L \operatorname{Re} k(\omega)} - 1)$$

$$\operatorname{Re} k(\omega) = -\frac{g^2 N}{c} \frac{(\omega^2 \gamma + \Gamma |\Omega^2| + \mathcal{H}^2)}{(\Gamma - \omega^2 + |\Omega|^2) + \omega^2 (\Gamma + \gamma)} \quad D(\omega) = \frac{(\omega^2 \gamma + \Gamma |\Omega^2| + \mathcal{H}^2)}{(\Gamma - \omega^2 + |\Omega|^2) + \omega^2 (\Gamma + \gamma)} \frac{g^2 N^2}{2c^2}$$

$$S(L, \omega) = S(0, \omega) \mathcal{T} - \frac{1}{4} (T - 1) \quad T = e^{2L \operatorname{Re} k(\omega)}$$

$T = 1$ — нет релаксации, нет шумов

$\Gamma = 0, \omega = 0$

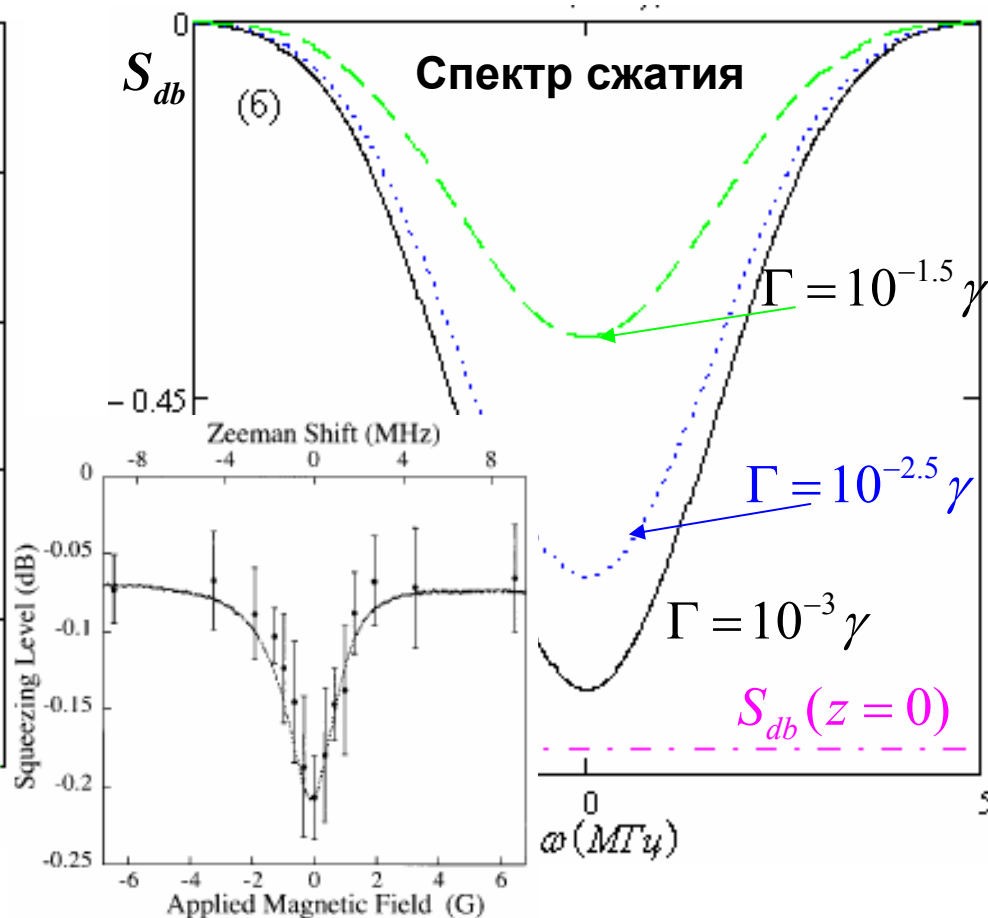
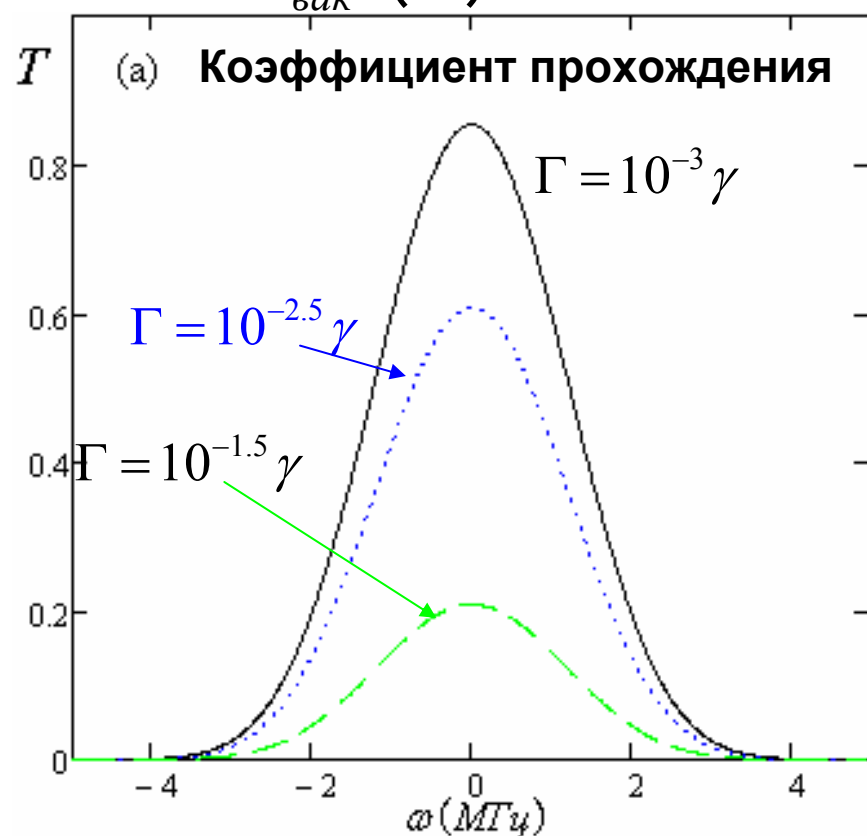
$\Delta = 0$

К-т прохождения

Принципиально важен учет флуктуаций, связанных с операторами шума

Изменение спектра сжатия при распространении

$$\eta(\omega) = \frac{S(\mathcal{L}, \omega)}{S_{\text{вак}}(\omega)} - \text{уровень сжатия, спектр сжатия } S_{db} = 10 \log \eta(\omega)$$



Akamatsu D., et.al. Electromagnetically induced transparency with squeezed vacuum, PRL, **92**, 20 (2004)

$\gamma = 6 \text{ МГц}, \Gamma \approx 19 \text{ КГц}, \Omega \approx 2\gamma_{ab}, C \approx 10^2$ **Совпадение с экспериментом подтверждает аналитические и численные результаты**

Лекция 3. Основные результаты

- Развита теория взаимодействия квантованного электромагнитного поля в сжатом когерентном состоянии со средой трехуровневых Λ -атомов в режиме ЭИП с учетом квантовой релаксации методом Гейзенберга-Ланжевена. Получены значения среднеквадратических отклонений (флуктуации) операторов атомных переходов в стационарном состоянии, характеризующих параметры атома. Исследовано влияние процессов релаксации на динамику системы. Показано, что квантовые свойства света (сжатие) могут передаваться атому в таком режиме. Результаты численного моделирования квантовым методом Монте-Карло находятся в хорошем соответствии с аналитическим решением, полученным нами.
 - Используя полученные зависимости, исследована задача распространения квантованного поля (в состоянии сжатого вакуума) в среде трехуровневых - атомов в режиме ЭИП и найдена зависимость уровня сжатия поля на выходе из среды от параметров на входе и свойств среды. Принципиально важным оказался учет флуктуаций параметров системы, связанных с операторами шума. Аналитические результаты позволяют интерпретировать данные эксперимента (PRL, **92**, 20 (2004)), что дополнительно подтверждает справедливость аналитических результатов. Предложенные нами методы позволяют с уверенностью рассчитывать модификацию параметров поля и среды в задаче распространения в режиме ЭИП.
1. **А. И. Гельман**, В. А. Миронов. Подавление шума в атомной системе под действием поля в сжатом когерентном состоянии // ЖЭТФ. 2010. Т. 137. С. 627-636.
 2. **A. Gelman**, V. Mironov. Noise suppression in three-level atomic system driven by quantized field // Proc. SPIE. 2009. V. 7521. P. 75210F.
 3. **А.И. Гельман**, В.А. Миронов. Особенности диссипативной динамики Λ -атома под действием квантованного поля в сжатом состоянии / // Учен. зап. Казан. Ун-та. Сер. Физ.-матем. Науки. 2010 (принято к печати).

Заключение

- Численно методом Монте-Карло и аналитически методом Гейзенберга-Ланжевена исследовано взаимодействие квантованного электромагнитного поля в когерентном сжатом состоянии со средой трехуровневых атомов в режиме электромагнитно-индуцированной прозрачности. Исследовано влияние процессов релаксации на динамику системы. Получены значения среднеквадратических отклонений (флуктуации) операторов атомных переходов в стационарном состоянии, характеризующих параметры атома. Показано, что квантовые свойства света (сжатие) могут передаваться среде в таком режиме. Результаты численного моделирования согласуются с аналитическим исследованием данной задачи.
- Разработан программный комплекс, реализующий метод Монте-Карло (квантовых траекторий) расчета динамики системы с помощью волновой функции системы. Программа разработана с учетом всех возможностей метода и может быть использована для исследования широкого класса проблем. Программа апробирована на известных задачах, таких как спектр резонансной флуоресценции двухуровневого атома, динамика двух- и трехуровневых систем под действием оптических полей
- Планируется продолжить изучение данной задачи и численно исследовать распространение квантованного поля в среде в режиме электромагнитно-индуцированной прозрачности.
- Метод очень перспективен для исследования квантовых систем для физики квантовой информации, квантовых вычислений, в т.ч. немарковских систем

Квантовые скачки в диссипативной динамике кубита

- ✓ Кубит является основным рабочим элементом квантового компьютера, физически реализуется в виде двухуровневой квантовой системы, например фотона, атома, донора в полупроводнике, ядерного спина, сверхпроводящего контура
- ✓ Важнейшей характеристикой кубита является время декогерентности, которое ограничивает интервал проведения квантовых вычислений. Связь с внешней средой и установкой приводит к обратному шумовому воздействию на кубит, что нарушает когерентность

М. Нильсен, И. Чанг Квантовые вычисления и квантовая информация. – М.: Мир, 2006. – 824 с.
М. Nakahara and T. Ohmi Quantum computing: from linear algebra to physical realizations. – London, 2008.

- ✓ Наиболее перспективные устройства для реализации квантового компьютера - кубиты на основе джозефсоновских переходов
- Yu.Makhlin, et al. Quantum-state engineering with Josephson-junction devices// Rev.Mod.Phys. 2001, 73, 357
- ✓ В недавних экспериментах была продемонстрирована возможность приготовления и проведения неразрушающих измерений состояний кубита, развита методика манипулирования состояниями кубита, выполнены измерения параметров и времени декогерентности одиночного кубита.
 - ✓ Разработан метод амплитудной спектроскопии, дающей информацию о воздействии шума на кубит

Несмотря на имеющийся прогресс, многие вопросы квантовой динамики кубитов в настоящее время все еще являются открытыми. Например, это проблемы измерения влияния шума, управления динамикой кубитов в сильном переменном поле, измерения состояния кубита в условиях шума

Цель лекции

✓ Численное и аналитическое исследование диссипативной динамики одиночного кубита на примере сверхпроводящего, применение развитой методики для интерпретации новейших экспериментов по изучению джозефсоновских кубитов методами амплитудной спектроскопии и определению параметров кубита, в том числе шумовых

✓ Наглядная демонстрация процесса измерения состояния кубита (томографии состояния) путем усреднения по единичным реализациям динамики одиночного кубита с помощью разработанного программного комплекса.

✓ Рассмотрение возможностей для динамического контроля состоянием кубита

А. И. Гельман, М. В. Денисенко, А. М. Сатанин Измерение влияния шума на динамику джозефсоновских кубитов в сильном переменном поле // ФТТ. 2010. Т. 52. С. 2094-2099.

А. И. Гельман, А. М. Сатанин Квантовые скачки при переходах Ландау-Зинера в диссипативной динамике сверхпроводящего кубита // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 91. С. 584–589.

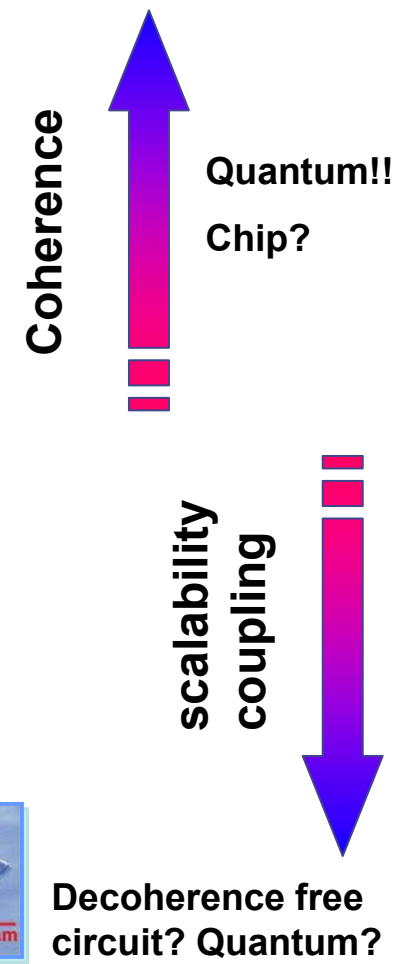
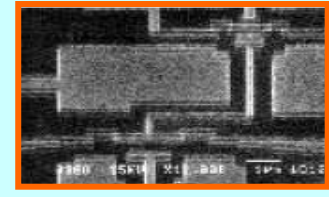
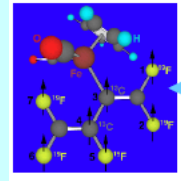
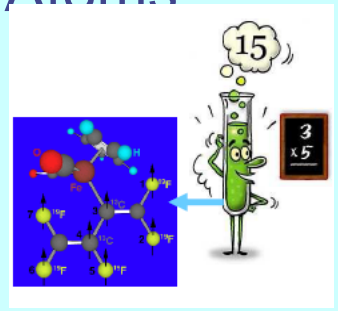
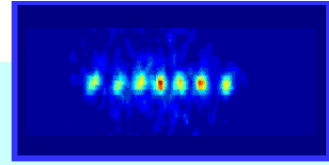
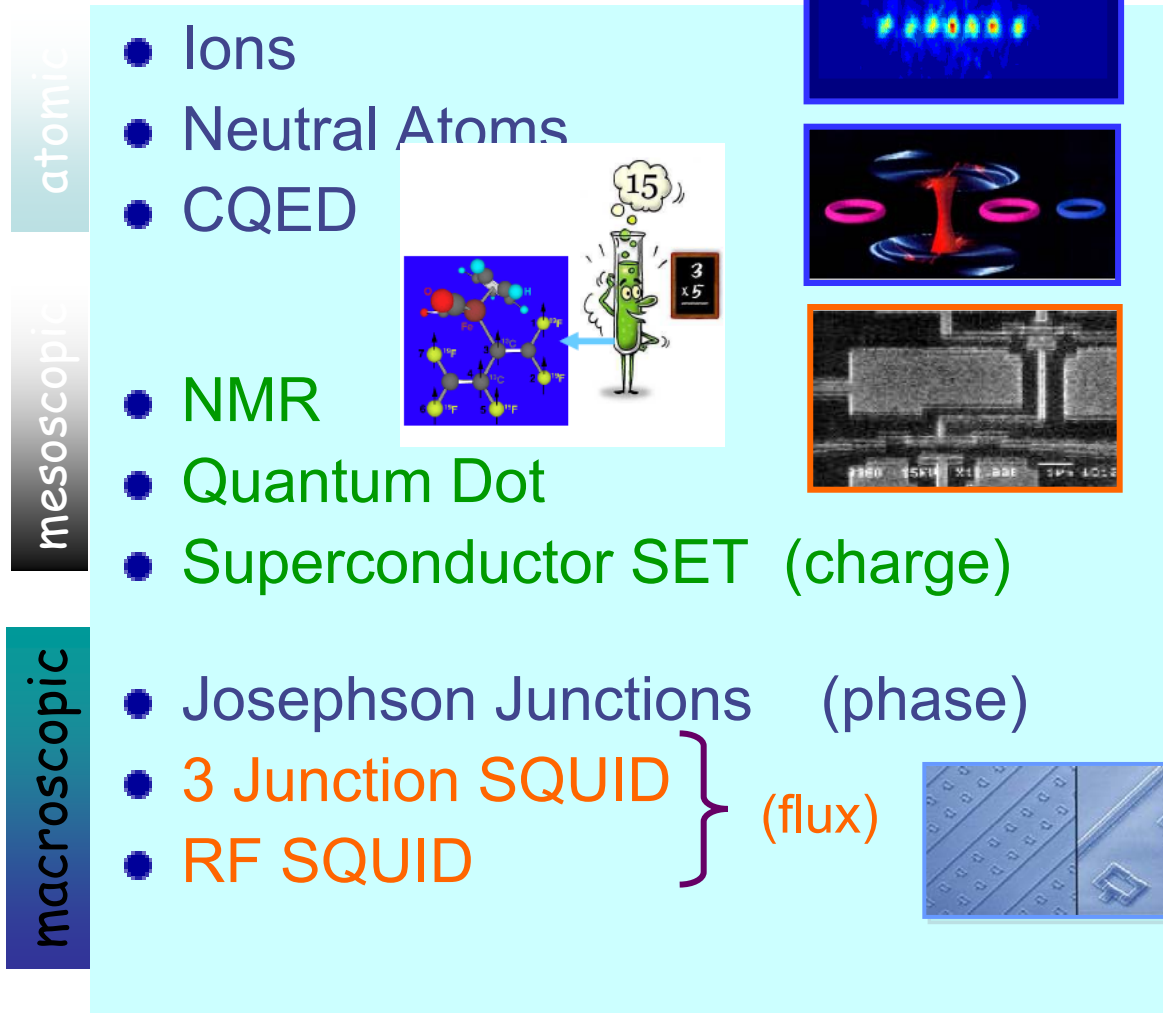
А. И. Гельман, А. М. Сатанин Квантовые скачки при спонтанной релаксации сверхпроводящего кубита под действием сильного ВЧ поля // Вестник ННГУ. 2010. (принято к печати).

А. И. Гельман, М. В. Денисенко, А. М. Сатанин Динамический контроль квантовых состояний

Кубиты

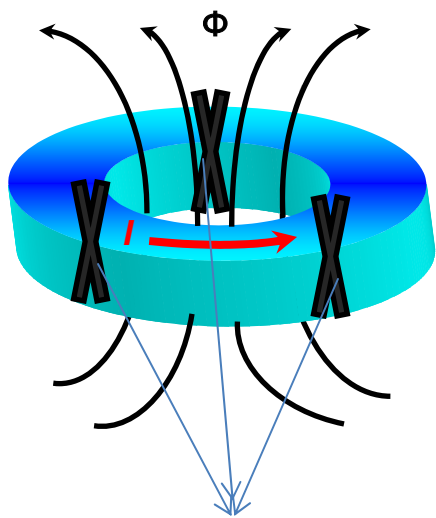
Требования: возможность контроля на квантовом уровне, большое время декогерентности и т.д.

Экспериментальные системы



Джозефсоновский кубит

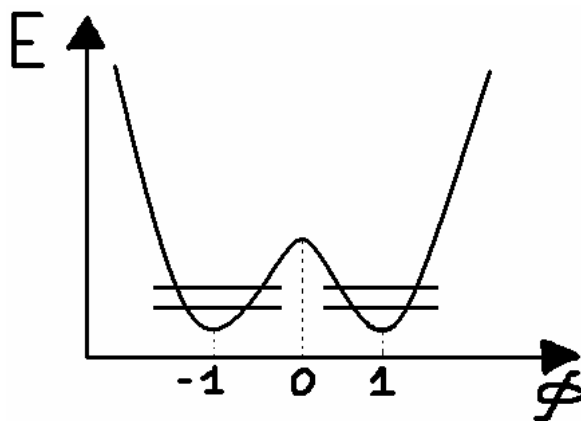
Flux qubit



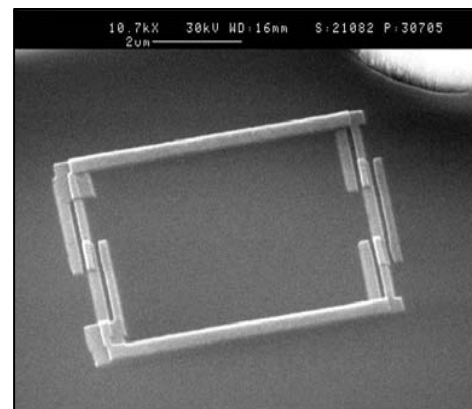
Джозефсоновские переходы

$$I = I_c \sin \delta,$$

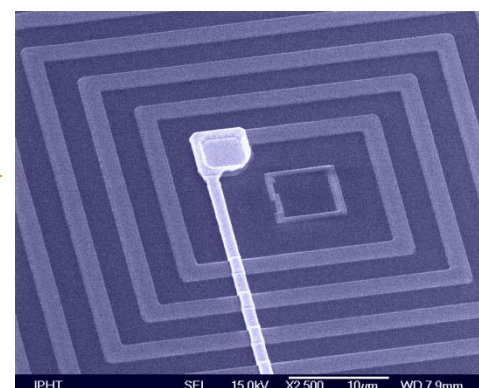
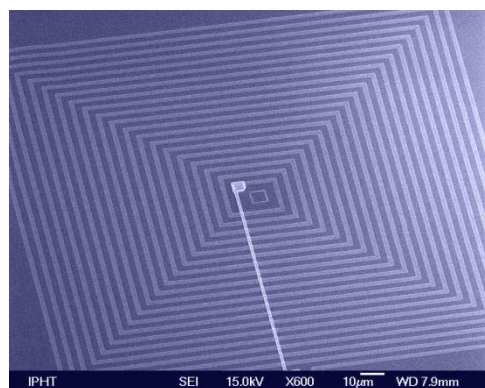
$$V = \left(\frac{\hbar}{2e} \right) \frac{d\delta}{dt}.$$



Зависимость энергии от разности фаз

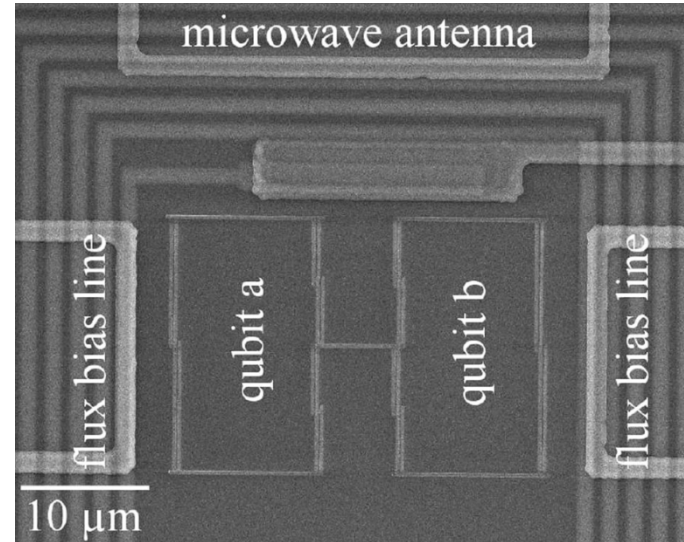
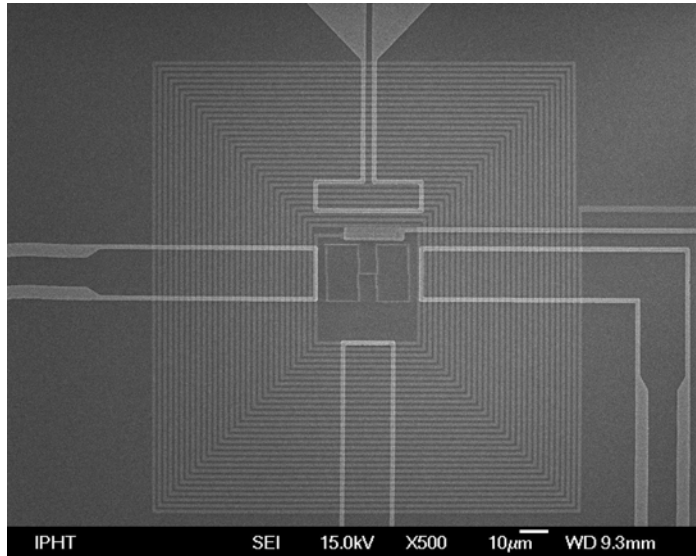


Джозефсоновский кубит



Джозефсоновский кубит в LC катушке

Связанные кубиты



Два связанных кубита

A. Izmailkov *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 037003 (2004);
M. Grajcar M. *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 020503 (2005);
A. Izmailkov, M. Grajcar, E. Il'ichev, Phys. Rev. Lett. **101**,
017003 (2008).

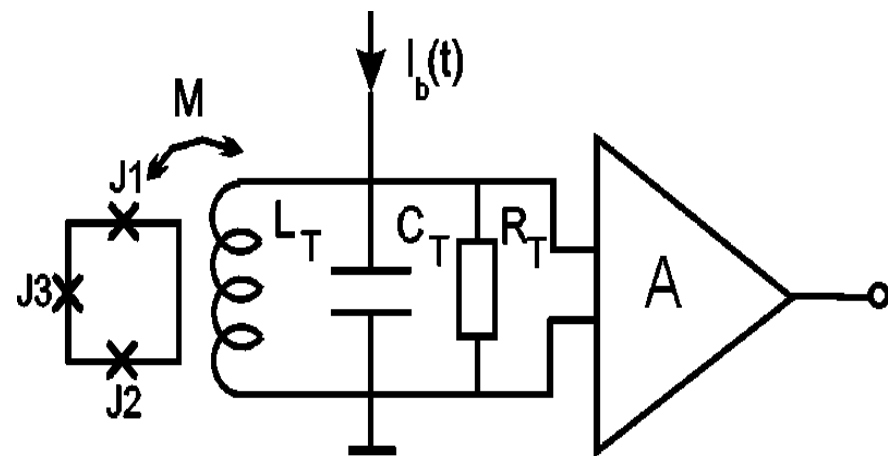


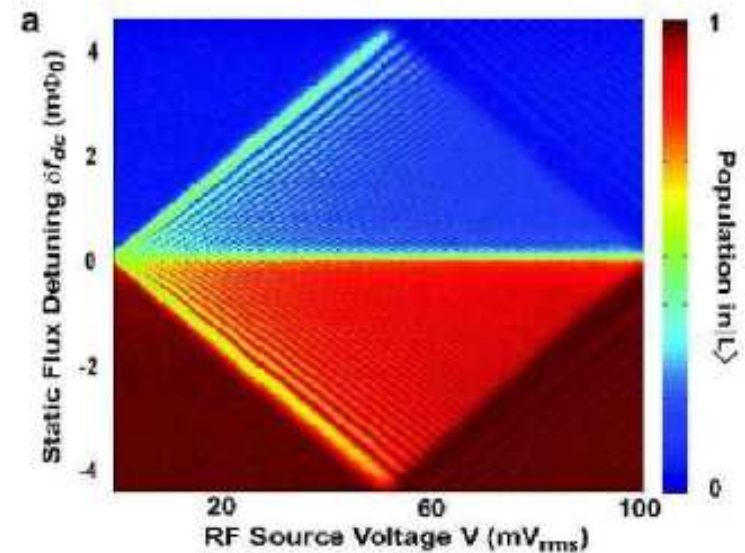
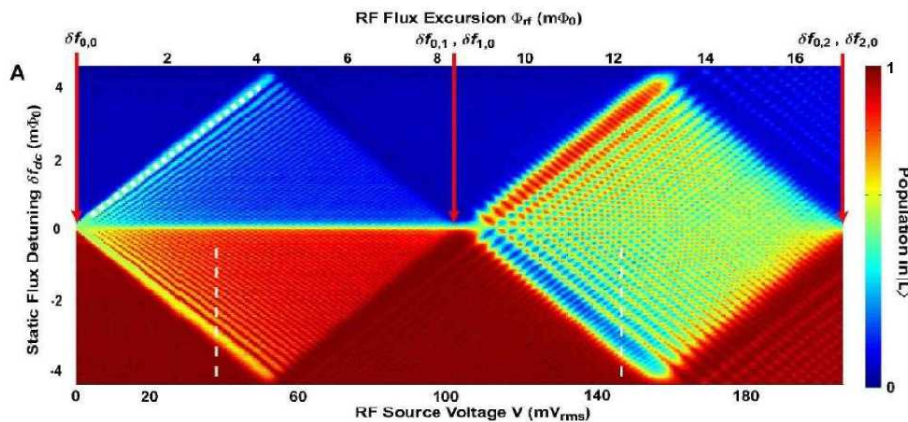
Схема для измерений

Амплитудная спектроскопия

- M. Sillanpa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **96**, 187002 (2006).
- D. Berns *et al.*, Nature, **455**, 51 (2008).
- M.S. Rudner, A.V. Shytov, L.S. Levitov, Phys. Rev. Lett. **101**, 190502 (2008).

Идея: получение информации путем «развертки» функции отклика по амплитуде сигнала

Главное достоинство: система исследуется в широких диапазонах изменения амплитуды при любых частотах



Два связанных кубита

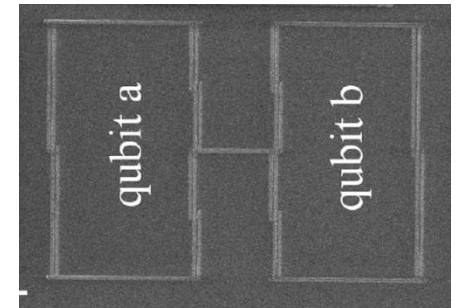
Гамильтониан взаимодействующих кубитов:

$$H = -\frac{1}{2}(\epsilon_1 \sigma_z^{(1)} + \Delta_1 \sigma_x^{(1)}) \otimes I - \frac{1}{2} I \otimes (\epsilon_2 \sigma_z^{(2)} + \Delta_2 \sigma_x^{(2)}) - \frac{J}{2} \sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)}$$

$$H = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \epsilon_1 + \epsilon_2 + J & \Delta_2 & \Delta_1 & 0 \\ \Delta_2 & \epsilon_1 - \epsilon_2 - J & 0 & \Delta_1 \\ \Delta_1 & 0 & -\epsilon_1 + \epsilon_2 - J & \Delta_2 \\ 0 & \Delta_1 & \Delta_2 & -(\epsilon_1 + \epsilon_2) + J \end{pmatrix}$$

$$\epsilon_i = \epsilon_i^c \left(f_i - \frac{1}{2} \right) \quad \epsilon_i^c = 2 |I_i| \Phi_0$$

$$f_i = \Phi_{xi} / \Phi_0 \quad \frac{|J|}{2} = M_{12} I_1 I_2$$



Идентичные кубиты:

$$\begin{matrix} \epsilon = \epsilon_1 = \epsilon_2 \\ \Delta = \Delta_1 = \Delta_2 \end{matrix}$$



$$\tilde{H}_{st} = U_{st}^+ H U_{st}$$

$$U_{st} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

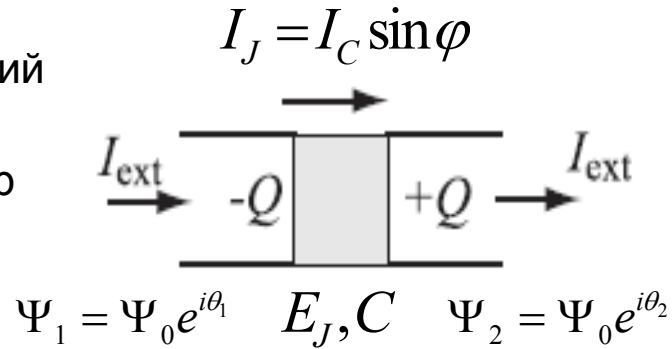
синглет-триплетное представление

$$\tilde{H}_{st} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2\epsilon + J & \sqrt{2}\Delta & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\Delta & -J & \sqrt{2}\Delta & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\Delta & -2\epsilon + J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J \end{pmatrix}$$



$$H_{st} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2\epsilon + J & \sqrt{2}\Delta & 0 \\ \sqrt{2}\Delta & -J & \sqrt{2}\Delta \\ 0 & \sqrt{2}\Delta & -2\epsilon + J \end{pmatrix}$$

Джозефсоновский переход



$$Q = -2Ne$$

$$\varphi = \theta_2 - \theta_1$$

I_C – критический ток

$$H = \frac{1}{2} E_C N^2 - E_J \left(\cos \varphi + \frac{I_{ext}}{I_C} \varphi \right)$$

$$E_C = \frac{(2e)^2}{C}$$

$$E_J = \frac{I_C \hbar}{2e}$$

$$N = \frac{C \hbar}{4e^2} \frac{d\varphi}{dt}$$

$$\frac{dQ}{dt} = -I_{ext} + I_C \sin \varphi$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{2eV}{\hbar}$$

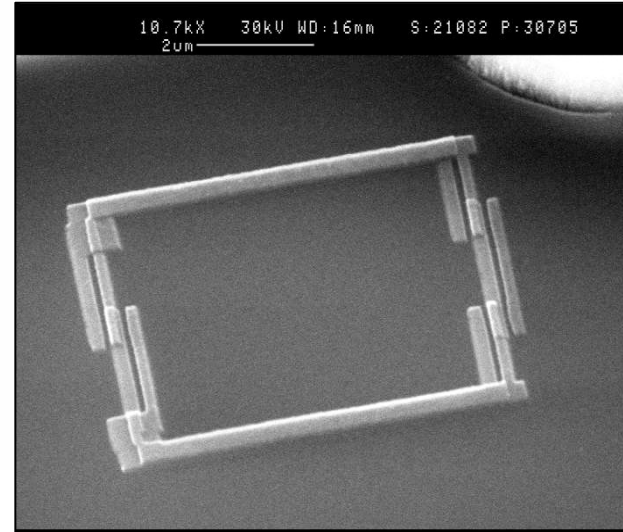
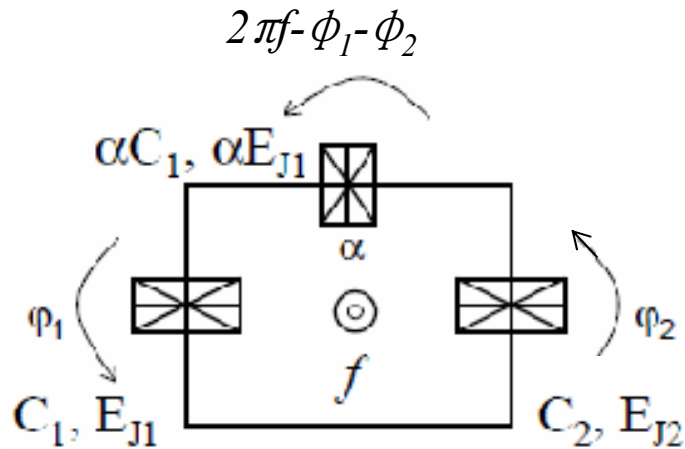
Кулоновская энергия

Джозефсоновская энергия Число куперовских пар

$[N, \varphi] = -i$ Переход к квантовому описанию, соотношение неопределенно

В зависимости от того, какая энергия больше, выделяют зарядовый и фазовый (поточковый) кубиты (определяется геометрией)

Сверхпроводящий потоковый кубит (3JJ qubit)



$$E_{J1} = E_{J2} = I_C \Phi_0 / 2\pi \quad \Phi_0 = h / 2e$$

$$E_{J3} = \alpha E_{J1} \quad \alpha I_C \quad T = 20mK$$

$f = \Phi_q / \Phi_0$ – внешний магнитный поток

φ_i – разность фаз волновой функции на i -ом переходе

J.E. Mooij, et.al, Science 285, 1036 (1999).

Yu. Makhlin, G. Schon, and A. Shnirman, Rev. Mod.Phys. 73, 357 (2001)

3JJ qubit: гамильтониан

$$H = \frac{C}{2} \frac{\Phi_0}{2\pi} (\dot{\varphi}_1^2 + \dot{\varphi}_2^2) + \alpha \frac{C}{2} \frac{\Phi_0}{2\pi} (\dot{\varphi}_1 + \dot{\varphi}_2)^2 - E_J \{ \cos \varphi_1 + \cos \varphi_2 + \alpha \cos(2\pi f - \varphi_1 - \varphi_2) \}$$

$$2\pi f_{tot} = \varphi_3 + \varphi_1 + \varphi_2 \quad f_{tot} = f + LI / \Phi_0, \quad LI / \Phi_0 \ll f \text{ для потокового кубита}$$

самоиндукция

$$\phi = (\varphi_1 + \varphi_2) / 2 \quad \theta = (\varphi_1 - \varphi_2) / 2$$

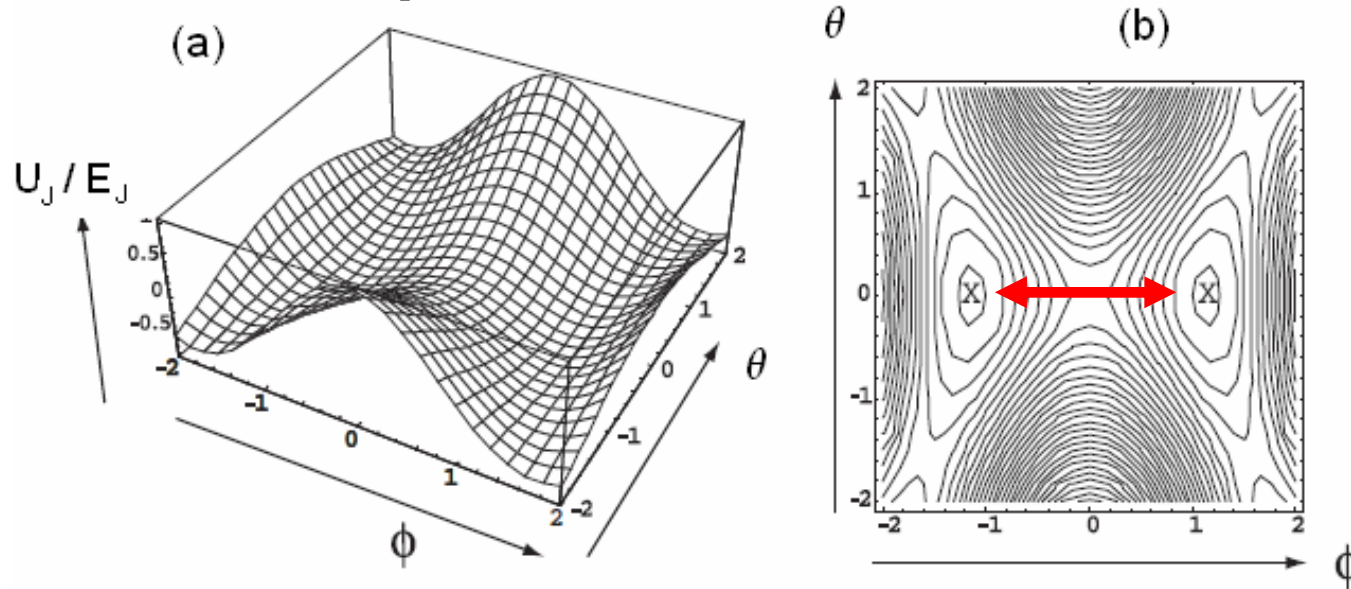
$$H = \frac{1}{2} \frac{P_\phi^2}{M_\phi} + \frac{2}{2} \frac{P_\theta^2}{M_\theta} - E_J \{ 2 \cos \theta \cos \phi + \alpha \cos(2\pi f + 2\phi) \}$$

$$P_\phi = M_\phi \dot{\phi}^2 \quad P_\theta = M_\theta \dot{\theta}^2 \quad M_\theta = (\Phi_0 / 2\pi)^2 2C(1 + 2\alpha) \quad M_\phi = (\Phi_0 / 2\pi)^2 2C$$

Частица с анизотропной массой в 2d джозефсоновском потенциале

$$U_J = -E_J \{ 2 \cos \theta \cos \phi + \alpha \cos(2\pi f + 2\phi) \}$$

3JJ qubit: гамильтониан



*J.E. Mooij, et.al,
Science 285,
1036 (1999).*

$$U_J = -E_J \{2 \cos \theta \cos \phi + \alpha \cos(2\pi f + 2\phi)\}$$

$f = \Phi_q / \Phi_0$ – внешний магнитный поток, может быть подстроен

При $f \approx 0.5$ минимум потенциальной энергии U_J :

$$\theta = 0 \quad I_p = \frac{2e}{\hbar} \frac{\partial U}{\partial \phi_1} = \frac{2e}{\hbar} \frac{\partial U}{\partial \phi_2} = \frac{2e}{\hbar} \frac{\partial U}{\partial \phi_3} \quad I_p = \pm I_c \sin \phi \sim \pm \phi_0$$

$$\cos \phi_0 = \frac{1}{2\alpha}$$

$$0.5 \leq \alpha \leq 1$$

Сверхпроводящий ток в противоположных направлениях, одинаков через каждый переход

Движение возможно только в одном направлении – эффективный двухъямный потенциал

3JJ qubit: гамильтониан

$$\delta U_J = 2I_p (f - 1/2)$$

Учет нижнего уровня в каждой

$$H_s = \frac{1}{2} (\varepsilon_0 \sigma_z + \Delta \sigma_x)$$

Δ – туннельное расщепление уровней

$$\varepsilon_0 = \delta U_J = 2I_p (f - 0.5)$$

σ_z, σ_x – матрицы Паули

$$E_{1,0} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\varepsilon_0^2 + \Delta^2}$$

$$|0\rangle = -\sin \theta / 2 |\uparrow\rangle + \cos \theta / 2 |\downarrow\rangle$$

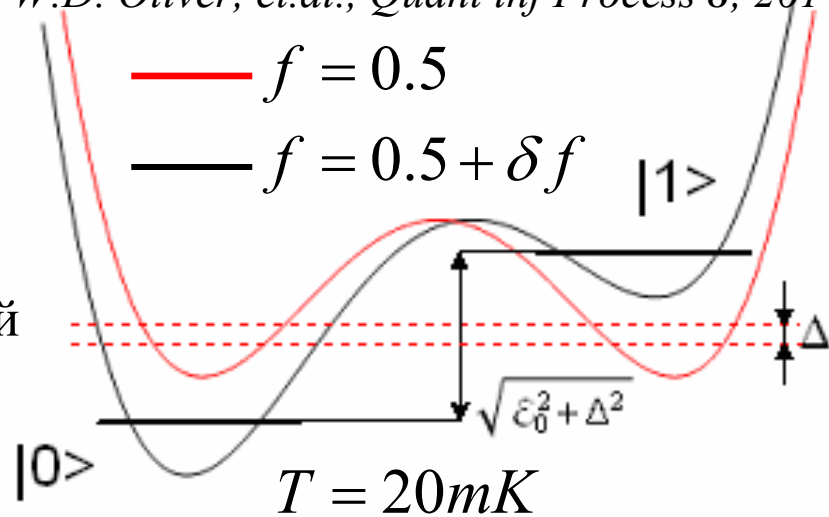
$$|1\rangle = \cos \theta / 2 |\uparrow\rangle + \sin \theta / 2 |\downarrow\rangle$$

$$\theta = \arctan \Delta / \varepsilon_0$$

$$\sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle, \sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

Искусственный атом

W.D. Oliver, et.al., *Quant inf Process* 8, 261 (2009)



$$\varepsilon_0 = 0$$

$$E_{1,0} = \pm \Delta / 2$$

$$\varepsilon_0 \gg \Delta$$

$$E_{1,0} = \pm \varepsilon_0 / 2$$

$$|1\rangle = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})^T$$

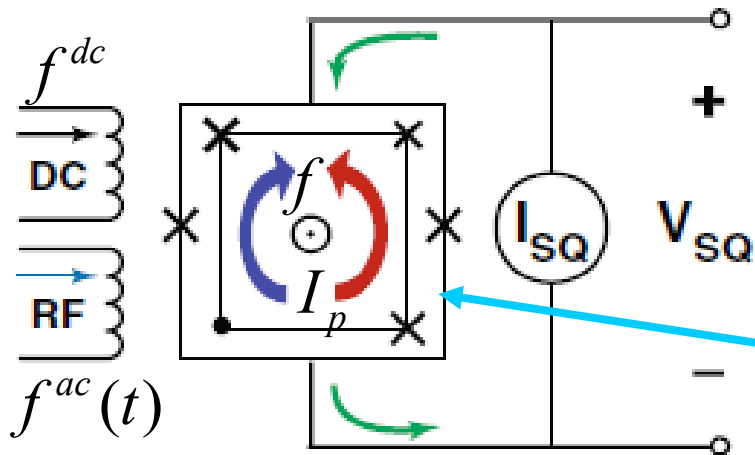
$$|0\rangle = (-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})^T$$

$$|1\rangle = (1, 0)^T = |\uparrow\rangle$$

$$|0\rangle = (0, 1)^T = |\downarrow\rangle$$

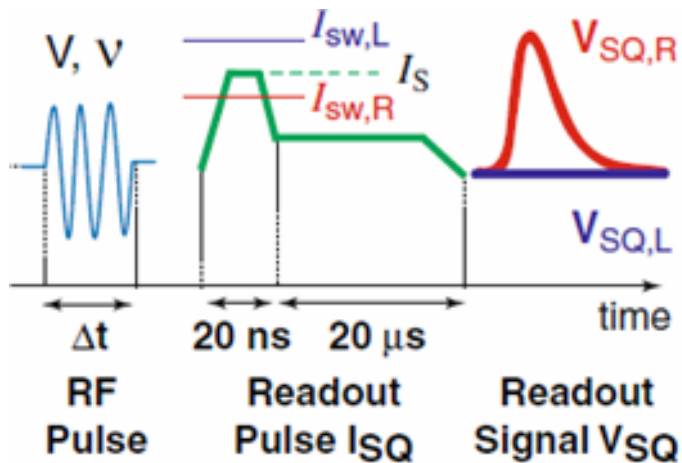
Данные состояния могут быть измерены,
соответствуют току в кубите по- и против часовой стрелки

3JJ qubit: управление динамикой



Воздействие на кубит внешними полями:
 1. постоянным магнитным полем f^{dc}
 2. переменным ВЧ электромагнитным полем f^{ac}

SQUID
 Схема измерения состояния кубита



$$f(t) = f^{dc} + f^{ac}(t) \quad f^{ac}(t) \propto A \cos \omega t$$

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A \cos \omega t \quad f^{dc} \propto \varepsilon_0 = 2I_p (f - 0.5)$$

$$H_s = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon(t) & \Delta \\ \Delta & -\varepsilon(t) \end{pmatrix}$$

Гамильтониан справедлив для описания динамики всех типов сверхпроводящих кубитов (не только потокового)

Различие заключается в способе управления внешними параметрами

В случае 3JJ кубита – путем изменения амплитуды внешних полей f^{dc} и f^{ac}

3JJ qubit: резонансное приближение

$$H'(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & \Delta e^{i(A/\omega)\sin\omega t} \\ \Delta e^{-i(A/\omega)\sin\omega t} & -\varepsilon_0 \end{pmatrix} \quad U(t) = \exp \left[\left(-\frac{i}{2} \frac{A}{\omega} \sin\omega t \right) \sigma_z \right]$$

Аналогичный гамильтониан широко известен в оптике:
резонансное взаимодействие 2-уровневого атома с частотно-модулированным

$\Omega = \Delta$ ε_0 – detuning from resonance лазерным полем ω – frequency of modulation

*G. S. Agarwal et al.,
Phys. Rev. A 50, R4465 (1994)*

A/ω – index of modulation

$$e^{iA/\omega \sin\omega t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n \left(\frac{A}{\omega} \right) e^{in\omega t}$$

$$n\omega - \varepsilon_0 \approx 0$$

$$\omega \gg \Delta$$

ОТЛИЧИЕ ОТ ОПТИКИ

$$H'(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_n \\ \Delta_n & 0 \end{pmatrix} \quad \Delta_n = \Delta J_n(A/\omega) \quad S. Ashhab, et al.,
Phys. Rev. A 75, 063414 (2007)$$

$\Omega_n = \Delta_n$ – Раби-динамика

$\Omega_n = 0$ - Эффект когерентного подавления туннелирования (КПТ), даже в присутс сильного поля накачки частота Раби равна нулю, кубит не возбуждается.

$$P_{\uparrow} = \frac{1}{2} \sum_n \frac{\Delta_n^2}{\Delta_n^2 + (\varepsilon_0 - n\omega)^2}$$

Средняя по времени населенность верхнего уровня кубит.

Ф. Бесселя приводит к интерференционной картине в зависимости населенности от амплитуды

— постоянного и переменного полей (для сверхпроводящих)

3JJ qubit: переходы Ландау-Зинера

Впервые исследованы при рассмотрении пересечения уровней при столкновении атомов

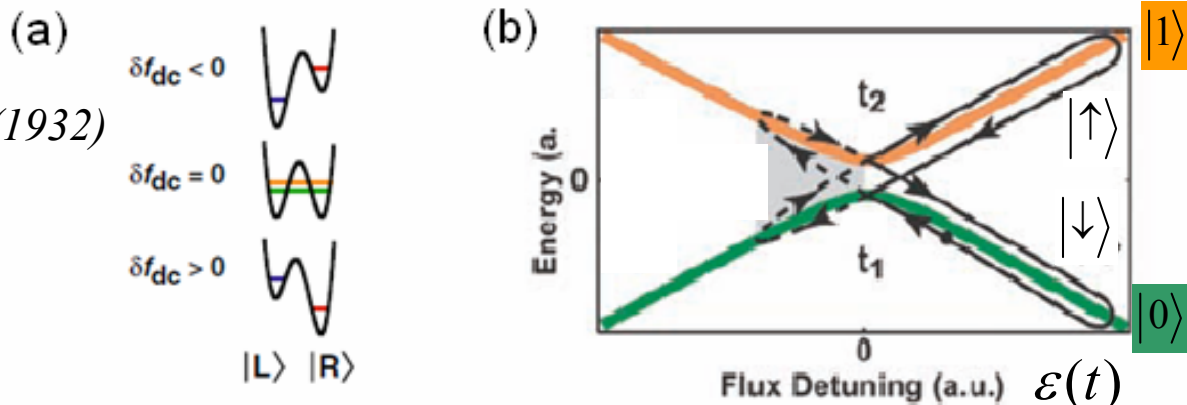
L. D. Landau,

Phys. Z. Sowjetunion 2, 46 (1932)

C. Zener. *Proc. R. Soc. A*137, 696 (1932)

$$H_s = \frac{1}{2}(\varepsilon(t)\sigma_z + \Delta\sigma_x)$$

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A \cos \omega t$$



$\varepsilon(t) = 0$ - уровни пересекаются в неадиабатическом базисе (без учета туннелирования)

Вероятность перехода $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$ в пределе бесконечно большого времени

$$P_{LZ} = 1 - \exp(-2\pi\Delta^2 / \hbar\nu)$$

$\nu \equiv \partial\varepsilon(t) / \partial t_{\varepsilon(t)=0}$ $\gamma_{ZL} = \Delta^2 / \hbar\nu$ - коэффициент адиабатичности

Скачки населенности происходят при каждом пересечении уровней.

Периодическое

пересечение приводит к интерференционной картине $P_{\uparrow}(A, \varepsilon_0)$ *W. D. Oliver, Y. Yu, J. C. Cuevas, et.al., Science* 310, 1653 (2005)

**Основная цель работы –
изучение влияния шума на динамику кубита и переходы ЛЗ**

3JJ qubit: квантовый шум в системе

$$H_s = \frac{1}{2}(\varepsilon(t)\sigma_z + \Delta\sigma_x)$$

F_x – продольная релаксация (переворот спина)
(флуктуации заряда)

$$H_{int} = F_z\sigma_z + F_x\sigma_x$$

F_z – поперечная релаксация (дефазировка)
(флуктуация потока)

$$\gamma_\alpha(t-s) = \langle F_\alpha(t)F_\alpha^+(s) \rangle$$

Γ – скорость дефазировки

$$\tilde{\gamma}(\omega) \approx const, \omega \in [0, \varepsilon_0]$$

γ – скорость релаксации энергии

$\Gamma \gg \gamma$ для потокового кубита

M. Sillanpaa, et al., Phys. Rev.Lett. 96, 187002 (2006).

W. D. Oliver, et al., Science 310, 1653 (2005).

D. M. Berns, et al., Phys. Rev. Lett. 97, 150502 (2006).

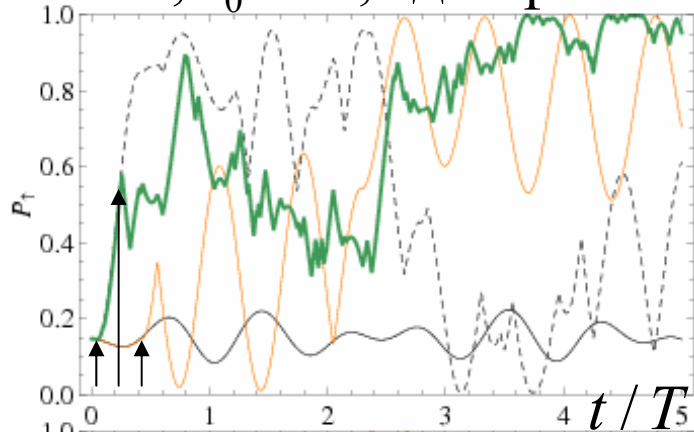
D. M. Berns, et al., Nature 455, 51 (2008).

Кинетическое уравнения в марковском приближении

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H_s, \rho] + \frac{1}{4}\Gamma (2\sigma_z \rho \sigma_z^+ - \rho \sigma_z^+ \sigma_z - \sigma_z^+ \sigma_z \rho)$$

3JJ qubit: квантовые траектории

$\Delta = \omega, \varepsilon_0 = \omega$, однофотонный резонанс



$A = 0.1\omega$

$A \ll \varepsilon_0$

Кубит приготовлен в состоянии $|0\rangle$

J. You, et.al, Phys. Rev. Lett. 100, 047001(2008)

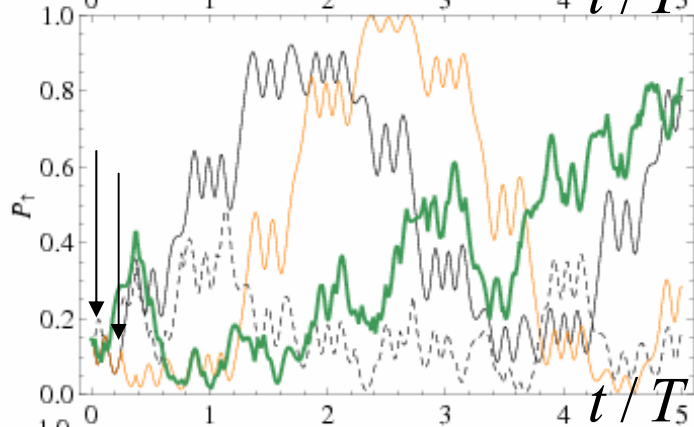
$$|0\rangle = -\sin \theta / 2 |\uparrow\rangle + \cos \theta / 2 |\downarrow\rangle$$

— $\Gamma = 0$

— $\Gamma = 0.09\omega$

--- $\Gamma = 0.81\omega$

— $\Gamma = 4\omega$



$A = 8.5\omega$

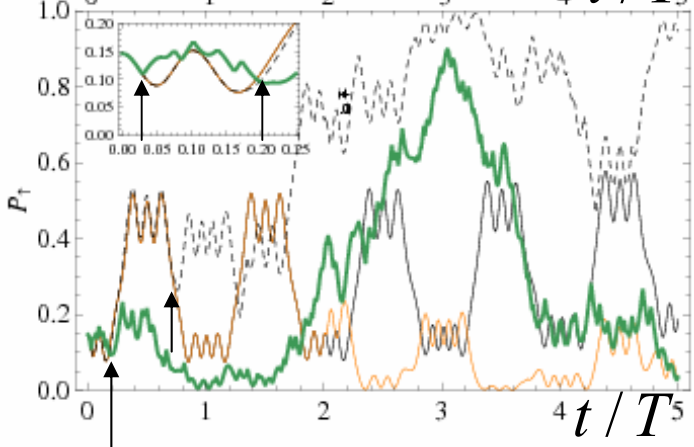
$\Delta_1(8.5) \approx 0.27\omega$

Эффективный гамильтониан в резонансном приближении

Rabi+LZ

$P_{LZ} \approx 0.45$

$$H'(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_n \\ \Delta_n & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \Delta_n &= \Delta J_n(A/\omega) \\ n\omega - \varepsilon_0 &\approx 0 \end{aligned}$$



$A = 10.2\omega$

$\Delta_1(10.2\omega) \approx 0$

$P_{LZ} = 1 - \exp(-2\pi\Delta^2 / \nu)$

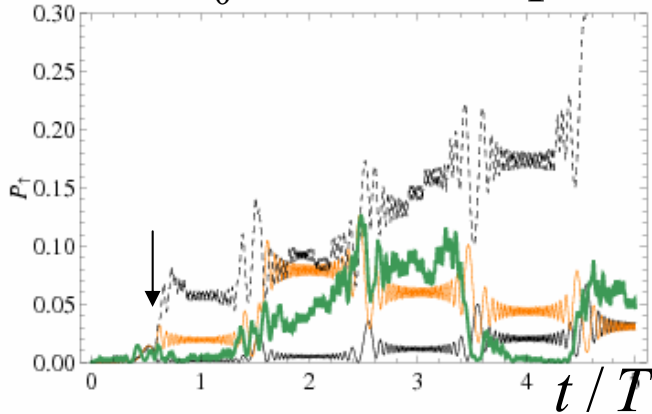
$\nu \equiv \partial\varepsilon(t) / \partial t_{\varepsilon(t)=0} \approx A$

КПТ

С увеличением Γ динамика существенно меняется. Кубит может возбуждаться на верхний уровень. Нет пленения населенностей на временах $\sim T/2$ (между пересечениями уровней)

3JJ qubit: квантовые траектории

$\Delta = \omega, \varepsilon_0 = 30\omega, 30$ -фотонный резонанс, сильное поле: $\varepsilon_0, A \gg \omega$

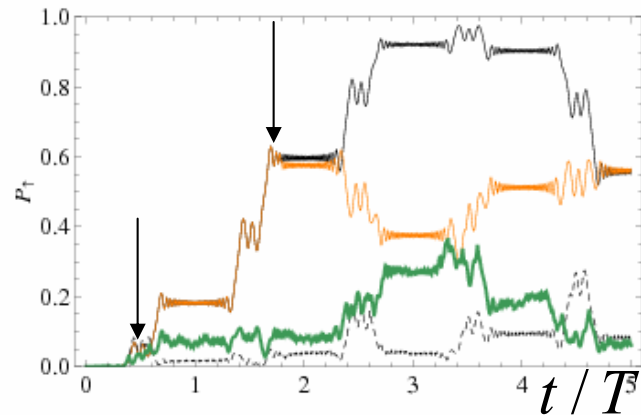
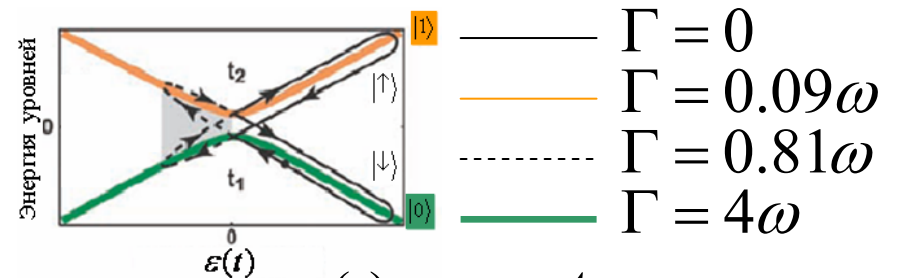


$$A = 25.1\omega$$

$$A \ll \varepsilon_0$$

Кубит приготовлен в состоянии $|0\rangle$
J. You, et.al, Phys. Rev. Lett. 100, 047001(2008)

$$|0\rangle = -\sin \theta / 2 |\uparrow\rangle + \cos \theta / 2 |\downarrow\rangle$$



$$A = 43.3\omega$$

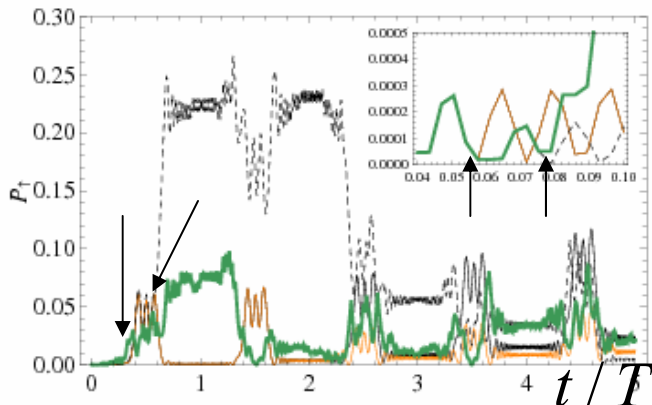
$$\Delta_{30}(43.3\omega) \approx 0.14\omega$$

Rabi+LZ

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A \cos \omega t$$

$$T_1 = \frac{1}{\pi} \arccos \varepsilon_0 / A$$

$$T_2 = \frac{1}{\pi} (1 - \arccos \varepsilon_0 / A)$$



$$A = 45.5\omega$$

$$\Delta_{30} \approx 0 \quad \text{КПТ}$$

$$P_{LZ} \approx 0.1$$

Даже при сильном управляющем поле влияние шума существенно

С увеличением Γ динамика существенно меняется. Кубит может возбуждаться на верхний уровень. Нет пленения населенностей на временах $\sim T/2$ (между пересечениями уровней)

3JJ qubit: усредненная динамика

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A \cos(\omega t) + \delta\varepsilon(t)$$

Влияние резервуара -
классические флуктуации магнитного потока
(белый шум)

$$W = \frac{\Delta^2}{2} \sum_n \frac{\Gamma J_n^2(A/\omega)}{(\varepsilon_0 - \omega n)^2 + \Gamma^2}$$

Средняя скорость переходов $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$
в рамках теории возмущений, когда $W \ll \Gamma$
(средняя по реализациям)

D. M. Berns et al. PRL 97, 150502 (2006)

$$\langle \sigma_z(t) \rangle = \langle \sigma_z^{stat} \rangle + (\langle \sigma_z^0 \rangle - \langle \sigma_z^{stat} \rangle) e^{-\tilde{\Gamma}t} \quad \text{Согласно подходу скоростных уравнений}$$

$$\langle \sigma_z^{stat} \rangle = \frac{\gamma}{2W + \gamma} \quad \tilde{\Gamma} = 2W + \gamma$$

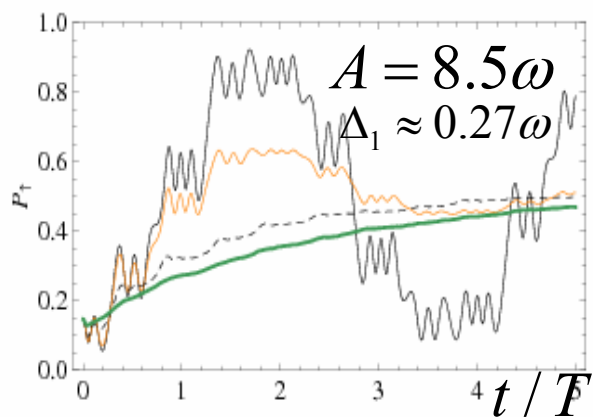
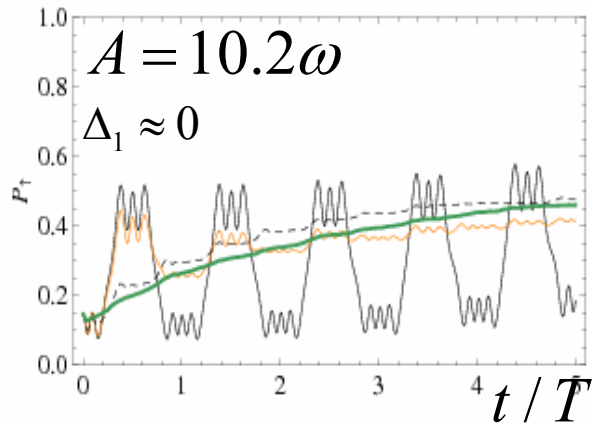
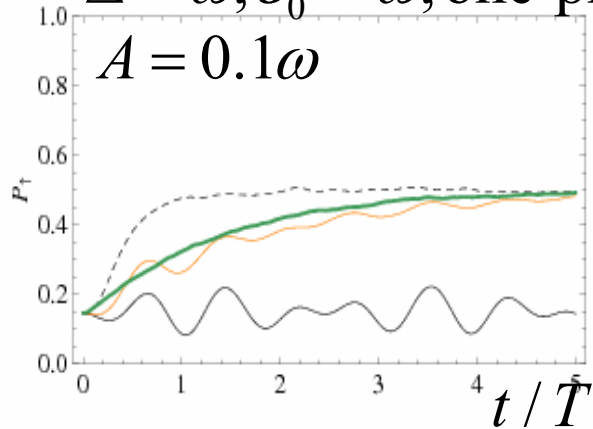
В случае сильного внешнего воздействия $W \gg \gamma \rightarrow \langle \sigma_z^{stat} \rangle \approx 0, t_{stat}^{-1} = \tilde{\Gamma}$

$\gamma = 0 \rightarrow \langle \sigma_z^{stat} \rangle = 0, t_{stat}^{-1} = 2W$

$W = 0 \rightarrow \langle \sigma_z^{stat} \rangle \approx 1$ (кубит на нижнем уровне)

3JJ qubit: усредненная динамика

$\Delta = \omega, \varepsilon_0 = \omega$, one-photon resonance



После усреднения по 3000 реализация метода МК (что соответствует условиям эксперимента) наблюдается классическая Раби - динамика

Видно отличие релаксационной динамики в одной реализации – стохастическое случайное движение от усредненной динамики, когда наблюдается насыщение

и выход населенности на стационарное значение
A. Gelman, A.M. Satanin, JETP lett. 91, 535-540 (2010)

Совпадение с моделью и экспериментом:

D. M. Berns et al. PRL 97, 150502 (2006)

КПТ

(динамическая локализация)

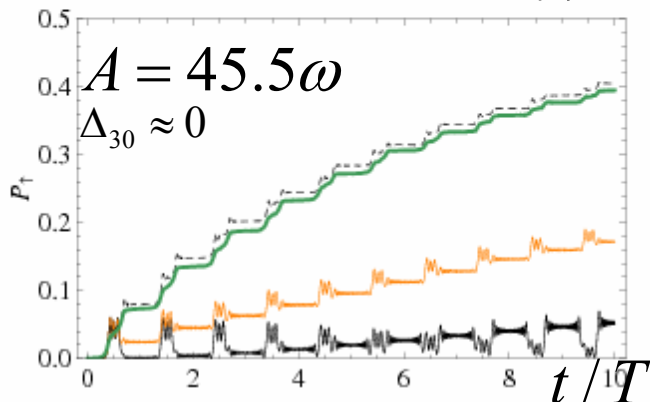
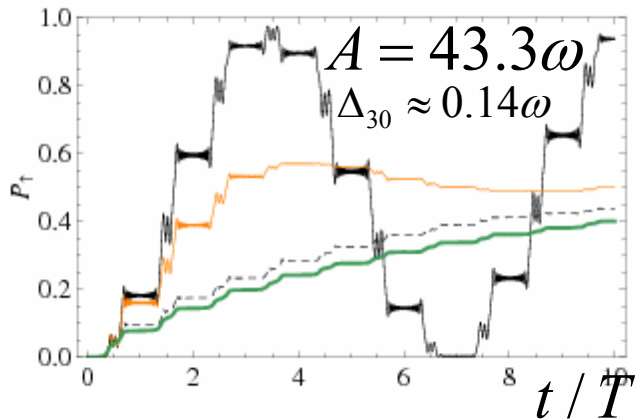
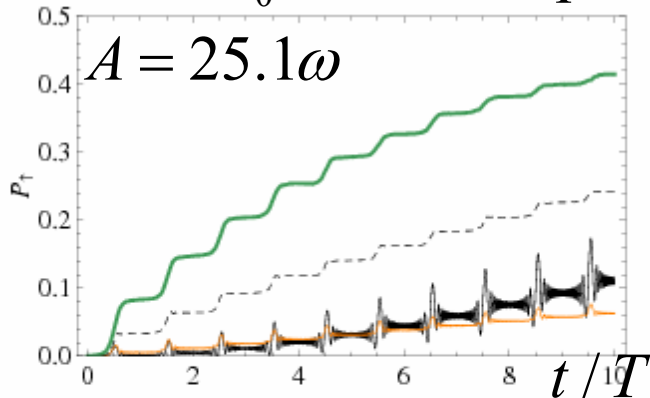
$$W = \frac{\Delta^2}{2} \sum_n \frac{\Gamma J_n^2(A/\omega)}{(\varepsilon_0 - \omega n)^2 + \Gamma^2} \quad t_{stat}^{-1} = 2W$$

— $\Gamma = 0$ — $\Gamma = 0.09\omega$

..... $\Gamma = 0.81\omega$ — $\Gamma = 4\omega$

3JJ qubit: усредненная динамика

$\Delta = \omega, \varepsilon_0 = 30\omega, 30\text{-photon resonance, strong control field: } \varepsilon_0, A \gg \omega$



После усреднения по 3000 реализация метода МК (что соответствует условиям эксперимента) наблюдается классическая Раби - динамика

Видно отличие релаксационной динамики в одной реализации – стохастическое случайное движение от усредненной динамики, когда наблюдается насыщение

и выход населенности на стационарное значение
A. Gelman, A.M. Satanin, *JETP lett.* 91, 535-540 (2010)

$$W = \frac{\Delta^2}{2} \sum_n \frac{\Gamma J_n^2(A/\omega)}{(\varepsilon_0 - \omega n)^2 + \Gamma^2} \quad t_{stat}^{-1} = 2W$$

PRL 97, 150502 (2006) D. M. Berns at.al.

Параметры кубита могут быть получены из анализа результатов эксперимента (частота Раби, ширина резонанса, населенности уровней)

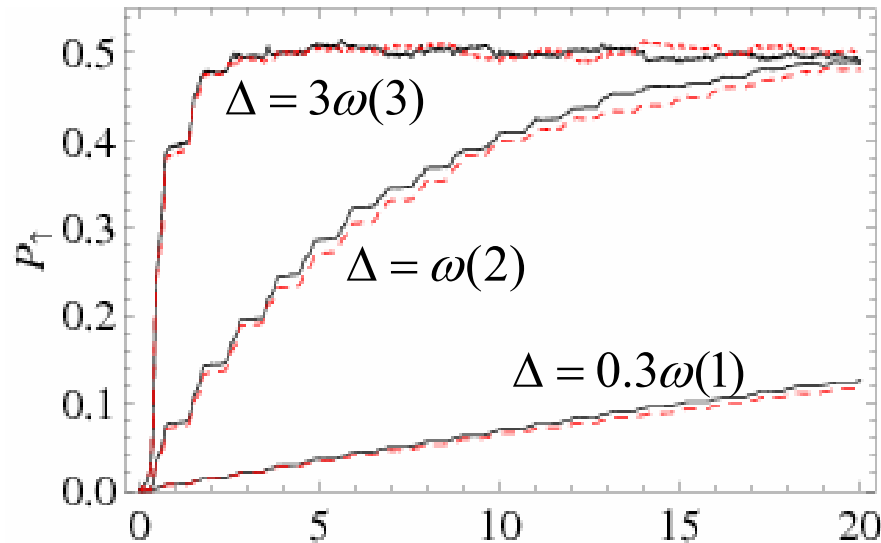
Even for CDT regime

- $\Gamma = 0$
- $\Gamma = 0.09\omega$
- $\Gamma = 0.81\omega$
- $\Gamma = 4\omega$

3JJ qubit: усредненная динамика

При большом шуме $\Gamma = 4\omega$
 эффекты когерентности (КПТ) исчезают

Затухание поляризации на времена Γ^{-1}
 независимо от параметров поля



$\varepsilon_0 = 30\omega$

----- $A = 45.5\omega$ (CDT)
 _____ $A = 43.3\omega$ (Rabi)

Перекрытие резонансов

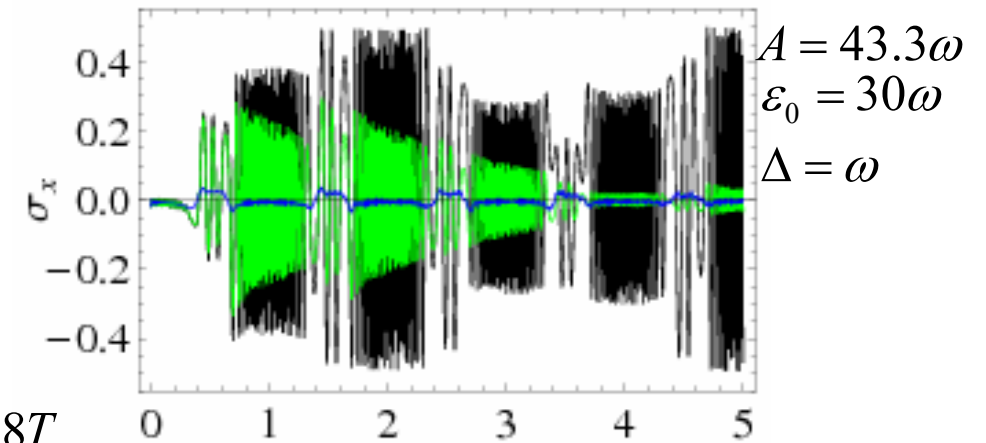
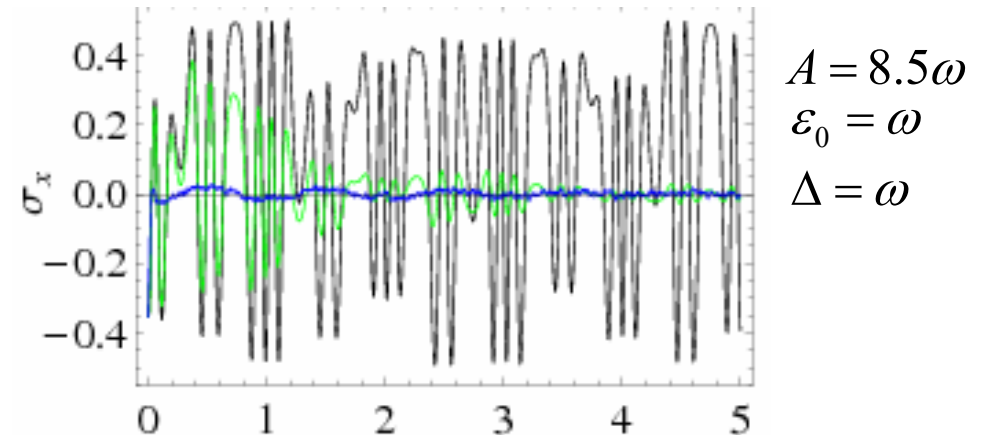
$$W = \frac{\Delta^2}{2} \sum_n \frac{\Gamma J_n^2(A/\omega)}{(\varepsilon_0 - \omega n)^2 + \Gamma^2}$$

$\Delta = \omega$

$$\tilde{\Gamma}^{-1}(30, 45.5) = 5.98T$$

$$\tilde{\Gamma}^{-1}(30, 43.3) = 5.48T$$

Kayanuma, Y. Phys. Rev B., 47, 9940 (1992)



_____ $\Gamma = 0$
 _____ $\Gamma = 0.09\omega$
 _____ $\Gamma = 4\omega$

Приложение к амплитудной спектроскопии

$$P_{\uparrow}(A, \varepsilon_0) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Delta_n^2}{\Delta_n^2 + (\varepsilon_0 - n\omega)^2} \quad W = \frac{\Delta^2}{2} \sum_n \frac{\Gamma J_n^2(A/\omega)}{(\varepsilon_0 - \omega n)^2 + \Gamma^2}$$

$$\Delta_n = \Delta J_n(A/\omega)$$

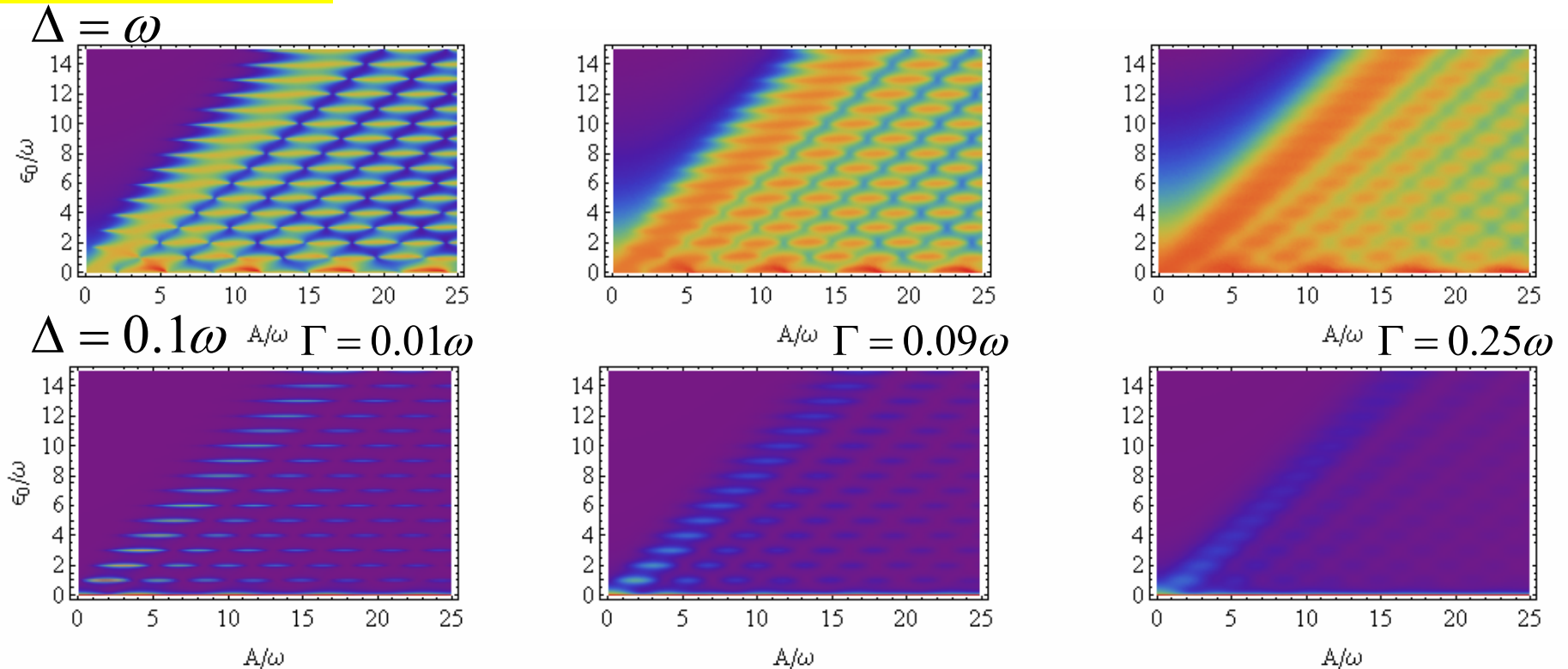
$$\delta\varepsilon = \Delta_n$$

$$\delta\varepsilon \approx \Gamma$$

Населенность верхнего уровня кубита после воздействия импульса длительностью $t=100$ постоянной амплитуды A при различных значениях шума (*D.Berns et.al., PRL 97, 150502 (2006)*)

N=3000 realizations

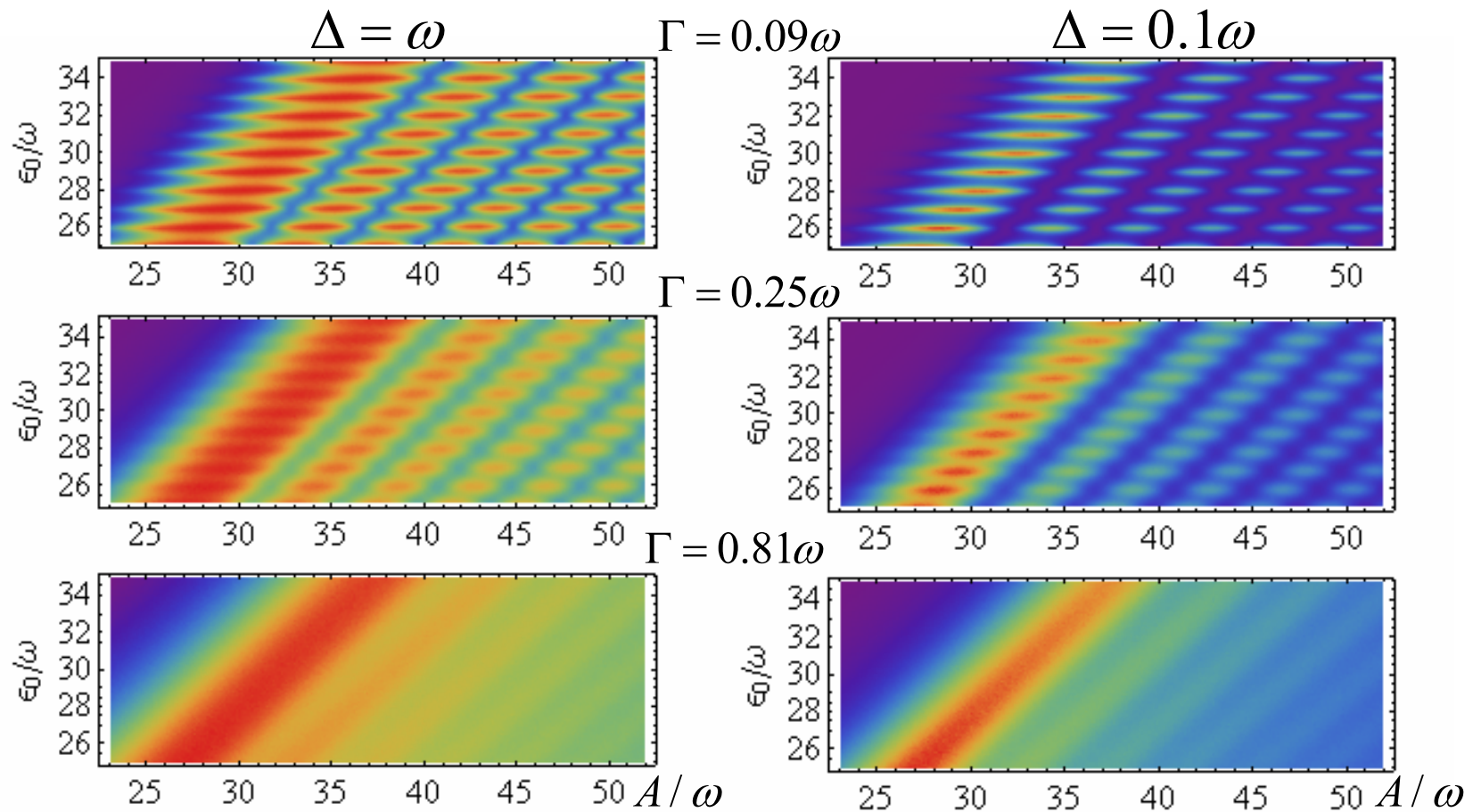
$$\Delta = 0.14\omega, A = 0 \div 50\omega, \varepsilon_0 = 0 \div 45\omega, \omega = 90\text{MHz} \Rightarrow \Gamma = (0.13 - 0.2)\omega$$



Приложение к амплитудной спектроскопии

Более контрастная картина наблюдается для резонансов высокого порядка.
Хорошее совпадение с экспериментом (*D.Berns et.al., PRL 97, 150502 (2006)*)

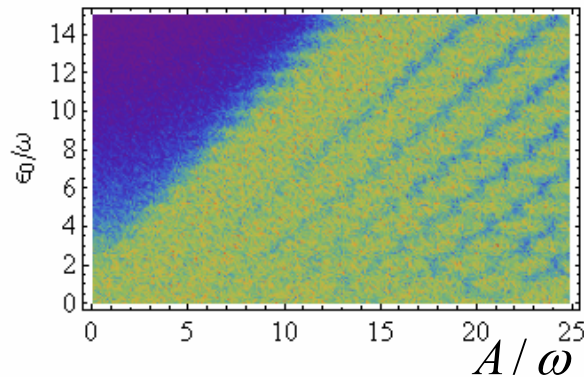
$$\Delta = 0.14\omega, A = 0 \div 50\omega, \varepsilon_0 = 0 \div 45\omega, \omega = 90\text{MHz} \Rightarrow \Gamma = (0.13 - 0.2)\omega$$



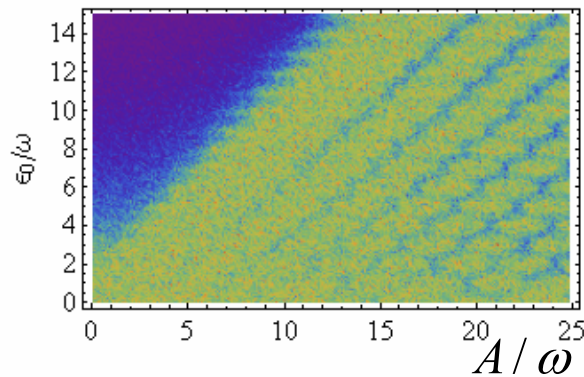
Подгонка параметров шума при прямом численном моделировании под результаты эксперимента позволит восстановить параметры образца с хорошей точностью

Приложение к амплитудной спектроскопии: измерение состояния кубита

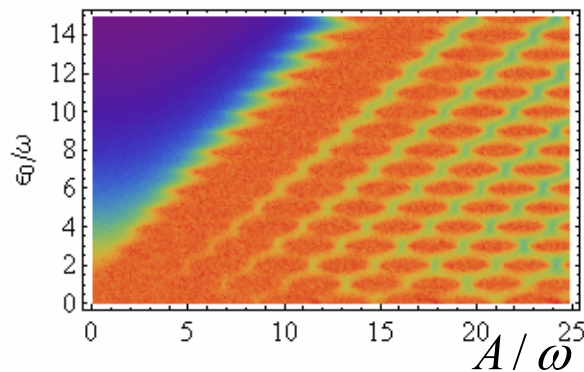
$$\Delta = \omega \quad \Gamma = 0.09\omega$$



$N = 10$ Зависимость интерференционной карты от числа реализаций метода (числа измерений в эксперименте).
Расчет без усреднения по времени.



$N = 100$



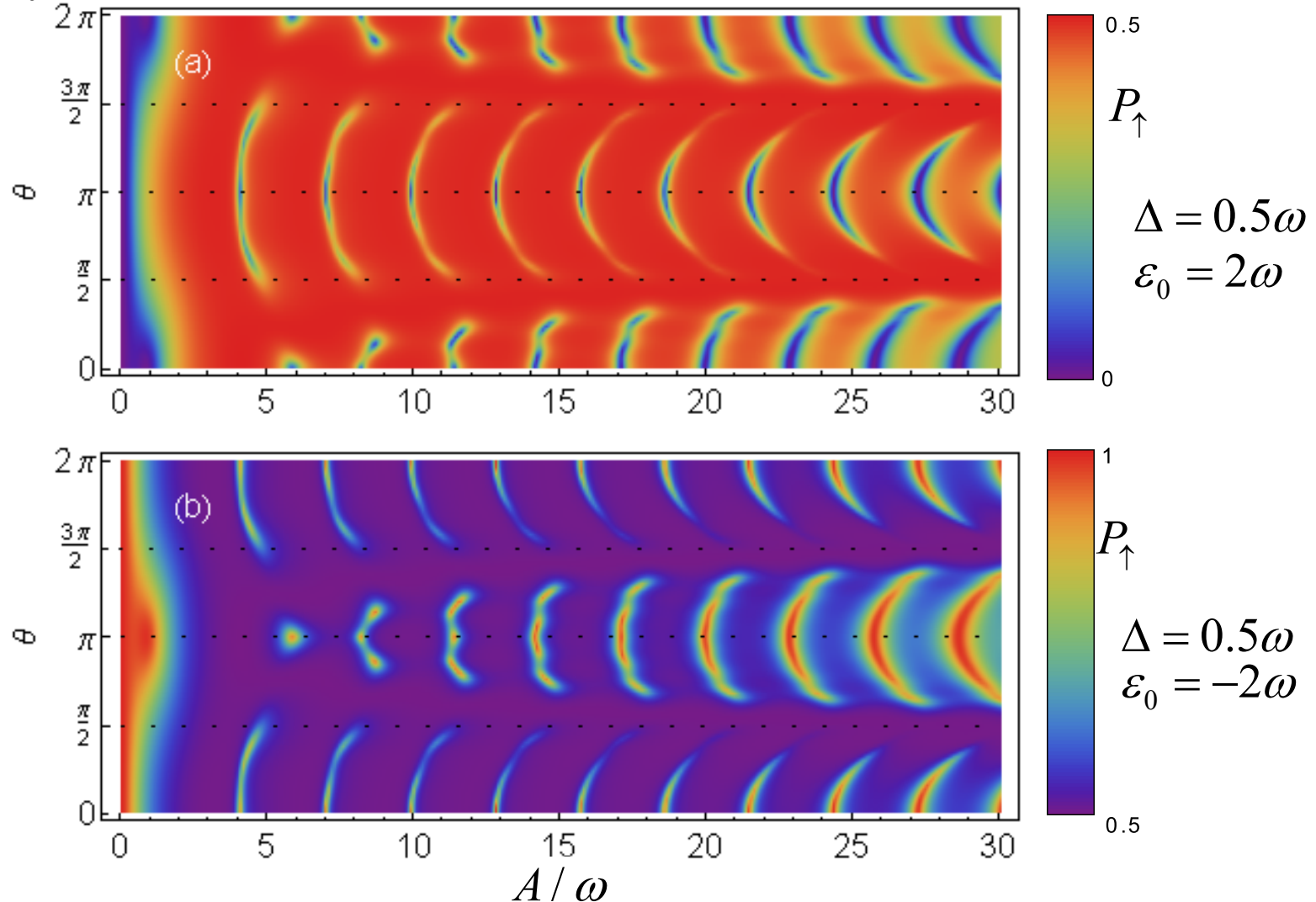
$N = 500$

In good correspondence with $N=3000$ in previous consideration and experiments. In experiments usually $N=3000-10000$.

A. I. Gelman, A.M. Satanin, JETP lett. 91, 535-540 (2010).

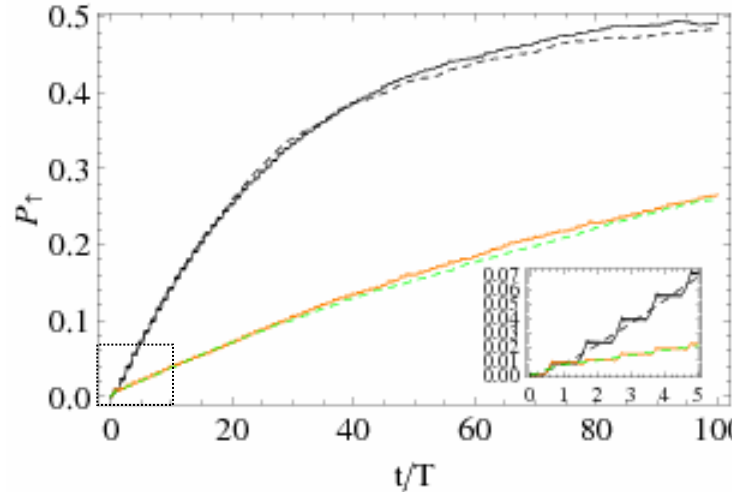
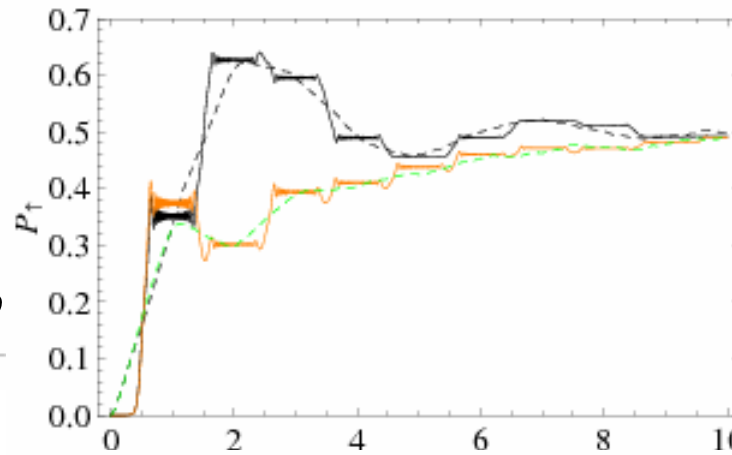
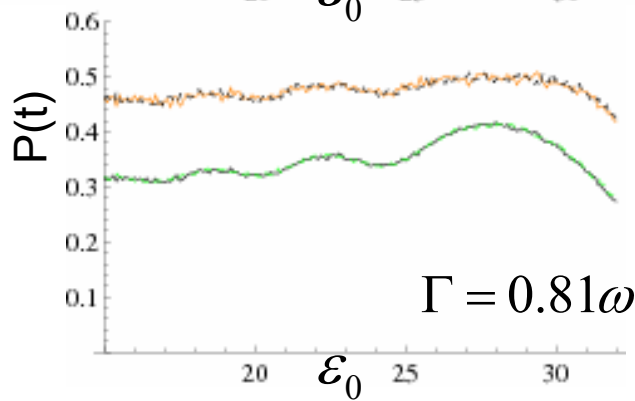
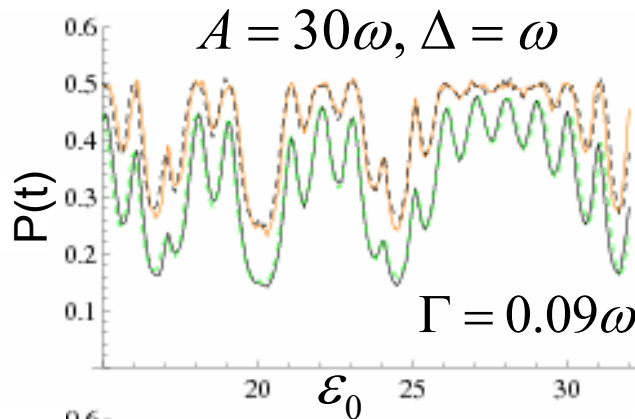
Приложение к амплитудной спектроскопии: фазовый контроль населенности

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A(\cos \omega t + \mu \cos(2\omega t + \theta)) \quad \mu = 1/2$$

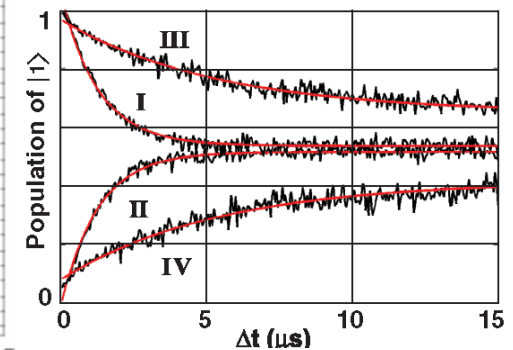


M. V. Denisenko, A. I. Gelman, A. M. Satanin (in preparation).

Зависимость интерференционной картины от флуктуации начальной фазы импульса



D. M. Berns, et.al. Phys. Rev. Lett. 97, 150502 (2006).



$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A \cos(\omega t + \varphi_0)$$

$\varphi_0 \in [0, 2\pi]$ Равномерное распределение, в каждой реализации - случайное

В условиях шума при усреднении по 2000 реализаций населенность по окончании импульса не зависит от начальной фазы импульса. Усреднение по мелкомасштабным осцилляциям Ландау-Глобальная динамика (насыщение и выход населенности на стационарное значение) сохраняе

Численные расчёты динамики кубитов

Симметричные кубиты

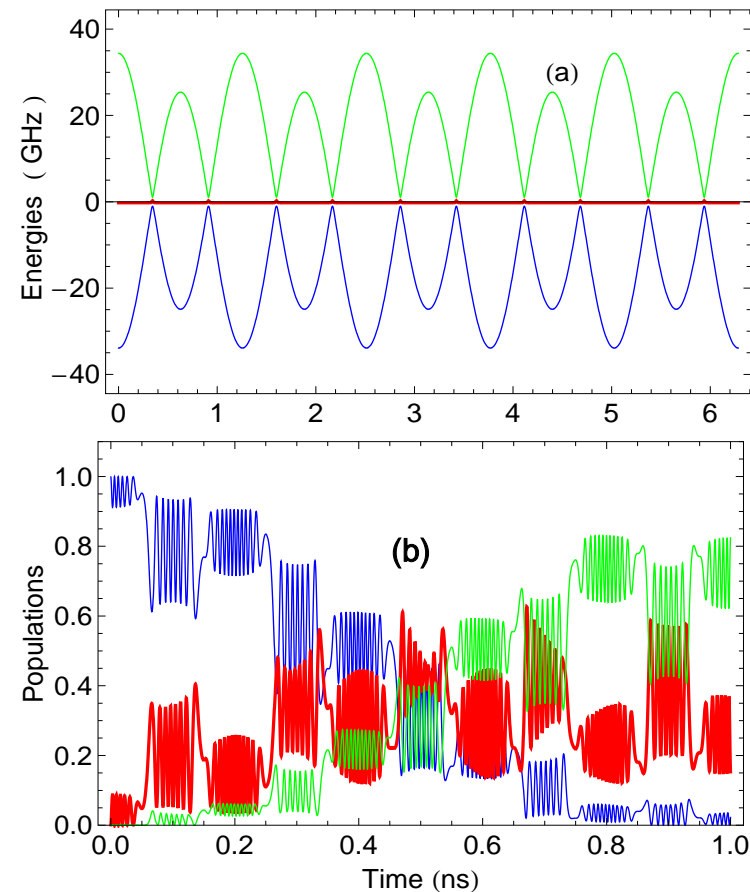
$$|\Psi(t + dt)\rangle = \left(\frac{I - iH(t + \frac{dt}{2}) \frac{dt}{2}}{I + iH(t + \frac{dt}{2}) \frac{dt}{2}} \right) |\Psi(t)\rangle + O((Hdt)^3)$$

Схема Кэли

Параметры кубитов:

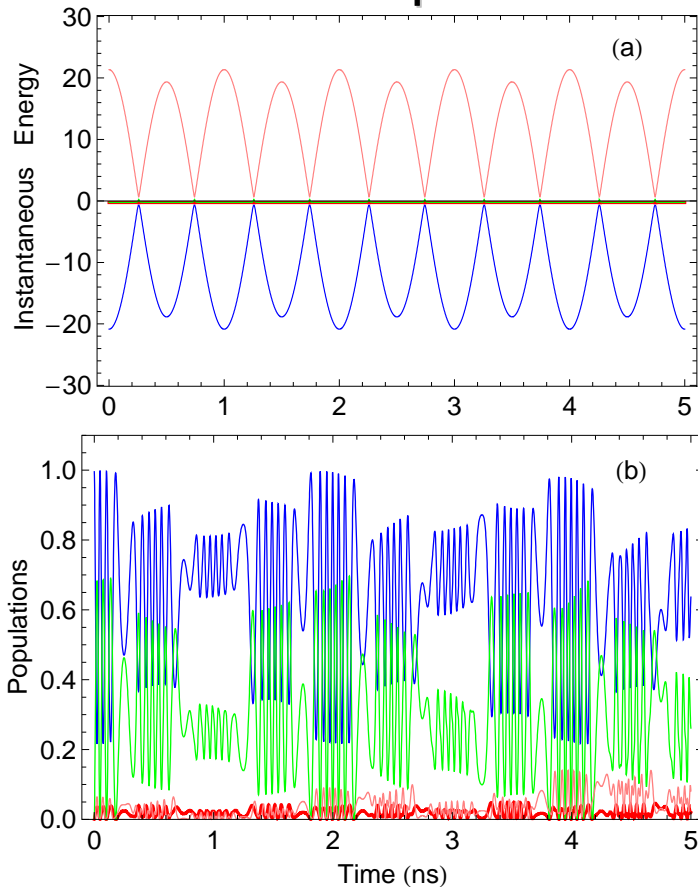
$$A = 21.21 \omega$$

$$J = 2 \text{ GHz},$$



Динамика несимметричных кубитов

Несимметричные



Параметры кубитов:

$$J = 2 \text{ GHz}, \omega = 1 \text{ GHz}, A_1 = A_2 = 8.65 \omega$$

РЕЗУЛЬТАТЫ:

- 1) Амплитуды испытывает быстрые осцилляции вокруг среднего значения, испытывая резкие перебросы между состояниями *нелинейного резонанса* в те моменты времени, когда зоны максимально сближаются;
- 2) Заселение уровней также осциллирует на высокой амплитуде около некоторых средних значений, и происходят перебросы, согласно теории Ландау-Зинера.
- 3) «скачки» вероятностей заселенности уровней происходят, когда щель минимальна, в интервалах между скачками населенности уровней осциллируют медленно.

Квазиэнергия и вероятности заселенностей уровней в сильном поле

Гамильтониан системы: $H(t) = H(t + T)$

Флоке - базис: $|\Psi_k(t)\rangle = |\Phi_k(t)\rangle e^{-i\varepsilon_k t}$, $|\Phi_k(t+T)\rangle = |\Phi_k(t)\rangle$

ε_k - квазиэнергия

Уравнения для квазиэнергии и Квазиэнергетических функций:

$$U(T) |\Phi_k(0)\rangle = e^{-i\varepsilon_k T} |\Phi_k(0)\rangle,$$

⇒ нашли ε_k и $|\Phi_k(0)\rangle$

$$U(T) = P \exp\left(-i \int_0^T H(t) dt\right)$$

Эволюция системы: $(H(t) - i \frac{\partial}{\partial t}) |\Phi_k(t)\rangle = \varepsilon_k |\Phi_k(t)\rangle$

⇒ находим $|\Phi_k(t)\rangle$

S.H. Autler, C.H. Townes, Phys. Rev. **100**, 703 (1955).

Зельдович, ЖЭТФ (1965), Ритус, ЖЭТФ (1965).

Вероятности переходов в сильном поле

Пусть система в $t=0$ находилась в состоянии $|\alpha\rangle$

Возбужденное состояние $|\beta\rangle$

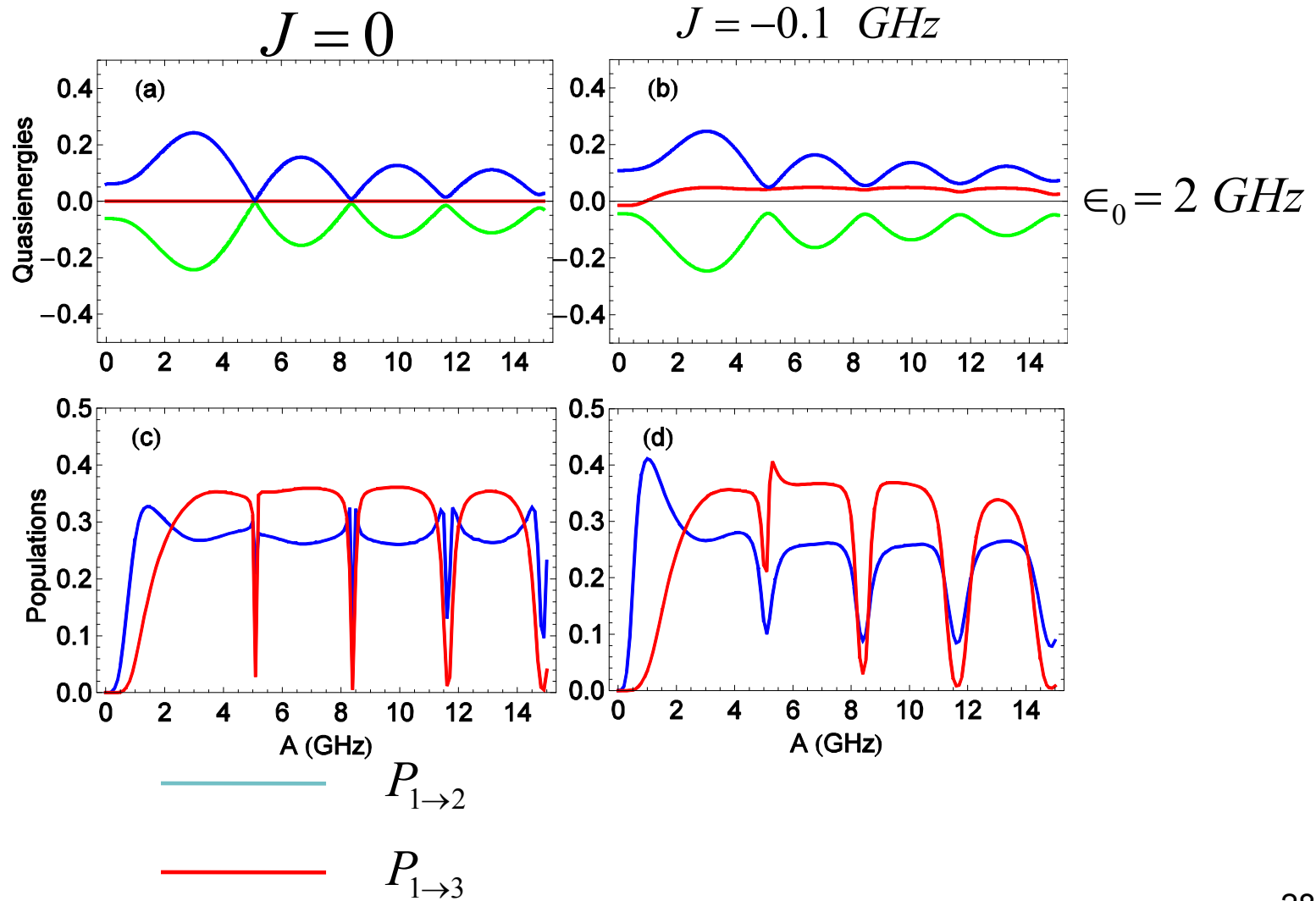
Вероятность перехода $P_{\alpha \rightarrow \beta}(t) = \sum_k |\langle \beta | \Phi_k(t) \rangle|^2 |\langle \Phi_k(0) | \alpha \rangle|^2$

В силу периодичности вероятности разложим по гармоникам:

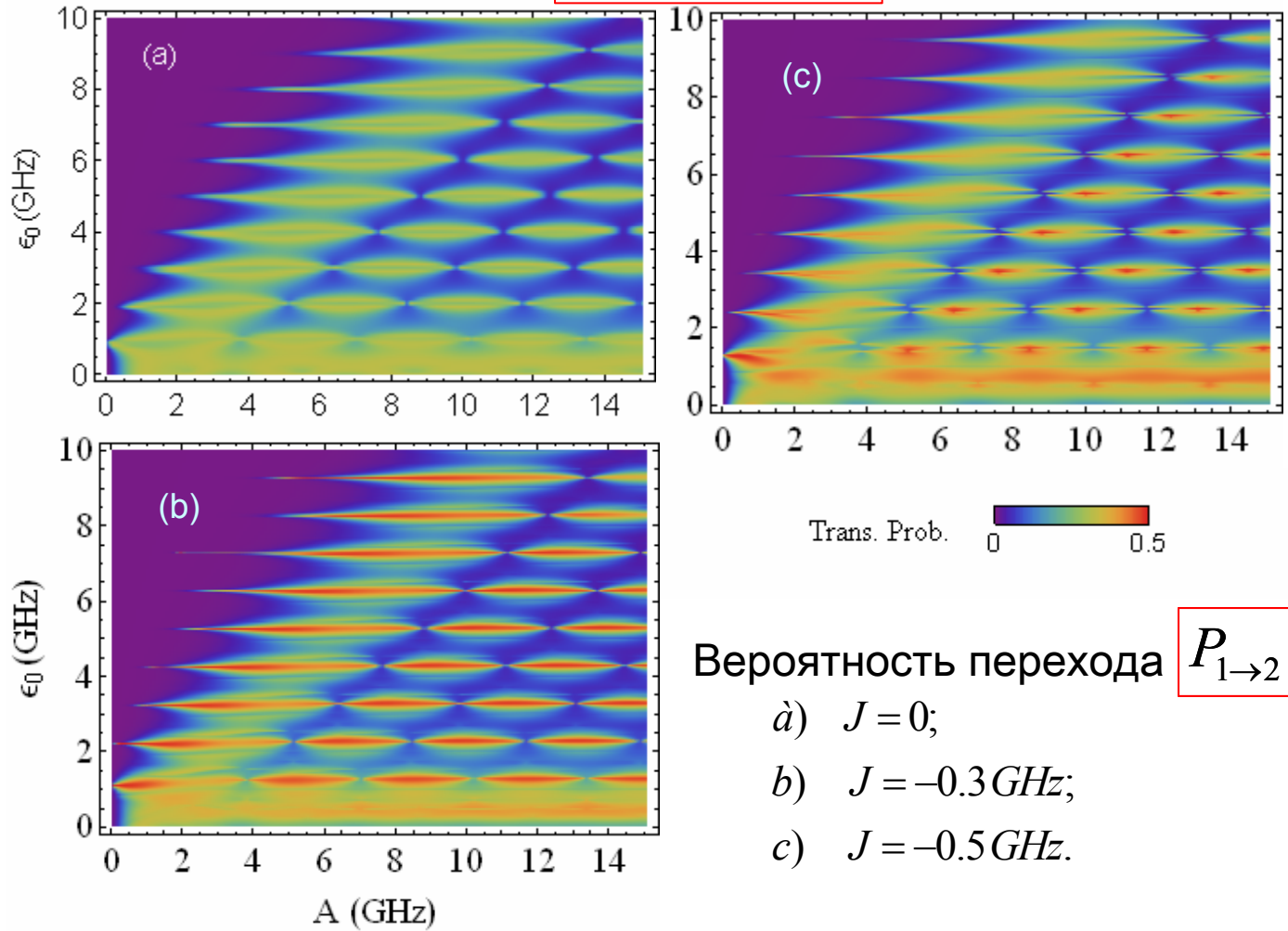
$$\bar{P}_{\alpha \rightarrow \beta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_{\alpha \rightarrow \beta}^{(n)}, \quad P_{\alpha \rightarrow \beta}^{(n)} = \sum_k |\langle \beta | \Phi_k^{(n)} \rangle \langle \Phi_k(0) | \alpha \rangle|^2,$$

$$|\Phi_k^{(n)}\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T e^{in\omega t} |\Phi_k(t)\rangle dt \quad |\Phi_k^{(n)}\rangle \text{ — Фурье - компонента квазиэнергетической функции.}$$

Расчёты: симметричные кубиты



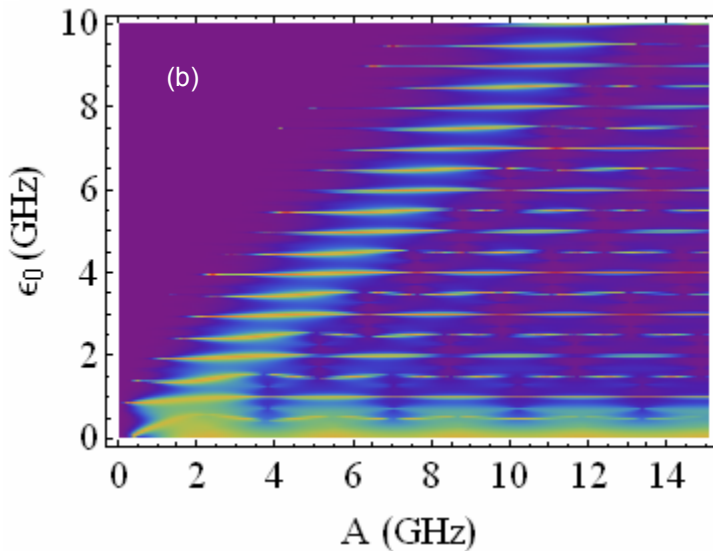
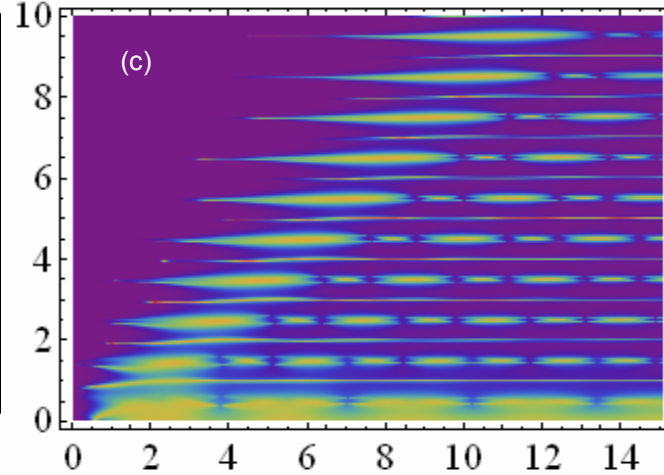
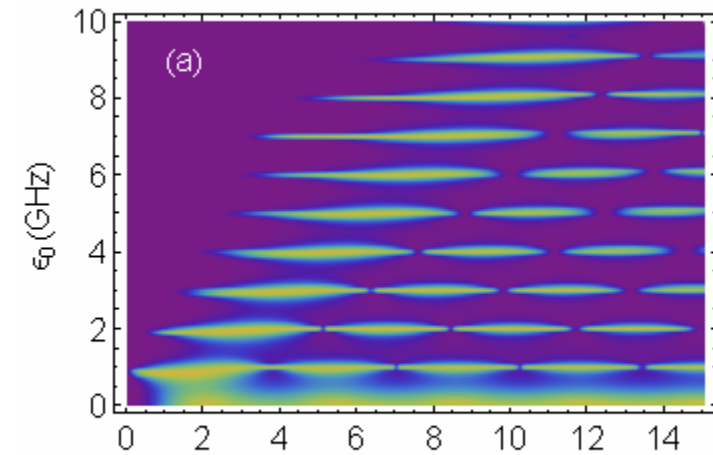
$$P_{1 \rightarrow 2}$$



Вероятность перехода $P_{1 \rightarrow 2}$ при $\Delta = 0.5 \text{ GHz}$

- a) $J = 0$;
- b) $J = -0.3 \text{ GHz}$;
- c) $J = -0.5 \text{ GHz}$.

$$P_{1 \rightarrow 3}$$



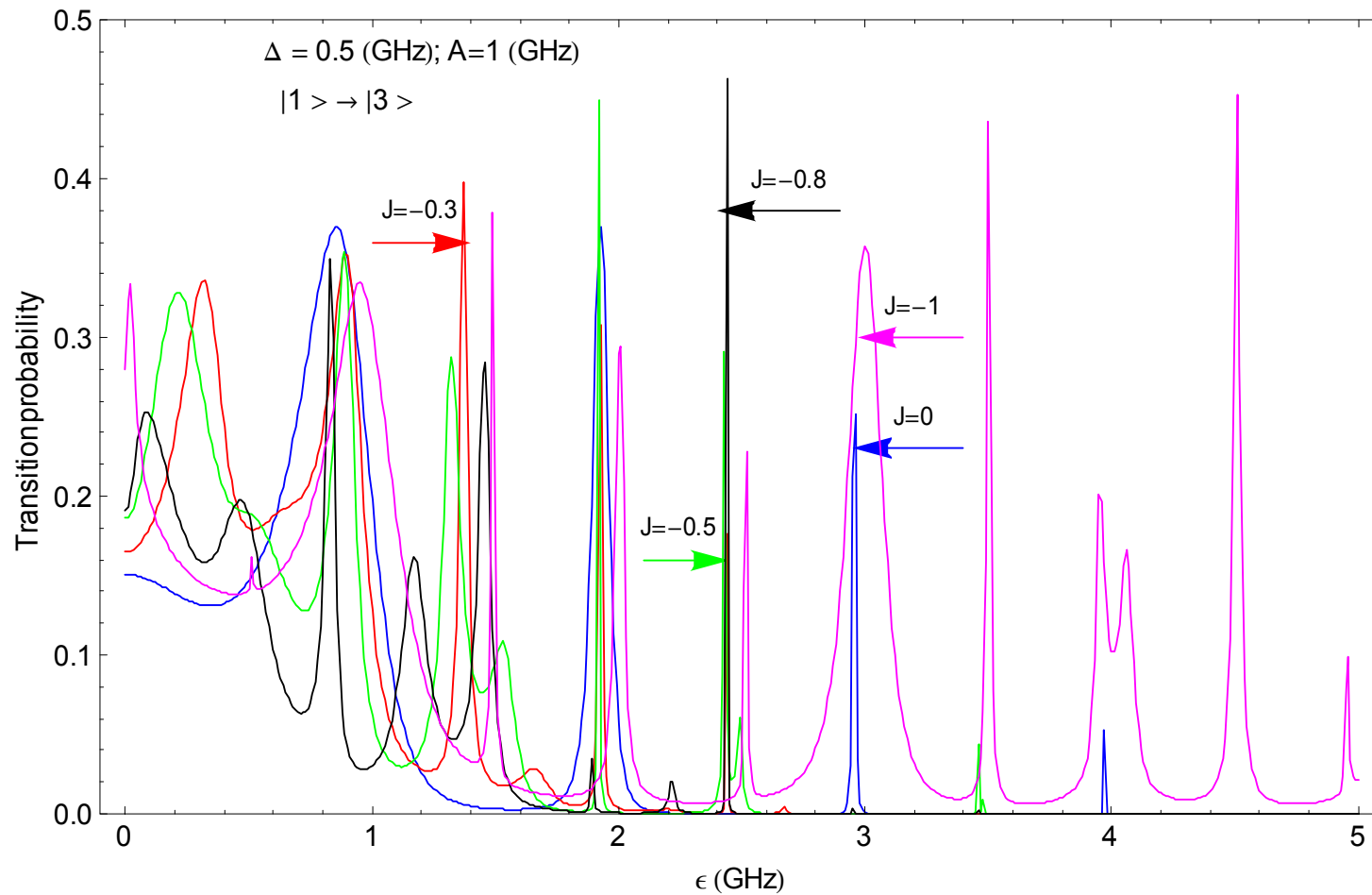
Вероятность перехода $P_{1 \rightarrow 3}$ при $\Delta = 0.5 \text{ GHz}$

a) $J = 0$; b) $J = -0.3 \text{ GHz}$; c) $J = -0.5 \text{ GHz}$.

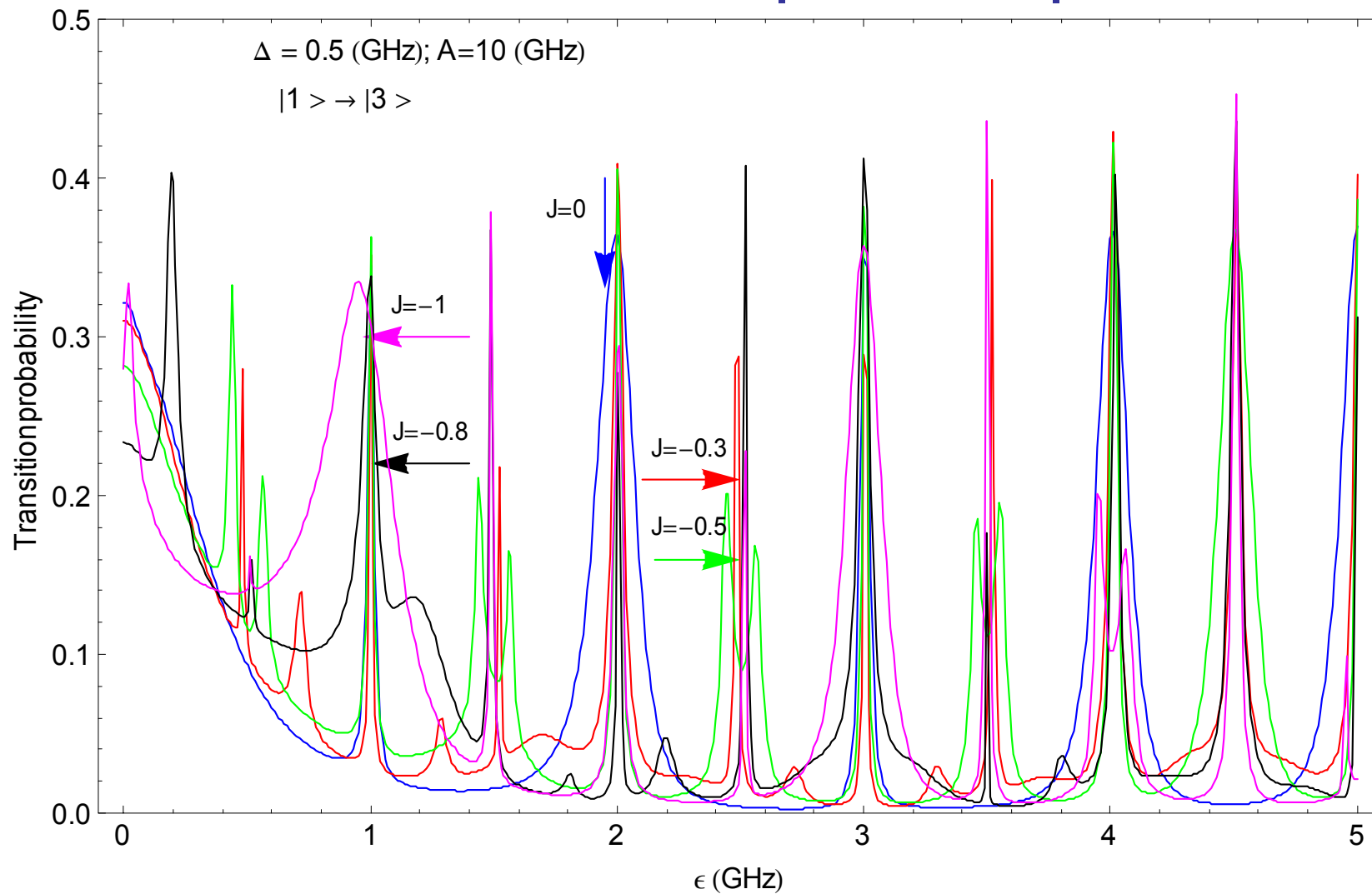
Для симметричных кубитов вероятности переходов сильно возрастают при
 2) Включение взаимодействия приводит к возникновению дополнительных пиков, положение которых определяется параметром взаимодействия.

$$\epsilon_0 \pm J + n\omega \approx 0$$

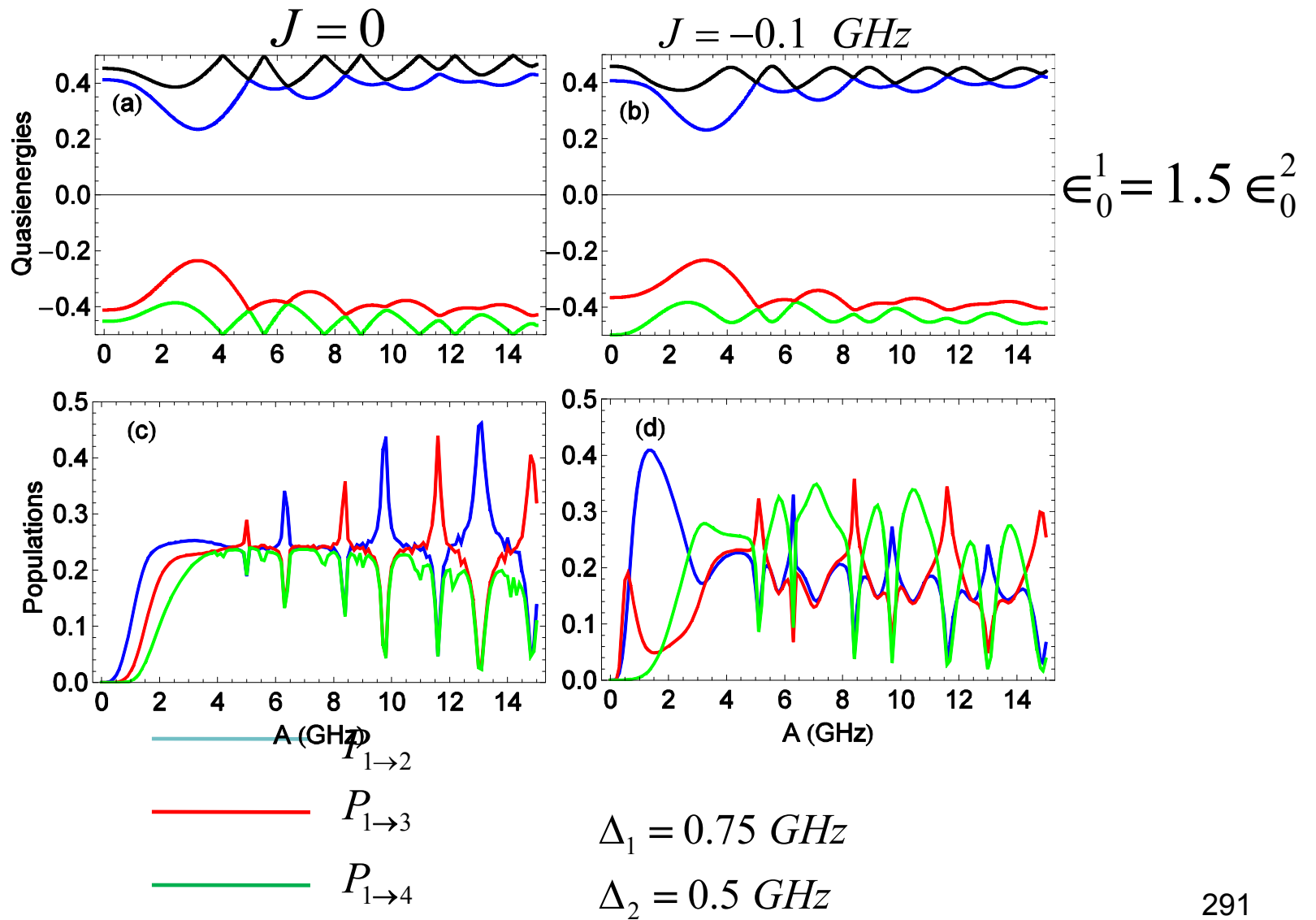
Многофотонные резонансы: $A = 1 \text{ GHz}$, $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$



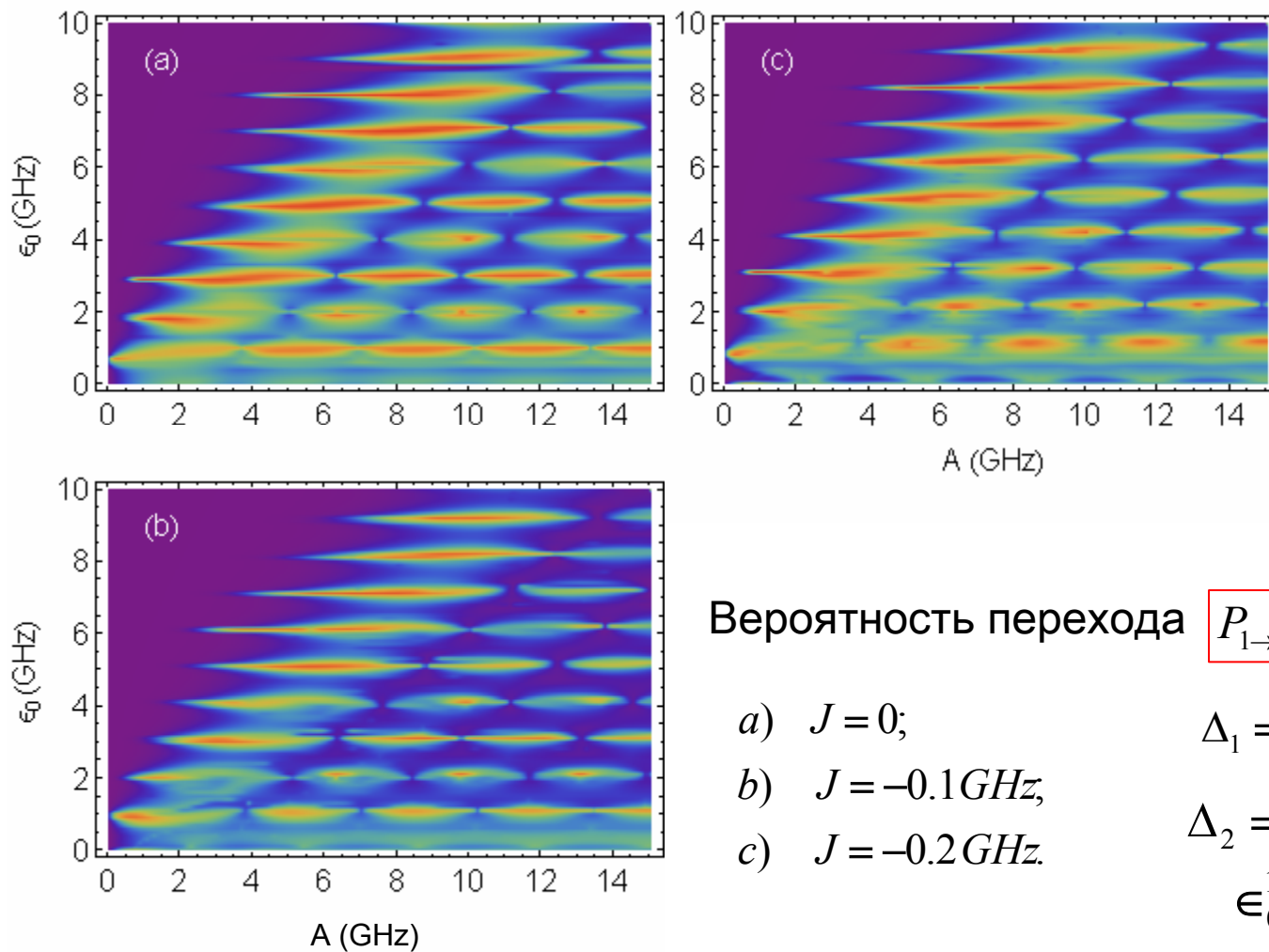
Многофотонные резонансы: $A = 10$ GHz, $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$



Расчёты: несимметричные кубиты



Интерференционная картина

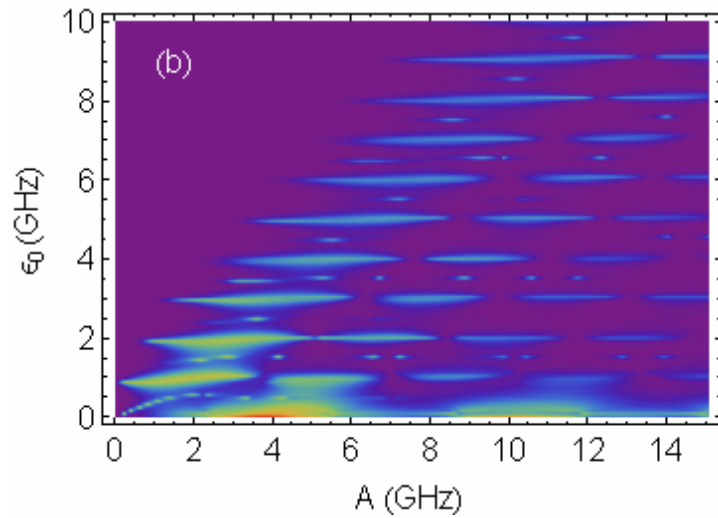
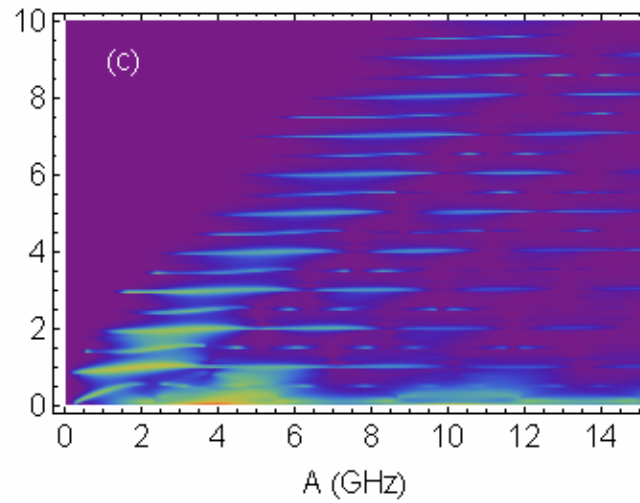
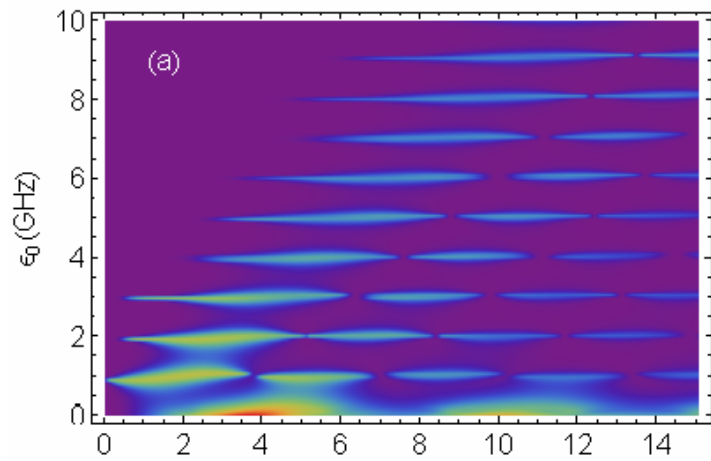


$$P_{1 \rightarrow 2}$$

Вероятность перехода $P_{1 \rightarrow 2}$ при

- a) $J = 0;$ $\Delta_1 = 0.75 \text{ GHz}$
- b) $J = -0.1 \text{ GHz};$ $\Delta_2 = 0.5 \text{ GHz}$
- c) $J = -0.2 \text{ GHz}.$ $\epsilon_0^1 = 1.5 \epsilon_0^2$

$$P_{1 \rightarrow 3}$$



Вероятность перехода

$$P_{1 \rightarrow 3}$$

a) $J=0$; b) $J=-0.1\text{GHz}$; c) $J=-0.2\text{GHz}$.

Лекция 4. Основные результаты

1. Дана интерпретация переходам ЛЗ в условиях шума и методу АС на примере сверхпроводящих кубитов с точки зрения единичных реализаций, а также установлена связь с усредненной динамикой системы, наблюдающейся в экспериментах [22–25]. Прослежен переход от результатов единичного эксперимента к усредненной зависимости населенностей кубита от времени, которая может быть получена в экспериментах путем многократного повторения опыта.

2. Рассмотрено влияние различного уровня шума на населенности кубитов и зависимость резкости интерференционной картины метода АС от числа измерений состояния кубитов. Показана возможность контрастного формирования интерференционной картины уже при 500 реализациях, что может быть существенным при проведении реального эксперимента.

3. Из первых принципов промоделирован реальный процесс измерения кубита, включая в рассмотрение классический шум, вызванный флуктуациями начальной фазы возбуждающего импульса в методе АС. Показано что такой шум не влияет на усредненную по реализациям интерференционную картину.

1.А. И. Гельман, А. М. Сатанин Релаксационная динамика сверхпроводящих джозефсоновских кубитов в сильном переменном поле // ФТТ. 2010. Т. 52. С. 2094-2099.

2.А. И. Гельман, А. М. Сатанин Квантовые скачки при переходах Ландау-Зинера в диссипативной динамике сверхпроводящего кубита // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 91. С. 584.

3.А. И. Гельман, А. М. Сатанин Квантовые скачки при спонтанной релаксации сверхпроводящего кубита под действием сильного ВЧ поля // Вестник ННГУ.2010.(принято)

4.А. И. Гельман, М.В. Денисенко, А. М. Сатанин Динамический контроль квантовых состояний джозефсоновских кубитов //Вестник ННГУ.2010. (принято)

Описание программного комплекса параллельных вычислений

Программа представляет из себя консольное приложение, принимающая параметры из файла, производящая вычисление корреляционной функции с использованием метода Монте-Карло на основе метода MCWF и вывод результатов в файл. Программа рассчитана на исполнение на кластере с использованием матриц произвольных размеров.

Для реализации проекта выбрана среда Microsoft Visual Studio 2007, с использованием библиотеки Boost, а именно возможности по работе с матрицами и векторами UBLAS. **Boost** — собрание библиотек, расширяющих [C++](#). Свободно распространяются по лицензии [Boost Software License](#) вместе с исходным кодом, [часть библиотек](#) являются кандидатами на включение в следующий стандарт [C++](#). **Boost** имеет заметную направленность на исследования и расширяемость ([метапрограммирование](#) и [обобщённое программирование](#) с активным использованием [шаблонов](#)).

Благодаря тщательному подбору и контролю качества, библиотеки, включённые в Boost, обладают высокой надёжностью и производительностью. Библиотека платформенно независима, компилируется как в Windows, так и в Linux, что является принципиальным для нас. Boost включает библиотеку [линейной алгебры uBLAS](#), с операциями для [векторов](#) и [матриц](#). В базовый стандарт включены многие операции, такие как умножение матриц, эрмитовое сопряжение, норма вектора и другие, часто встречающиеся в решаемых нашим численным кодом задачах. Это повышает читаемость кода. При этом данные операции уже оптимизированы, код хорошо компилируется современными компиляторами, что дает возможность в будущем сосредоточиться на самом алгоритме и его эффективности, а не на тонкостях реализации базовых операций. Из недостатков можно отметить необходимость скачать саму библиотеку, а также необходимость знать основные функции библиотеки. Однако так как библиотека свободно распространяется, основные функции интуитивно понятны, документация есть, это не представляет особого труда. Таким образом, применение библиотеки BOOST (uBLAS) можно считать оправданным. Повысилась читаемость кода.

Для расчета волновой функции используется метод Монте-Карло, реализованный в классе CMonteCarlo.

Данный класс является главным управляющим классом, который читает начальные условия из файла и производит расчет.

Кроме конструктора, который на вход принимает имя файла, в который будет производиться вывод конечных результатов и опционального файла вывода лога, в классе реализован следующий набор методов: `CalcStochsGamma` – метод, который для гаммы (гамма задается начальными условиями и содержится в векторе `CMonteCarlo::m_vecGamma`) покомпонентно рассчитывает среднее значение вектора Ψ , который получается в результате работы метода Рунге-Кутты (об этом позже). Расчет вектора Ψ для конкретного значения гаммы производится в методе `CalcStochs`. `CalcCorrelGamma` – метод, подсчитывающий корреляционные функции для каждого значения гаммы. В методе происходит вызов `CalcCorrel`, которая служит непосредственно для расчета корреляционной функции.

`CalcStochs` – метод, предназначенный для расчета вектора, состоящего из набора значений Ψ в каждый дискретный момент времени. Для этого используется класс, реализующий метод Рунге-Кутты 2го порядка (`CRunge_Kutta_Sim`). Важной частью метода является реализация метода Монте-Карло, которая заключается в повторении одного и того же эксперимента `iNStochs` раз. Для каждого эксперимента данные аккумулируются в переменной и по окончании процесса усредняются. Таким образом, увеличивая `iNStochs`, можно добиться необходимой точности.

CalcCorrel – основной метод, позволяющий симулировать эксперимент для подсчета Two-Time Correlation Function. Метод рассчитывает корреляционную функцию как среднее от $iN2$ экспериментов. В каждом из них происходит следующее:

Вычисляется новое (для каждого эксперимента) состояние системы в начальный момент времени на основе значения волновой функции в момент времени t - рассчитываются четыре функции $K_{\text{си}}$ ($\text{vec}1-4$), после чего они нормализуются согласно рассчитанном коэффициентам $M_{\text{ю}}$ ($\text{strMu}1-4$).

Используя метод Рунге-Кутты, рассчитывается состояние системы ($K_{\text{си}}$) во все моменты времени.

На основе полученных состояний системы, вычисляются среднее компонентов корреляционной функции ($\text{vec}C1-4$) на основе $iN1$ экспериментов.

Вычисляется непосредственно корреляционная функция и аккумулируется в $m_vecCorrelationSum$.

Далее шаги a-d повторяются $iN2$ раз, после чего $m_vecCorrelationSum$ усредняется. Таким образом, мы получаем среднее значение корреляционной функции в каждый конкретный момент времени.

ReadConfig – метод для чтения начальных условий из конфигурационного файла. На вход принимает имя файла.

Также реализовано несколько служебных классов.

Класс Рунге-Кутта (CRunge_Kutta_Sim), реализует вычисление волновой функции по методу Рунге-Кутта второго порядка.

Основные методы:

В конструкторе передаются начальные условия iDimensions – размерность матриц, dTime – отрезок времени, dTimeStep – дискретность времени, log_buf – поток для логирования (опционально)

Методы установки остальных начальных параметров: AddMatrix – инициализация операторов A и B заданной размерности, SetGamma – инициализация значением гаммы, SetPsi0 – установка начального значения волновой функции, SetHamiltonian – установка Гамильтониана

Основной метод расчета волновой функции CalculatePsi. Реализована следующая логика расчета:

Вычисляем следующее значение волновой функции Psi на основе метода Рунге-Кутта

На основе полученного значения вычисляем Probs, которое будет использоваться для сравнения со случайным числом.

Генерируется случайное число и сравнивается с Probs. На основе этого сравнения принимается решение: если случайно число больше, то текущее значение Psi нормируется. В противном случае значение Psi рассчитывается заново, что соответствует новому состоянию системы. Шаги а-с повторяются для каждого дискретного момента времени. Таким образом получается вектор значений m_vecPsi волновой функции в каждый момент времени.

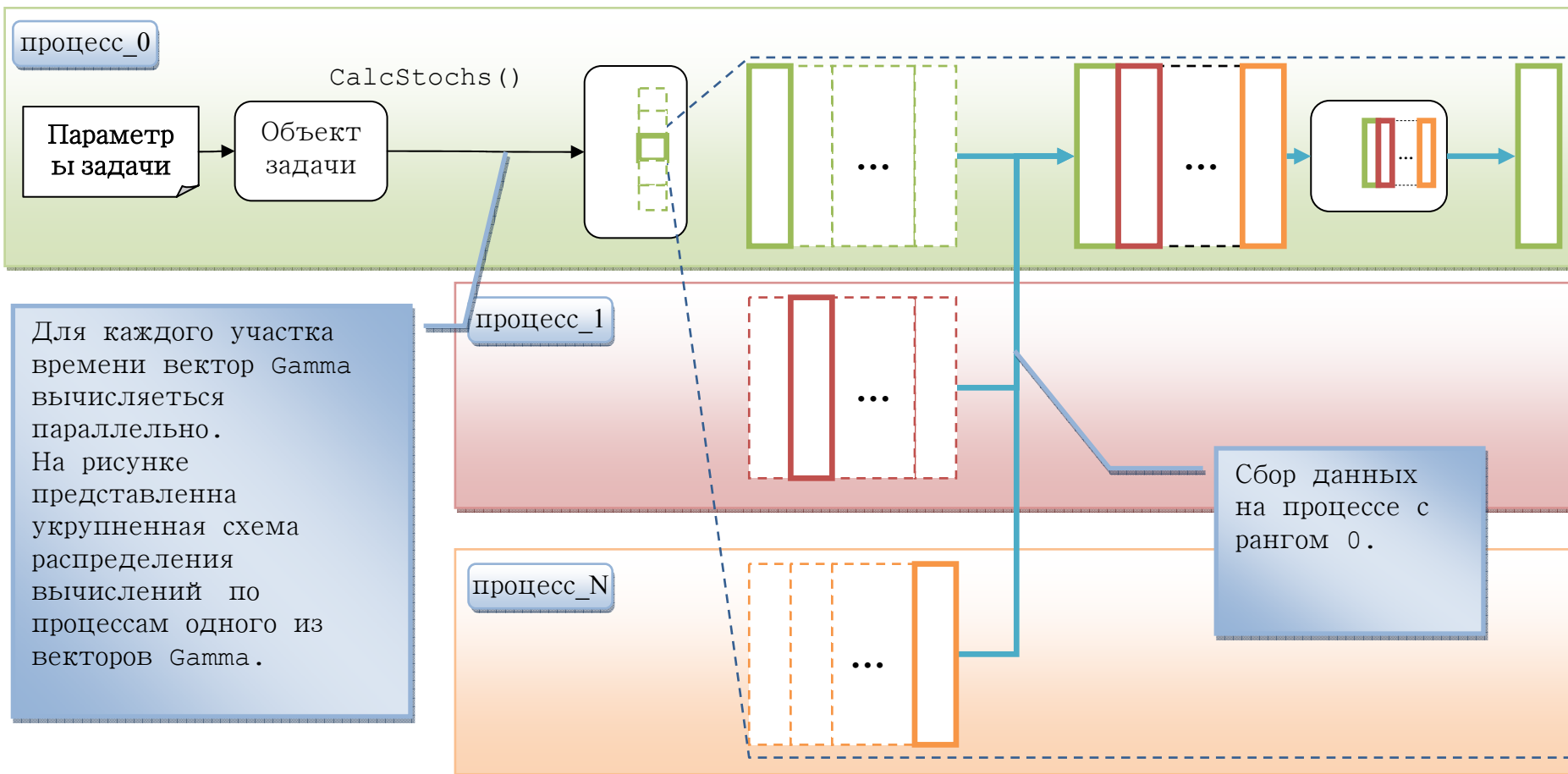
Класс вычисления быстрого преобразование Фурье FFT – CFourierTransform

Основные методы:

Init – инициализирует матрицу преобразования.

Transform – производит умножение входного вектора на матрицу преобразования

TransformWrite – то же самое что и Transform только с выводом результата в указанный файл.



Для каждого участка времени вектор Γ вычисляется параллельно. На рисунке представлена укрупненная схема распределения вычислений по процессам одного из векторов Γ .

Использованные функции:

```
int MPI_Init( int* argc, char*** argv)
```

```
int MPI_Finalize( void )
```

```
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
```

```
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &n_proc);
```

```
MPI_Bcast(&eq, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

```
MPI_Reduce ( buf_r, rbuf_r, iMaxPsi, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0,  
MPI_COMM_WORLD);
```

Что важно:

При работе на кластере ННГУ (под Windows 2008) установить параметр:

1. В качестве параметра C/C++->Code Generation->Runtime library надо указывать Multi-threaded, а не Multi-threaded DLL, так как ваших dll, скорее всего, на сервере нету.

2. MPICH2 на кластере не работает (точнее работает не адекватно на win hpc 2008, программу можно запустить если ноды указать только в строго

определенном порядке). Из за этого нужно собирать программу с [Microsoft HPC SDK Pack](#).

Приложение 1.

[MPI. Терминология и обозначения](#)

[Общие процедуры MPI](#)

[Прием/передача сообщений между отдельными процессами](#)

[Объединение запросов на взаимодействие](#)

[Совмещенные прием/передача сообщений](#)

[Коллективные взаимодействия процессов](#)

[Синхронизация процессов](#)

[Работа с группами процессов](#)

[Предопределенные константы](#)

[Примеры MPI-программ](#)

MPI. Терминология и обозначения

MPI - message passing interface - библиотека функций, предназначенная для поддержки работы параллельных процессов в терминах передачи сообщений.

Номер процесса - целое неотрицательное число, являющееся уникальным атрибутом каждого процесса.

Атрибуты сообщения - номер процесса-отправителя, номер процесса-получателя и идентификатор сообщения. Для них заведена структура *MPI_Status*, содержащая три поля: *MPI_Source* (номер процесса отправителя), *MPI_Tag* (идентификатор сообщения), *MPI_Error* (код ошибки); могут быть и добавочные поля.

Идентификатор сообщения (msgtag) - атрибут сообщения, являющийся целым неотрицательным числом, лежащим в диапазоне от 0 до 32767.

Процессы объединяются в *группы*, могут быть вложенные группы. Внутри группы все процессы перенумерованы. С каждой группой ассоциирован свой *коммуникатор*. Поэтому при осуществлении пересылки необходимо указать идентификатор группы, внутри которой производится эта пересылка. Все процессы содержатся в группе с предопределенным идентификатором *MPI_COMM_WORLD*.

При описании процедур MPI будем пользоваться словом OUT для обозначения "выходных" параметров, т.е. таких параметров, через которые процедура возвращает результаты.

Общие процедуры MPI

int MPI_Init(int* argc, char* argv)**

MPI_Init - инициализация параллельной части приложения. Реальная инициализация для каждого приложения выполняется не более одного раза, а если MPI уже был инициализирован, то никакие действия не выполняются и происходит немедленный возврат из подпрограммы. Все оставшиеся MPI-процедуры могут быть вызваны только после вызова *MPI_Init*.

Возвращает: в случае успешного выполнения - *MPI_SUCCESS*, иначе - код ошибки. (То же самое возвращают и все остальные функции, рассматриваемые в данном руководстве.)

int MPI_Finalize(void)

MPI_Finalize - завершение параллельной части приложения. Все последующие обращения к любым MPI-процедурам, в том числе к *MPI_Init*, запрещены. К моменту вызова *MPI_Finalize* некоторым процессом все действия, требующие его участия в обмене сообщениями, должны быть завершены.

Сложный тип аргументов *MPI_Init* предусмотрен для того, чтобы передавать всем процессам аргументы *main*:

```
int main(int argc, char** argv){
int main(int argc, char** argv)
{   MPI_Init(&argc, &argv);
...
MPI_Finalize();}
```


int MPI_Comm_size(MPI_Comm comm, int* size)

Определение общего числа параллельных процессов в группе *comm*.

comm - идентификатор группы

OUT *size* - размер группы

int MPI_Comm_rank(MPI_Comm comm, int* rank)

Определение номера процесса в группе *comm*. Значение, возвращаемое по адресу *&rank*, лежит в диапазоне от 0 до *size_of_group-1*.

comm - идентификатор группы

OUT *rank* - номер вызывающего процесса в группе *comm*

double MPI_Wtime(void)

Функция возвращает астрономическое время в секундах (вещественное число), прошедшее с некоторого момента в прошлом. Гарантируется, что этот момент не будет изменен за время существования процесса.

Прием/передача сообщений между отдельными процессами

Прием/передача сообщений с блокировкой

int MPI_Send(void* buf, int count, MPI_Datatype datatype, int dest, int msgtag, MPI_Comm comm)

buf - адрес начала буфера посылки сообщения

count - число передаваемых элементов в сообщении

datatype - тип передаваемых элементов

dest - номер процесса-получателя

msgtag - идентификатор сообщения

comm - идентификатор группы

Блокирующая посылка сообщения с идентификатором *msgtag*, состоящего из *count* элементов типа *datatype*, процессу с номером *dest*. Все элементы сообщения расположены подряд в буфере *buf*.

Значение *count* может быть нулем. Тип передаваемых элементов *datatype* должен указываться с помощью predefined констант типа. Разрешается передавать сообщение самому себе.

Блокировка гарантирует корректность повторного использования всех параметров после возврата из подпрограммы. Выбор способа осуществления этой гарантии: копирование в промежуточный буфер или непосредственная передача процессу *dest*, остается за MPI. Следует специально отметить, что возврат из подпрограммы *MPI_Send* не означает ни того, что сообщение уже передано процессу *dest*, ни того, что сообщение покинуло процессорный элемент, на котором выполняется процесс, выполнивший *MPI_Send*.

int MPI_Recv(void* buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status)

OUT *buf* - адрес начала буфера приема сообщения

count - максимальное число элементов в принимаемом сообщении

datatype - тип элементов принимаемого сообщения

source - номер процесса-отправителя

msgtag - идентификатор принимаемого сообщения

comm - идентификатор группы

OUT *status* - параметры принятого сообщения

Прием сообщения с идентификатором *msgtag* от процесса *source* с блокировкой. Число элементов в принимаемом сообщении не должно превосходить значения *count*. Если число принятых элементов меньше значения *count*, то гарантируется, что в буфере *buf* изменятся только элементы, соответствующие элементам принятого сообщения. Если нужно узнать точное число элементов в сообщении, то можно воспользоваться подпрограммой *MPI_Probe*.

Блокировка гарантирует, что после возврата из подпрограммы все элементы сообщения приняты и расположены в буфере *buf*.

В качестве номера процесса-отправителя можно указать predetermined константу *MPI_ANY_SOURCE* - признак того, что подходит сообщение от любого процесса. В качестве идентификатора принимаемого сообщения можно указать константу *MPI_ANY_TAG* - признак того, что подходит сообщение с любым идентификатором. Если процесс посылает два сообщения другому процессу и оба эти сообщения соответствуют одному и тому же вызову *MPI_Recv*, то первым будет принято то сообщение, которое было отправлено раньше.

int MPI_Get_count(MPI_Status *status, MPI_Datatype datatype, int *count)

status - параметры принятого сообщения

datatype - тип элементов принятого сообщения

OUT *count* - число элементов сообщения

По значению параметра *status* данная подпрограмма определяет число уже принятых (после обращения к *MPI_Recv*) или принимаемых (после обращения к *MPI_Probe* или *MPI_Iprobe*) элементов сообщения типа *datatype*.

int MPI_Probe(int source, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status)

source - номер процесса-отправителя или *MPI_ANY_SOURCE*

msgtag - идентификатор ожидаемого сообщения или *MPI_ANY_TAG*

comm - идентификатор группы

OUT *status* - параметры обнаруженного сообщения

Передача сообщения, аналогичная *MPI_Send*, однако возврат из подпрограммы происходит сразу после инициализации процесса передачи без ожидания обработки всего сообщения, находящегося в буфере *buf*. Это означает, что нельзя повторно использовать данный буфер для других целей без получения дополнительной информации о завершении данной посылки. Окончание процесса передачи (т.е. того момента, когда можно переиспользовать буфер *buf* без опасения испортить передаваемое сообщение) можно определить с помощью параметра *request* и процедур *MPI_Wait* и *MPI_Test*.

Сообщение, отправленное любой из процедур *MPI_Send* и *MPI_Isend*, может быть принято любой из процедур *MPI_Recv* и *MPI_Irecv*.

int MPI_Irecv(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request)

OUT *buf* - адрес начала буфера приема сообщения

count - максимальное число элементов в принимаемом сообщении

datatype - тип элементов принимаемого сообщения

source - номер процесса-отправителя

msgtag - идентификатор принимаемого сообщения

comm - идентификатор группы

OUT *request* - идентификатор асинхронного приема сообщения

Прием сообщения, аналогичный *MPI_Recv*, однако возврат из подпрограммы происходит сразу после инициализации процесса приема без ожидания получения сообщения в буфере *buf*. Окончание процесса приема можно определить с помощью параметра *request* и процедур *MPI_Wait* и *MPI_Test*.

int MPI_Wait(MPI_Request *request, MPI_Status *status)

request - идентификатор асинхронного приема или передачи

OUT *status* - параметры сообщения

Ожидание завершения асинхронных процедур *MPI_Isend* или *MPI_Irecv*, ассоциированных с идентификатором *request*. В случае приема, атрибуты и длину полученного сообщения можно определить обычным образом с помощью параметра *status*.

int MPI_Waitall(int count, MPI_Request *requests, MPI_Status *statuses)

count - число идентификаторов

requests - массив идентификаторов асинхронного приема или передачи

OUT *statuses* - параметры сообщений

Выполнение процесса блокируется до тех пор, пока все операции обмена, ассоциированные с указанными идентификаторами, не будут завершены. Если во время одной или нескольких операций обмена возникли ошибки, то поле ошибки в элементах массива *statuses* будет установлено в соответствующее значение.

int MPI_Waitany(int count, MPI_Request *requests, int *index, MPI_Status *status)

count - число идентификаторов

requests - массив идентификаторов асинхронного приема или передачи

OUT *index* - номер завершенной операции обмена

OUT *status* - параметры сообщений

Выполнение процесса блокируется до тех пор, пока какая-либо операция обмена, ассоциированная с указанными идентификаторами, не будет завершена. Если несколько операций могут быть завершены, то случайным образом выбирается одна из них. Параметр *index* содержит номер элемента в массиве *requests*, содержащего идентификатор завершенной операции.

int MPI_Waitsome(int incount, MPI_Request *requests, int *outcount, int *indexes, MPI_Status *statuses)

incount - число идентификаторов

requests - массив идентификаторов асинхронного приема или передачи

OUT *outcount* - число идентификаторов завершившихся операций обмена

OUT *indexes* - массив номеров завершившихся операции обмена

OUT *statuses* - параметры завершившихся сообщений

Выполнение процесса блокируется до тех пор, пока по крайней мере одна из операций обмена, ассоциированных с указанными идентификаторами, не будет завершена. Параметр *outcount* содержит число завершенных операций, а первые *outcount* элементов массива *indexes* содержат номера элементов массива *requests* с их идентификаторами. Первые *outcount* элементов массива *statuses* содержат параметры завершенных операций.

int MPI_Test(MPI_Request *request, int *flag, MPI_Status *status)

request - идентификатор асинхронного приема или передачи

OUT *flag* - признак завершенности операции обмена

OUT *status* - параметры сообщения

Проверка завершенности асинхронных процедур *MPI_Isend* или *MPI_Irecv*, ассоциированных с идентификатором *request*. В параметре *flag* возвращает значение 1, если соответствующая операция завершена, и значение 0 в противном случае. Если завершена процедура приема, то атрибуты и длину полученного сообщения можно определить обычным образом с помощью параметра *status*.

int MPI_Testall(int count, MPI_Request *requests, int *flag, MPI_Status *statuses)

count - число идентификаторов

requests - массив идентификаторов асинхронного приема или передачи

OUT *flag* - признак завершенности операций обмена

OUT *statuses* - параметры сообщений

В параметре *flag* возвращает значение 1, если все операции, ассоциированные с указанными идентификаторами, завершены (с указанием параметров сообщений в массиве *statuses*). В противном случае возвращается 0, а элементы массива *statuses* неопределены.

int MPI_Testany(int count, MPI_Request *requests, int *index, int *flag, MPI_Status *status)

count - число идентификаторов

requests - массив идентификаторов асинхронного приема или передачи

OUT *index* - номер завершенной операции обмена

OUT *flag* - признак завершенности операции обмена

OUT *status* - параметры сообщения

Если к моменту вызова подпрограммы хотя бы одна из операций обмена завершилась, то в параметре *flag* возвращается значение 1, *index* содержит номер соответствующего элемента в массиве *requests*, а *status* - параметры сообщения.

int MPI_Testsome(int incount, MPI_Request *requests, int *outcount, int *indexes, MPI_Status *statuses)

incount - число идентификаторов

requests - массив идентификаторов асинхронного приема или передачи

OUT *outcount* - число идентификаторов завершившихся операций обмена

OUT *indexes* - массив номеров завершившихся операции обмена

OUT *statuses* - параметры завершившихся операций

Данная подпрограмма работает так же, как и *MPI_Waitsome*, за исключением того, что возврат происходит немедленно. Если ни одна из указанных операций не завершилась, то значение *outcount* будет равно нулю.

int MPI_Iprobe(int source, int msgtag, MPI_Comm comm, int *flag, MPI_Status *status)

source - номер процесса-отправителя или *MPI_ANY_SOURCE*

msgtag - идентификатор ожидаемого сообщения или *MPI_ANY_TAG*

comm - идентификатор группы

OUT *flag* - признак завершенности операции обмена

OUT *status* - параметры обнаруженного сообщения

Получение информации о поступлении и структуре ожидаемого сообщения без блокировки. В параметре *flag* возвращает значение 1, если сообщение с подходящими атрибутами уже может быть принято (в этом случае ее действие полностью аналогично *MPI_Probe*), и значение 0, если сообщения с указанными атрибутами еще нет.

Объединение запросов на взаимодействие

Процедуры данной группы позволяют снизить накладные расходы, возникающие в рамках одного процессора при обработке приема/передачи и перемещении необходимой информации между процессом и сетевым контроллером. Несколько запросов на прием и/или передачу могут объединяться вместе для того, чтобы далее их можно было бы запустить одной командой. Способ приема сообщения никак не зависит от способа его посылки: сообщение, отправленное с помощью объединения запросов либо обычным способом, может быть принято как обычным способом, так и с помощью объединения запросов.

int MPI_Send_init(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int dest, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request)

buf - адрес начала буфера посылки сообщения

count - число передаваемых элементов в сообщении

datatype - тип передаваемых элементов

dest - номер процесса-получателя

msgtag - идентификатор сообщения

comm - идентификатор группы

OUT *request* - идентификатор асинхронной передачи

Формирование запроса на выполнение пересылки данных. Все параметры точно такие же, как и у подпрограммы *MPI_Isend*, однако в отличие от нее пересылка не начинается до вызова подпрограммы *MPI_Startall*.

int MPI_Recv_init(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request)

OUT *buf* - адрес начала буфера приема сообщения

count - число принимаемых элементов в сообщении

datatype - тип принимаемых элементов

source - номер процесса-отправителя

msgtag - идентификатор сообщения

comm - идентификатор группы

OUT *request* - идентификатор асинхронного приема

Формирование запроса на выполнение приема данных. Все параметры точно такие же, как и у подпрограммы *MPI_Irecv*, однако в отличие от нее реальный прием не начинается до вызова подпрограммы *MPI_Startall*.

MPI_Startall(int count, MPI_Request *requests)

count - число запросов на взаимодействие

OUT *requests* - массив идентификаторов приема/передачи

Запуск всех отложенных взаимодействий, ассоциированных вызовами подпрограмм *MPI_Send_init* и *MPI_Recv_init* с элементами массива запросов *requests*. Все взаимодействия запускаются в режиме без блокировки, а их завершение можно определить обычным образом с помощью процедур *MPI_Wait* и *MPI_Test*.

Совмещенные прием/передача сообщений

int MPI_Sendrecv(void *sbuf, int scount, MPI_Datatype stype, int dest, int stag, void *rbuf, int rcount, MPI_Datatype rtype, int source, MPI_Datatype rtag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status)

sbuf - адрес начала буфера отправки сообщения

scount - число передаваемых элементов в сообщении

stype - тип передаваемых элементов

dest - номер процесса-получателя

stag - идентификатор посылаемого сообщения

OUT *rbuf* - адрес начала буфера приема сообщения

rcount - число принимаемых элементов сообщения

rtype - тип принимаемых элементов

source - номер процесса-отправителя

rtag - идентификатор принимаемого сообщения

comm - идентификатор группы

OUT *status* - параметры принятого сообщения

Данная операция объединяет в едином запросе посылку и прием сообщений. Принимающий и отправляющий процессы могут являться одним и тем же процессом. Сообщение, отправленное операцией *MPI_Sendrecv*, может быть принято обычным образом, и точно также операция *MPI_Sendrecv* может принять сообщение, отправленное обычной операцией *MPI_Send*. Буфера приема и посылки обязательно должны быть различными.

Коллективные взаимодействия процессов

В операциях коллективного взаимодействия процессов участвуют все процессы коммутатора. Соответствующая процедура должна быть вызвана каждым процессом, быть может, со своим набором параметров. Возврат из процедуры коллективного взаимодействия может произойти в тот момент, когда участие процесса в данной операции уже закончено. Как и для блокирующих процедур, возврат означает то, что разрешен свободный доступ к буферу приема или посылки, но не означает ни того, что операция завершена другими процессами, ни даже того, что она ими начата (если это возможно по смыслу операции).

int MPI_Bcast(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, MPI_Comm comm)

OUT *buf* - адрес начала буфера посылки сообщения

count - число передаваемых элементов в сообщении

datatype - тип передаваемых элементов

source - номер рассылающего процесса

comm - идентификатор группы

Рассылка сообщения от процесса *source* всем процессам, включая рассылающий процесс. При возврате из процедуры содержимое буфера *buf* процесса *source* будет скопировано в локальный буфер процесса. Значения параметров *count*, *datatype* и *source* должны быть одинаковыми у всех процессов.

int MPI_Gather(void *sbuf, int scount, MPI_Datatype stype, void *rbuf, int rcount, MPI_Datatype rtype, int dest, MPI_Comm comm)

sbuf - адрес начала буфера посылки

scount - число элементов в посылаемом сообщении

stype - тип элементов отсылаемого сообщения

OUT *rbuf* - адрес начала буфера сборки данных

rcount - число элементов в принимаемом сообщении

rtype - тип элементов принимаемого сообщения

dest - номер процесса, на котором происходит сборка данных

comm - идентификатор группы

OUT *ierror* - код ошибки

Сборка данных со всех процессов в буфере *rbuf* процесса *dest*. Каждый процесс, включая *dest*, посылает содержимое своего буфера *sbuf* процессу *dest*. Собирающий процесс сохраняет данные в буфере *rbuf*, располагая их в порядке возрастания номеров процессов. Параметр *rbuf* имеет значение только на собирающем процессе и на остальных игнорируется, значения параметров *count*, *datatype* и *dest* должны быть одинаковыми у всех процессов.

int MPI_Allreduce(void *sbuf, void *rbuf, int count, MPI_Datatype datatype, MPI_Op op, MPI_Comm comm)

sbuf - адрес начала буфера для аргументов

OUT *rbuf* - адрес начала буфера для результата

count - число аргументов у каждого процесса

datatype - тип аргументов

op - идентификатор глобальной операции

comm - идентификатор группы

Выполнение *count* глобальных операций *op* с возвратом *count* результатов во всех процессах в буфере *rbuf*. Операция выполняется независимо над соответствующими аргументами всех процессов.

Значения параметров *count* и *datatype* у всех процессов должны быть одинаковыми. Из соображений эффективности реализации предполагается, что операция *op* обладает свойствами ассоциативности и коммутативности.

int MPI_Reduce(void *sbuf, void *rbuf, int count, MPI_Datatype datatype, MPI_Op op, int root, MPI_Comm comm)

sbuf - адрес начала буфера для аргументов

OUT *rbuf* - адрес начала буфера для результата

count - число аргументов у каждого процесса

datatype - тип аргументов

op - идентификатор глобальной операции

root - процесс-получатель результата

comm - идентификатор группы

Функция аналогична предыдущей, но результат будет записан в буфер *rbuf* только у процесса *root*.

Синхронизация процессов

int MPI_Barrier(MPI_Comm comm)

comm - идентификатор группы

Блокирует работу процессов, вызвавших данную процедуру, до тех пор, пока все оставшиеся процессы группы *comm* также не выполнят эту процедуру.

Работа с группами процессов

int MPI_Comm_split(MPI_Comm comm, int color, int key, MPI_Comm *newcomm)

comm - идентификатор группы

color - признак разделения на группы

key - параметр, определяющий нумерацию в новых группах

OUT *newcomm* - идентификатор новой группы

Данная процедура разбивает все множество процессов, входящих в группу *comm*, на непересекающиеся подгруппы - одну подгруппу на каждое значение параметра *color* (неотрицательное число). Каждая новая подгруппа содержит все процессы одного цвета. Если в качестве *color* указано значение *MPI_UNDEFINED*, то в *newcomm* будет возвращено значение *MPI_COMM_NULL*.

int MPI_Comm_free(MPI_Comm comm)

OUT *comm* - идентификатор группы

Уничтожает группу, ассоциированную с идентификатором *comm*, который после возвращения устанавливается в *MPI_COMM_NULL*.

Предопределенные константы

Предопределенные константы типа элементов сообщений

Константы MPI Тип в C

MPI_CHAR signed char *MPI_SHORT* signed int *MPI_INT* signed int
MPI_LONG signed long int *MPI_UNSIGNED_CHAR* unsigned char
MPI_UNSIGNED_SHORT unsigned int *MPI_UNSIGNED* unsigned int
MPI_UNSIGNED_LONG unsigned long int *MPI_FLOAT* float *MPI_DOUBLE*
double *MPI_LONG_DOUBLE* long double

Другие predefined типы

MPI_Status - структура; атрибуты сообщений; содержит три обязательных поля:

MPI_Source (номер процесса отправителя)

MPI_Tag (идентификатор сообщения)

MPI_Error (код ошибки)

MPI_Request - системный тип; идентификатор операции отправки-приема сообщения

MPI_Comm - системный тип; идентификатор группы (коммуникатора)

MPI_COMM_WORLD - зарезервированный идентификатор группы, состоящей из всех процессов приложения

Константы-пустышки

MPI_COMM_NULL

MPI_DATATYPE_NULL

MPI_REQUEST_NULL

Константа неопределенного значения

MPI_UNDEFINED

Глобальные операции

MPI_MAX

MPI_MIN \ *MPI_SUM*

MPI_PROD

Любой процесс/идентификатор

MPI_ANY_SOURCE

MPI_ANY_TAG

Код успешного завершения процедуры

MPI_SUCCESS