

## ДИНАМИКА КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ СИСТЕМЫ ТРЕХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК С ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

*М. В. Алтайский<sup>а,1</sup>, Н. Е. Капуткина<sup>б</sup>, В. А. Крылов<sup>в</sup>*

<sup>а</sup> Институт космических исследований РАН, Москва

<sup>б</sup> Национальный исследовательский технологический университет МИСиС, Москва

<sup>в</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Представлены результаты моделирования динамики квантовых состояний массива из трех квантовых точек на основе численного решения уравнения фон Неймана  $i\dot{\rho} = [H, \rho]$  с усреднением по состояниям термостата методом фейнмановского интеграла по траекториям. Показано, что в простейшей системе из трех квантовых точек с общим фононным термостатом может быть реализована операция  $\neg$ XOR. Результаты моделирования могут быть использованы при разработке различных квантовых симуляторов, квантовых гейтов и квантовых нейронных сетей на основе массивов квантовых точек.

We present the results of simulation of the dynamics of a 3 quantum dot array by means of numerical solution of the von Neumann equation  $i\dot{\rho} = [H, \rho]$ . The trace over the states of phonon bath was taken by Feynman path integral numerical calculation. It is shown that simplistic system of 3 quantum dots with common phonon bath can implement  $\neg$ XOR logic operation. The results of our model can be applied to the development of different quantum simulators, quantum gates, and quantum neural networks implemented in arrays of quantum dots.

PACS: 73.21.La

### ВВЕДЕНИЕ

Использование систем одинаковых квантовых элементов для моделирования динамики других систем вызывает интерес, начиная с пионерской работы Р. Фейнмана [1]. Этот интерес перешел в практическую плоскость, когда компания Google и Лаборатория квантового искусственного интеллекта NASA объявили об использовании адиабатических квантовых вычислений, реализованных в процессорах D-Wave Systems Ltd. на основе SQUID, для задач машинного обучения и классификации больших данных [2–4]. Основным недостатком существующих адиабатических квантовых процессоров на основе сверхпроводящих квантовых интерференционных устройств (SQUID), работающих с квантами магнитного потока, является низкая рабочая температура  $T \lesssim 0,1$  К, требующая громоздкой системы охлаждения и препятствующая миниатюризации устройств [5, 6].

---

<sup>1</sup>E-mail: altaisky@rssi.ru

Возможной альтернативой адиабатическим квантовым компьютерам (квантовым нейронным сетям) на основе SQUID является использование для тех же целей массивов квантовых точек [7]. Квантовые точки — гигантские искусственные атомы, параметры которых задаются при создании наноструктуры, но могут меняться при приложении внешнего электрического и магнитного полей [8–10].

Идея квантовой нейронной сети на основе массива квантовых точек была впервые выдвинута в работе [11]. В работах [12, 13] показано, что такие сети могут, в определенных условиях, сохранять свойства квантовой когерентности вплоть до температур  $\sim 10^2$  К. Использование кулоновских сил для управления взаимодействием кубитов в массиве хотя и усложняет задачу управления в сравнении с индуктивными связями в массиве SQUID, но повышает шансы на миниатюризацию таких устройств.

Ниже мы рассмотрим модельную систему из трех InGaAs/GaAs квантовых точек, взаимодействующих с общим фоновым термостатом подложки GaAs. Модель из трех кубитов представляет собой минимальную реализацию квантовой нейронной сети.

## 1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Система из трех кубитов, взаимодействующих с внешним управляющим электромагнитным полем и диполь-дипольно взаимодействующих друг с другом, является наименьшей квантовой системой, эволюция которой из заданного начального состояния может быть использована для моделирования других систем. Если кубиты имеют энергию возбуждения  $\Delta E_i = E_i^X - E_i^0$ , гамильтониан такой системы, в приближении вращающейся волны [14], может быть записан в виде [13]

$$H_0 = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\delta_i}{2} (\sigma_z^i + 1) + \sum_{i=0}^{N-1} \frac{K_i}{2} \sigma_x^i + \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_+^i \sigma_-^j, \quad (1)$$

аналогичном модели Джейнса–Каммингса [15]. Здесь  $N = 3$  — число кубитов в системе;  $\delta_i = \Delta E_i / \hbar - \omega$  — отстройка ведущего поля от резонансной частоты  $i$ -го кубита;  $K_i$  — напряженность управляющего поля, действующего на  $i$ -й кубит;  $\sigma_{(x,y,z)}^i$  — матрицы Паули, действующие на переменные  $i$ -го кубита,  $\sigma_{\pm}^i = \sigma_x^i \pm i\sigma_y^i$ . Система с гамильтонианом (1) может, например, быть использована для классификации входных состояний  $|i_2\rangle|i_1\rangle|i_0\rangle \in \mathbb{S}_{in}^3$  в зависимости от набора управляющих параметров

$$J_{12} = J_{21} \equiv J_0, \quad J_{02} = J_{20} \equiv J_1, \quad J_{01} = J_{10} \equiv J_2,$$

а может быть квантовым симулятором динамики малочастичной системы.

В случае реальных физических систем, наряду с взаимодействием кубитов между собой, должно быть учтено взаимодействие с флуктуирующим окружением. Это обычно делают в линейном приближении [16–18]:

$$H_{\text{int}} = \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} \hat{S}_{\alpha} \hat{R}_{\beta},$$

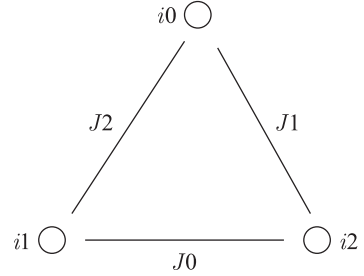
где  $\hat{S}_{\alpha}$  — операторы, линейные по координатам системы, а  $\hat{R}_{\beta}$  — операторы, линейные по координатам термостата;  $\gamma_{\alpha\beta}$  — константы связи. В случае отсутствия взаимодействия

с окружением задача об эволюции начального квантового состояния сводится к решению уравнения фон Неймана

$$i\dot{\rho} = [H, \rho], \tag{2}$$

где  $H = H_0$ . В общем же случае приходится решать более сложную задачу с гамильтонианом  $H = H_0 + H_{\text{int}} + H_{\text{phonon}}$ , с последующим суммированием по степеням свободы фононного термостата [17, 19].

Квантовые системы с гамильтонианом вида (1) можно рассматривать в качестве альтернативы адиабатическому квантовому компьютеру, выполненному в виде квантовой сети Хопфилда из элементов SQUID [5, 6]. Вместо кубитов на основе SQUID можно было бы использовать основное и возбужденное состояния InGaAs квантовых точек, выполненных на подложке GaAs. В отличие от взаимодействия между элементами SQUID, реализуемого с помощью индуктивных связей в сети Хопфилда, диполь-дипольным взаимодействием в системе квантовых точек можно управлять электростатически, подавая соответствующий потенциал на управляющие емкости (рис. 1).



Динамика системы из трех кубитов может рассматриваться как отображение прямого произведения начального состояния квантового регистра на множество значений управляющих параметров в пространство конечных состояний квантового регистра:

$$\mathbb{S}_{\text{in}}^3 \otimes \mathbb{J}^3 \rightarrow \mathbb{S}_{\text{out}}^3. \tag{3}$$

Рис. 1. Схема управления массивом из трех квантовых точек с диполь-дипольным взаимодействием

Система кубитов при этом взаимодействует с фононами подложки, так что состояния регистра описываются с помощью матриц плотности размером  $2^3 \times 2^3$ .

При исследовании отображения (3) мы предполагаем, что управление константами диполь-дипольного взаимодействия происходит дискретно, т. е. каждая из констант  $J_0, J_1, J_2$  может принимать только два значения  $\mathbb{J} = \{0, J\}^3$ . В силу симметрии системы относительно перестановки кубитов достаточно рассмотреть две нетривиальные конфигурации: а)  $\Delta$ -конфигурацию — все три кубита взаимодействуют попарно; б)  $\Lambda$ -конфигурацию — два кубита взаимодействуют с общим центром.

В базисе состояний  $(|000\rangle, \dots, |111\rangle)$  матрица гамильтониана (1), при нулевой отстройке  $\delta_i = 0$ , имеет вид

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & K_0/2 & K_1/2 & 0 & K_2/2 & 0 & 0 & 0 \\ K_0/2 & 0 & J_2 & K_1/2 & J_1 & K_2/2 & 0 & 0 \\ K_1/2 & J_2 & 0 & K_0/2 & J_0 & 0 & K_2/2 & 0 \\ 0 & K_1/2 & K_0/2 & 0 & 0 & J_0 & J_1 & K_2/2 \\ K_2/2 & J_1 & J_0 & 0 & 0 & K_0/2 & K_1/2 & 0 \\ 0 & K_2/2 & 0 & J_0 & K_0/2 & 0 & J_2 & K_1/2 \\ 0 & 0 & K_2/2 & J_1 & K_1/2 & J_2 & 0 & K_0/2 \\ 0 & 0 & 0 & K_2/2 & 0 & K_1/2 & K_0/2 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

В случае низких температур,  $\Delta E_i \ll kT$ , когда влиянием фононов можно пренебречь, уравнение (2) с  $H = H_0$  легко решается путем перехода к базису собственных векторов гамильтониана  $H_0$ . В остальных случаях применяются численные методы [17, 20–22].

При численном моделировании рассматриваемой сети использовались следующие параметры квантовых точек: диаметр КТ  $d = 30$  нм, эффективное расстояние между КТ — 50 нм, напряженность электрического поля  $K = 190$  В/см =  $0,433$  пс<sup>-1</sup>, частота диполь-дипольного перехода  $J = 0,394$  пс<sup>-1</sup> при температуре  $T = 77$  К. Использовалась супероммическая спектральная плотность фононов

$$J(\omega) = \alpha\omega^3 \exp\left(-\frac{\omega^2}{\omega_c^2}\right) \quad (5)$$

с учетом данных, приведенных в работе [23]. Спектральная константа  $\alpha = 0,027$  пс<sup>2</sup> бралась из работ [20, 21], частота обрезания  $\omega_c = \sqrt{2}(v_c/d)$ , где  $v_c = 5,11 \cdot 10^5$  см/с — скорость звука в GaAs. При использовании приближения вращающейся волны, как и в предыдущей работе [13], мы предполагали, что гармоническое воздействие внешнего электромагнитного поля на квантовые точки осуществляется резонансным образом. Не-нулевая отстройка частоты  $\delta_i \neq 0$  может приводить к эффектам хаотизации колебаний.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ

Как и обычная нейронная сеть, квантовая нейронная сеть, состоящая из трех кубитов, имеет две функции: обучение весов сети и классификацию входных векторов. Здесь мы исследуем лишь вторую функцию — классификацию входных состояний при заданных весах  $\{J_0, J_1, J_2\}$ . Перед тем, как перейти к классификации (3) всех состояний трехку-

–XOR

Вход	Выход
0	1
0	0
1	0
1	1

битного квантового регистра, рассмотрим более простую задачу. Будем считать кубит  $i_0$  выходом сети, а кубиты  $i_1$  и  $i_2$  — ее входами.

Для реализации обратной операции к исключающему ИЛИ (–XOR) необходимо получить следующее отображение, приведенное в таблице.

Для получения желаемого отображения организуем *сравнение* регистров  $i_1$  и  $i_2$  таким образом, чтобы при их различии кубит  $i_0$ , изначально приготовленный в возбужденном состоянии (1), в результате эволюции переходил в основное состояние (0). Это можно сделать, симметрично соединив выходной кубит  $i_0$  со входами  $i_1$  и  $i_2$  в  $\Lambda$ -конфигурацию, рис. 2, б.

На рис. 3, 4, 5, 6 приведены графики эволюции диагональных матричных элементов матрицы плотности (заселенностей) из начальных состояний  $\rho_i(0) = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  для  $\psi_i = 001, 010, 100$  и  $111$  соответственно.

Как видно из рис. 4, 5, при несовпадающих входных кубитах  $i_1 \neq i_2$ , в диапазоне  $t \in [5, 10]$  пс, доминируют состояния  $|??0\rangle$ , в которых выходной, нулевой, кубит находится в основном состоянии. При совпадающих состояниях входных кубитов ( $i_1 = i_2 = 1$ ) изначально приготовленное возбужденное состояние  $i_0 = 1$  выживает до больших времен (рис. 6), и вероятность перехода выходного кубита в основное состояние  $i_0 = 0$  существенно ниже. Несколько сложнее обстояло дело в случае, когда два сравниваемых

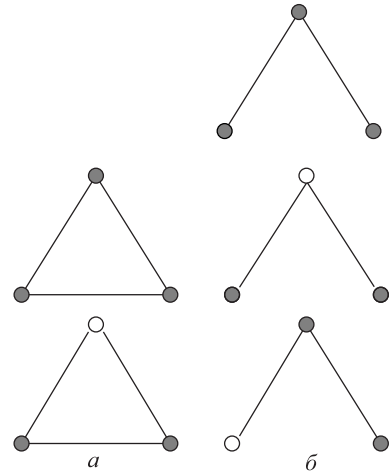


Рис. 2. Начальные конфигурации массива трех кубитов при  $\Delta$ -симметричном (а) и  $\Lambda$ -симметричном (б) взаимодействии. Темным кружкам отвечают возбужденные (1) состояния кубитов, светлым — основные состояния (0). Конфигурации, отличающиеся заменой возбужденного состояния на основное, на рисунке не показаны

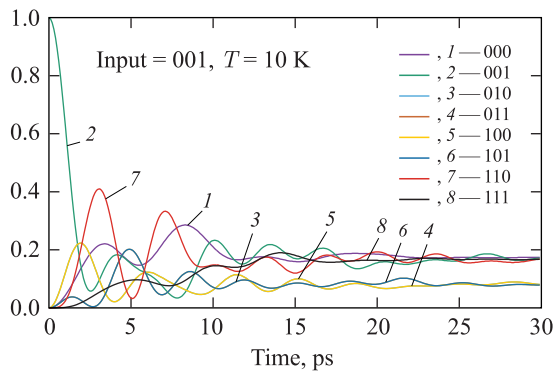


Рис. 3 (цветной в электронной версии). Эволюция заселенностей для начального состояния 001 при температуре  $T = 10$  К

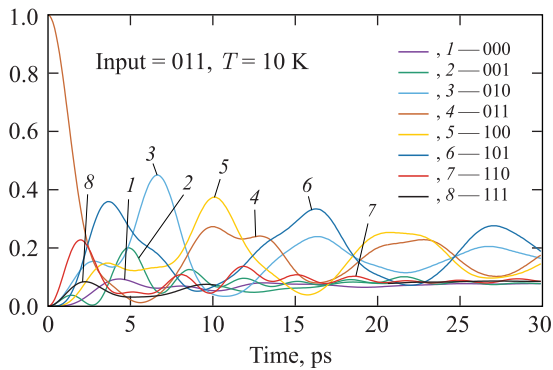


Рис. 4 (цветной в электронной версии). Эволюция заселенностей для начального состояния 011 при температуре  $T = 10$  К

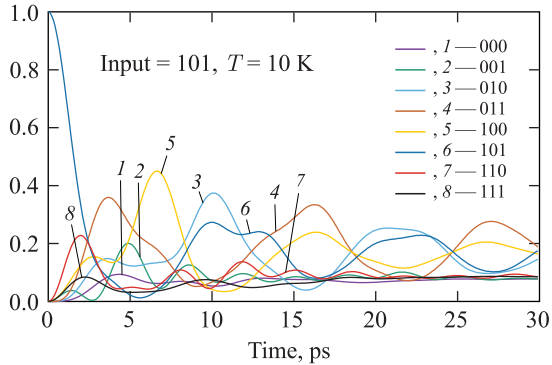


Рис. 5 (цветной в электронной версии). Эволюция заселенностей для начального состояния 101 при температуре  $T = 10$  К

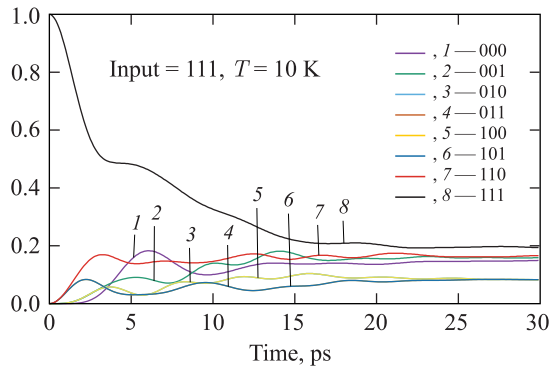


Рис. 6 (цветной в электронной версии). Эволюция заселенностей для начального состояния 111 при температуре  $T = 10$  К

кубита находились в основном состоянии  $i_1 = i_2 = 0$  (см. рис. 3). Здесь, в диапазоне  $t \in [5, 10]$  пс, существенным оказывается вклад от полного инвертирования всего регистра ( $001 \rightarrow 110$ ), что может привести к нежелательному результату. Возможно, с этим удастся справиться, выбрав более узкий временной интервал фиксации результатов и подобрав параметры соответствующим образом.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В силу сложности учета всех эффектов, связанных с возбуждением экситонов при взаимодействии квантовых точек в присутствии общего фоновонного термостата, здесь мы не пытаемся получить технологически приемлемое решение для квантовой нейронной сети на основе массива квантовых точек, работающих при высоких ( $10^1 - 10^2$  К) температурах. Наш расчет, проведенный на основе упрощенной модели, лишь указывает на богатое динамическое поведение таких систем, требующее экспериментального исследования. Экспериментальное исследование диполь-дипольного взаимодействия двух квантовых точек, находящихся в общей полупроводниковой гетероструктуре, представлено, например, в работе [24].

Как мы видели выше, простая квантовая конструкция, топологически эквивалентная однослойному перцептрону с двумя входами, в принципе, позволяет реализовать процедуру исключающего ИЛИ, что не под силу классическому однослойному перцептрону.

Используя различные конфигурации связей, т. е.  $\Delta$ - и  $\Lambda$ -конфигурации, можно получить различные классификации пространства квантовых состояний трехкубитового регистра, т. е. реализовать классификационную функцию квантовой нейронной сети. Дальнейшее увеличение числа кубитов в квантовом регистре ( $N > 3$ ) приведет к увеличению классификационных возможностей такой сети и, по-видимому, к появлению различных фазовых переходов и режимов кроссовера в такой системе [25].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Feynman R.* Simulating Physics with Computers // Intern. J. Theor. Phys. 1982. V. 21. P. 467–488.
2. *Cai X.-D., Wu D., Su Z.-E., Chen M.-C., Wang X.-L., Li Li, Liu N.-L., Lu C.-Y., Pan J.-W.* Entanglement-Based Machine Learning on a Quantum Computer // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 114, No. 11. P. 110504.
3. *Rebentrost P., Mohseni M., Lloyd S.* Quantum Support Vector Machine for Big Data Classification // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 113, No. 13. P. 130503.
4. *Schuld M., Sinayskiy I., Petruccione F.* The Quest for a Quantum Neural Network // Quantum Information Proc. 2014. V. 13, No. 11. P. 2567–2586.
5. *Johnson M. W. et al.* Quantum Annealing with Manufactured Spins // Nature. 2011. V. 473. P. 194–198.
6. *Lanting T. et al.* Entanglement in a Quantum Annealing Processor // Phys. Rev. X. 2014. V. 4, No. 2. P. 021041.
7. *Алтайский М. В., Капуткина Н. Е., Крылов В. А.* Квантовые нейронные сети: Современное состояние и перспективы развития // ЭЧАЯ. 2014. Т. 45. С. 1824–1864.
8. *Sikorski Ch., Merkt U.* Spectroscopy of Electronic States in InSb Quantum Dots // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62, No. 18. P. 2164–2167.
9. *Kaputkina N. E., Lozovik Yu. E.* Energy Spectra and Quantum Crystallization in Two-Electron Quantum Dots in a Magnetic Field // Phys. Solid State. 1998. V. 40, No. 9. P. 1594–1599.
10. *Kaputkina N. E., Lozovik Yu. E.* Spatially Separated Excitons in Single and Coupled Quantum Dots // Physica status solidi B. 1998. V. 207, No. 1. P. 147–152.
11. *Behrman E. C., Nash L. R., Steck J. E., Chandrashekar V. G., Skinner S. R.* Quantum Dot Neural Networks // Inf. Sci. 2000. V. 128. P. 257.
12. *Zanardi P., Rossi F.* Quantum Information in Semiconductors: Noiseless Encoding in a Quantum-Dot Array // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81, No. 21. P. 4752–4755.
13. *Altaisky M. V., Zolnikova N. N., Kaputkina N. E., Krylov V. A., Lozovik Yu. E., Dattani N. S.* Towards a Feasible Implementation of Quantum Neural Networks Using Quantum Dots // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 108, No. 10. P. 103108.
14. *Scully M. O., Zubairy M. S.* Quantum Optics. Cambridge Univ. Press, 2001.
15. *Jaynes E. T., Cummings F. W.* Comparison of Quantum and Semiclassical Radiation Theories with Application to the Beam Maser // Proc. IEEE. 1963. V. 51, No. 1. P. 89–109.
16. *Leggett A. J., Chakravarty S., Dorsey A. T., Fisher M. P. A., Garg A., Zwerger W.* Dynamics of the Dissipative Two-State System // Rev. Mod. Phys. 1987. V. 59, No. 1. P. 1–85.

17. *Makarov D. E., Makri N.* Path Integrals for Dissipative Systems by Tensor Multiplication. Condensed Phase Quantum Dynamics for Arbitrary Long Time // *Chem. Phys. Lett.* 1994. V. 221. P. 482–491.
18. *de Vega I., Alonso D.* Dynamics of Non-Markovian Open Quantum Systems // *Rev. Mod. Phys.* 2017. V. 89, No. 1. P. 015001.
19. *Breuer H.-P., Petruccione F.* The Theory of Open Quantum Systems. Oxford Univ. Press, 2007.
20. *Vagov A., Croitoru M. D., Glässl M., Axt V. M., Kuhn T.* Real-Time Path Integrals for Quantum Dots: Quantum Dissipative Dynamics with Superohmic Environment Coupling // *Phys. Rev. B.* 2011. V. 83, No. 9. P. 094303.
21. *Dattani N. S.* FeynDyn: A MATLAB Program for Fast Numerical Feynman Integral Calculations for Open Quantum System Dynamics on GPUs // *Comp. Phys. Commun.* 2013. V. 184. P. 2828–2833.
22. *Barth A. M., Vagov A., Axt V. M.* Path-Integral Description of Combined Hamiltonian and Non-Hamiltonian Dynamics in Quantum Dissipative Systems // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 94, No. 12. P. 125439.
23. *Quilter J. H., Brash A. J., Liu F., Glässl M., Barth A. M., Axt V. M., Ramsay A. J., Skolnick M. S., Fox A. M.* Phonon-Assisted Population Inversion of a Single InGaAs/GaAs Quantum Dot by Pulsed Laser Excitation // *Phys. Rev. Lett.* 2015. V. 114, No. 13. P. 137401.
24. *Unold T., Mueller K., Lienau C., Elsaesser T., Wieck A. D.* Optical Control of Excitons in a Pair of Quantum Dots Coupled by the Dipole–Dipole Interaction // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 94, No. 13. P. 137404.
25. *Birman J. L., Nazmitdinov R. G., Yukalov V. I.* Effects of Symmetry Breaking in Finite Quantum Systems // *Phys. Rep.* 2013. V. 526. P. 1–91.

Получено 11 июня 2019 г.