

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Столяров Євген Володимирович

УДК 53.01; 535.3

ДИСЕРТАЦІЯ
ТРАНСПОРТ ФОТОНІВ У ОДНОВИМІРНИХ ХВИЛЕВОДАХ
ТА НЕАДІАБАТИЧНА МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА

01.04.05 — оптика, лазерна фізика

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

_____ Є. В. Столяров

Науковий керівник: Чумак Олександр Олександрович,
доктор фіз.-мат. наук

Київ — 2020

Per aspera ad astra.

АНОТАЦІЯ

Столяров Є. В. Транспорт фотонів у одновимірних хвильових та неадіабатична молекулярна динаміка. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика. — Інститут фізики НАН України, Київ, 2020.

В роботі вивчається динаміка розсіяння фотонних та ядерних хвильових пакетів на квантових випромінювачах у одновимірних хвильоводах та на перетинах ізоенергетичних поверхонь у молекулярних системах.

Досліджено взаємодію хвильового пакету в когерентному стані з дворівневим атомом (кубітом) у одновимірному хвильоводі. Отримано рівняння еволюції населеності збудженого стану кубіта. Показано, що характер збудження кубіта залежить від середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі. Досліджено статистичні властивості випромінювання, що розсіялось на кубіті. Встановлено, що за великої середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі пройдене випромінювання має суперпуассонівську статистику, а відбите може бути як суб- так і суперпуассонівським (в залежності від величини параметра зв'язку між кубітом та хвильоводом).

Для опису розсіяння хвильових пакетів у одно- та двофотонних станах на кубіті використано метод функції розподілу фотонної густини у фазовому (координатно-імпульсному) просторі. Ця операторна функція є аналогом класичної мікроскопічної функції розподілу в статистичній фізиці. Показано, що після розсіяння однофотонного хвильового пакету його середня функція розподілу набуває від'ємних значень у певних областях фазового

простору навіть за умови позитивної початкової функції розподілу. Отримано аналітичні вирази для просторової густини фотонів, що розсіялись, та для їх густини в імпульсному просторі (спектральний розподіл). Показано, що спектр відбитого випромінювання вузьчий, ніж спектр пройденого. Отже, кубіт діє як спектральний фільтр для фотонних хвильових пакетів.

У випадку двофотонного вхідного хвильового пакету, який складається з двох ідентичних просторово розділених однофотонних імпульсів, отримано та чисельно розв'язано рівняння руху, що описують еволюцію фотонної функції розподілу у фазовому просторі. Показано, що тут області від'ємних значень функції розподілу розсіяного випромінювання виникають лише при певних значеннях сили взаємодії атома з хвилеводом та відстані між однофотонними компонентами вхідного імпульсу. Показано, що середнє значення та дисперсія кількості розсіяних фотонів залежать не лише від сили взаємодії та відстані між вхідними імпульсами, але й від спектральної ширини останніх.

Для опису еволюції двофотонного хвильового пакета в одновимірному хвилеводі, зв'язаному з резонатором та кубітом, використана залежна від часу хвильова функція системи. Отримано та розв'язано (аналітично та числовими методами) систему рівнянь руху амплітуд ймовірностей, що описують квантовий стан системи. Це дає змогу дослідити модифікацію спектру хвильового пакета під час взаємодії із системою резонатор-кубіт та часову динаміку збудження останньої. Показано, що ймовірність знаходження двох збуджень у системі резонатор-кубіт істотно зменшується у порівнянні з випадком резонатора, від'єданого від кубіта. Це означає фотонну блокаду цієї підсистеми. Показано, що спектр хвильового пакета, який розсіявся на системі резонатор-кубіт, відрізняється від спектра вхідного пакету. Використовуючи розклад Шмідта, показано, що стан розсіяних фотонів є заплутаним, що якісно відрізняє його від сепарабельного стану вхідних фотонів.

В роботі розглянуто дисперсне зчитування стану кубіта за допомогою фотодетектора в граничному випадку однофотонного вимірюючого імпульсу. Використання однофотонних імпульсів дає змогу уникнути помилок зчитування, що можуть з'являтися внаслідок неортогональності когерентних станів, які зазвичай використовують для зчитування. Зв'язок кубіта та резонатора описується гамільтоніаном Рабі. Швидкоосцилюючі доданки в гамільтоніані взаємодії кубіта та резонатора вважаються збуренням. Їх можна виключити, використавши унітарне перетворення. Це призводить до появи зсуву Блоха-Зіггера частоти резонатора. Показано, як цей зсув можна використати для покращення ефективності зчитування. Для опису динаміки системи використані рівняння еволюції операторів та хвильова функція системи.

Моделювання неадіабатичних процесів у молекулярних системах є важливим інструментом теоретичного дослідження різноманітних фотоіндукованих процесів таких, як просторова локалізація екситонів, перенос енергії та заряду в фотосинтетичних комплексах та в системах фотовольтаїки. В роботі представлено новий підхід до опису скорельованої електронно-ядерної динаміки в молекулярних системах. Вводиться ефективний гамільтоніан, який описує переходи між адіабатичними електронними рівнями та квантові флуктуації навколо класичних траєкторій руху ядер. Використовуючи цей гамільтоніан та формалізм оператора густини, отримано рівняння еволюції населеностей електронних адіабатичних рівнів та рівняння руху ядер. Показано, що в граничному випадку сильної декогеренції, ці рівняння стають марківськими. Також досліджено рівняння еволюції населеностей електронних рівнів у немарківському режимі. Використовуючи запропонований теоретичний підхід, створено алгоритм для моделювання неадіабатичних процесів у молекулярних системах.

Ключові слова: квантова електродинаміка в хвилеводі, дворівневий атом, кубіт, модель Джейнса–Камінґса, переплутані стани, неадіабатична молекулярна динаміка, адіабатичні стани, детальний баланс.

Публікації здобувача:

Статті:

1. O. O. Chumak, E. V. Stolyarov, Phase-space distribution functions for photon propagation in waveguides coupled to a qubit, [Phys. Rev. A **88**, 013855 \(2013\)](#).
2. O. O. Chumak, E. V. Stolyarov, Photon distribution function for propagation of two-photon pulses in waveguide-qubit systems, [Phys. Rev. A **90**, 063832 \(2014\)](#).
3. E. V. Stolyarov, Few-photon Fock-state wave packet interacting with a cavity-atom system in a waveguide: Exact quantum state dynamics, [Phys. Rev. A **99**, 023857 \(2019\)](#).
4. A. M. Sokolov, E. V. Stolyarov, Single-photon limit of dispersive readout of a qubit with a photodetector, [Phys. Rev. A **101**, 042306 \(2020\)](#).
5. E. V. Stolyarov, A. J. White, and D. Mozyrsky, Mixed quantum–classical approach to model non-adiabatic electron–nuclear dynamics: Detailed balance and improved surface hopping method, [J. Chem. Phys. **153**, 074116 \(2020\)](#).

Тези конференцій:

6. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Operator of photon phase-space density for optical pulse propagation in nonlinear optical fibers, International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics ICYS LTP2012 (14-18 May 2012, Kharkiv, Ukraine), Conference programme and Abstracts book, p. 112.
7. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Evolution of single-photon pulses in one-

- dimensional optical waveguide coupled to a single quantum impurity, 13-th International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO2012 (25-28 October 2012, Kyiv, Ukraine), Book of abstracts, p. 118.
8. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Evolution of single-photon pulses in one-dimensional photonic-crystal waveguide with quantum impurity, IV Young Scientists Conference Modern Problems of Theoretical Physics (23-26 October 2012, Kyiv, Ukraine), Program & Abstracts Book, p. 91.
 9. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, The effect of quantum impurity on propagation of single-photon pulses through one-dimensional optical waveguide, XIII Kharkiv Young Scientists Conference on Radiophysics, Electronics, Photonics and Biophysics (4–7 Decemeber 2012, Kharkiv, Ukraine), Conference Proceedings CD-ROM.
 10. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Phase-space evolution of coherent-state optical pulses in a one-dimensional waveguide coupled to a qubit, IV International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics ICYS LTP2013 (3-7 June 2013, Kharkiv, Ukraine), Abstracts book, p. 69.

ABSTRACT

Stolyarov E. V. Photon transport in one-dimensional waveguides and non-adiabatic molecular dynamics. — Manuscript.

Thesis for the Candidate of Science in Physics and Mathematics (Doctor of Philosophy) degree in speciality 01.04.05 — optics, laser physics. — Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2020.

The thesis concerns the dynamics of scattering of photonic and nuclear wave packets on quantum emitters in one-dimensional waveguides and crossings of potential energy surfaces in molecular systems.

The interaction of the coherent-state wave packet with a two-level atom (qubit) in a one-dimensional waveguide is studied. The evolution equation for the qubit excited state population is derived. It is demonstrated that the qubit excitation depends on the average photon number in the ingoing pulse. Statistics of the radiation scattered off the qubit is studied. It is found that for a large number of photons in the ingoing pulse, the transmitted radiation is described by the superpoissonian statistics, while the reflected radiation can feature either sub- or superpoissonian statistics depending on the coupling strength between the qubit and the waveguide.

The photon density distribution function in phase (coordinate-momentum) space is used for the description of the scattering of single- and two-photon wave packets on a qubit. This operator function is analogous to the classical microscopic distribution function in statistical physics. It is demonstrated that the average phase-space distribution function of the scattered single-photon wave packet acquires negative values in specific regions of phase space even in the case of the positive initial distribution. Analytical expressions for spatial and momentum-space (spectral) distributions of the scattered photons are derived. The spectrum of the reflected radiation is shown to be narrower than that of the transmitted radiation. Therefore, the qubit acts

as a spectral filter for the ingoing photonic wave packets.

In the case of the two-photon ingoing wavepacket constituted by a pair of identical spatially-separated single-photon pulses, the equations of motion governing the evolution of the photon phase-space distribution function are derived and solved numerically. It is demonstrated that for the two-photon ingoing wave packet, the regions of negative values of the photon distribution function emerge only for specific values of the qubit-waveguide coupling and the distance between the single-photon components of the ingoing pulse. It is shown that the average number of scattered photons and its variance depends not only on the qubit-waveguide coupling strength and the distance between the single-photon ingoing pulses but also on the bandwidth of the latter.

The time-dependent wavefunction of the system is employed for the description of the two-photon wave packet evolution in a one-dimensional waveguide coupled to a resonator-qubit system. The set of equations of motion governing the probability amplitudes, which describe the quantum state of the system, is derived and solved both analytically and numerically. This allows investigating a modification of the spectrum of the wave packet in the course of its interaction with the resonator-qubit system as well as the excitation dynamics of the latter. It is demonstrated that the probability of finding two excitations in the resonator-qubit system is significantly reduced compared to the case of the resonator uncoupled from the qubit. This indicates the photon blockade in this subsystem. It is shown that the spectrum of the wave packet scattered from the resonator-qubit system is different from the spectrum of the ingoing wave packet. Using the Schmidt decomposition, it is shown that the scattered photons are entangled in contrast to the separable state of the ingoing photons.

Dispersive readout of the qubit state using the photodetector in the ultimate limit of the single-photon probe pulse is considered. The use of single-photon states allows one to avoid readout errors arising due to the

non-orthogonality of coherent states, which are routinely used for readout. Coupling between the qubit and the resonator is described by the Rabi Hamiltonian. Fast-oscillating terms in the qubit-resonator coupling Hamiltonian are treated as a perturbation. They are eliminated using the unitary transformation resulting in the Bloch-Siegert shift in the resonator frequency. It is demonstrated that this shift could be used for the improvement of the readout efficiency. The evolution equations for the operators and the wavefunction were used for the description of the system dynamics.

Modeling the non-adiabatic processes in molecular systems is a requisite tool for the theoretical study of various photoinduced processes such as exciton localization, charge transfer in photosynthetic complexes and photovoltaic systems. The effective Hamiltonian, describing transitions between electronic adiabatic levels and quantum fluctuations along the classical nuclear trajectories, is introduced. The evolution equations governing the electronic occupation numbers and the nuclear degrees of freedom were derived using this Hamiltonian and the density operator formalism. It is shown that these equations become Markovian in the case of strong decoherence. Equations of motion for the electronic occupations were studied in the non-Markovian regime as well. The algorithm for modeling the non-adiabatic molecular dynamics is implemented using the proposed theoretical approach.

Key words: waveguide quantum electrodynamics, two-level atom, qubit, Jaynes-Cummings model, entangled states, non-adiabatic molecular dynamics, adiabatic states, detailed balance.

Applicant's publications:

Articles:

1. O. O. Chumak, E. V. Stolyarov, Phase-space distribution functions for photon propagation in waveguides coupled to a qubit, [Phys. Rev. A **88**, 013855 \(2013\)](#).
2. O. O. Chumak, E. V. Stolyarov, Photon distribution function for propagation of two-photon pulses in waveguide-qubit systems, [Phys. Rev. A **90**, 063832 \(2014\)](#).
3. E. V. Stolyarov, Few-photon Fock-state wave packet interacting with a cavity-atom system in a waveguide: Exact quantum state dynamics, [Phys. Rev. A **99**, 023857 \(2019\)](#).
4. A. M. Sokolov, E. V. Stolyarov, Single-photon limit of dispersive readout of a qubit with a photodetector, [Phys. Rev. A **101**, 042306 \(2020\)](#).
5. E. V. Stolyarov, A. J. White, and D. Mozyrsky, Mixed quantum–classical approach to model non-adiabatic electron–nuclear dynamics: Detailed balance and improved surface hopping method, [J. Chem. Phys. **153**, 074116 \(2020\)](#).

Conference abstracts:

6. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Operator of photon phase-space density for optical pulse propagation in nonlinear optical fibers, International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics ICYS LTP2012 (14-18 May 2012, Kharkiv, Ukraine), Conference programme and Abstracts book, p. 112.
7. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Evolution of single-photon pulses in one-dimensional optical waveguide coupled to a single quantum impurity, 13-th International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO2012 (25-28 October 2012, Kyiv, Ukraine), Book of abstracts, p. 118.

8. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Evolution of single-photon pulses in one-dimensional photonic-crystal waveguide with quantum impurity, IV Young Scientists Conference Modern Problems of Theoretical Physics (23-26 October 2012, Kyiv, Ukraine), Program & Abstracts Book, p. 91.
9. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, The effect of quantum impurity on propagation of single-photon pulses through one-dimensional optical waveguide, XIII Kharkiv Young Scientists Conference on Radiophysics, Electronics, Photonics and Biophysics (4–7 Decemeber 2012, Kharkiv, Ukraine), Conference Proceedings CD-ROM.
10. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Phase-space evolution of coherent-state optical pulses in a one-dimensional waveguide coupled to a qubit, IV International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics ICYS LTP2013 (3-7 June 2013, Kharkiv, Ukraine), Abstracts book, p. 69.

ЗМІСТ

Вступ	16
Розділ 1 Дворівневий атом у одновимірному хвилеводі	24
1.1 Вступ	24
1.2 Реалізації квантової електродинаміки у хвилеводі	25
1.3 Гамільтоніан системи	28
1.4 Рівняння еволюції операторів системи	32
1.4.1 Рівняння руху для фотонних змінних	32
1.4.2 Рівняння еволюції атомних операторів	33
1.5 Взаємодія кубіта з хвильовим пакетом у когерентному стані	34
1.5.1 Динаміка збудження кубіта	35
1.5.2 Просторова густина випромінювання	38
1.5.3 Середня кількість фотонів, що розсіялись	40
1.5.4 Статистичні властивості фотонів, що розсіялись	42
1.6 Висновки	46
Розділ 2 Розсіяння одно- та двофотонних хвильових пакетів на кубіті: підхід функції розподілу в фазовому просторі	47
2.1 Вступ	47
2.2 Функція розподілу густини фотонів у фазовому просторі . .	48
2.3 Розсіяння однофотонного імпульсу на кубіті	50
2.4 Розсіяння двофотонного імпульсу на кубіті	56
2.4.1 Динаміка кубіта	58
2.4.2 Еволюція хвильового пакету у фазовому просторі . .	60
2.4.3 Просторова густина та спектр розсіяних фотонів . . .	65

2.4.4	Статистика фотонів	67
2.5	Висновки	70
Розділ 3 Розсіяння фоківських станів на системі резонатор–кубіт		72
3.1	Вступ	72
3.2	Гамільтоніан моделі та рівняння руху операторів	75
3.3	Однофотонна задача	78
3.4	Двофотонна задача	81
3.4.1	Хвильова функція системи	81
3.4.2	Рівняння еволюції стану системи	83
3.5	Динаміка системи резонатор–кубіт	86
3.6	Розсіяний двофотонний стан	89
3.7	Спектр розсіяних фотонів	92
3.8	Утворення заплутаних станів фотонів	95
3.9	Висновки	98
Розділ 4 Однофотонне дисперсне зчитування кубіта		100
4.1	Вступ	100
4.2	Дисперсне зчитування: фізичний принцип	102
4.3	Схема однофотонного зчитування з фотодетектором	103
4.4	Гамільтоніан системи та рівняння Гайзенберга	104
4.4.1	Перетворення модельного гамільтоніану	106
4.4.2	Рівняння руху операторів	109
4.5	Контраст зчитування	111
4.6	Вплив парселлівської релаксації на контраст зчитування	113
4.6.1	Кубіт приготований в основному стані	114
4.6.2	Кубіт приготований у збудженому стані	116
4.6.3	Динаміка населеності кубіта	120
4.7	Результати	120

4.8	Висновки	123
Розділ 5 Квантово-класичний підхід для моделювання неа-		
	діабітичної електронно-ядерної динаміки	125
5.1	Вступ	125
5.2	Ефективний молекулярний гамільтоніан	126
5.3	Рівняння еволюції населеностей адіабатичних станів	131
5.3.1	Гауссове наближення	133
5.4	Детальний баланс	142
5.5	Динаміка ядер	143
5.6	Алгоритм	145
5.7	Результати	148
5.8	Висновки	152
	Висновки	153
	Додаток А Виведення розв’язків рівнянь руху амплітуд ймо-	
	вірностей	155
A.1	Однофотонна задача	155
A.2	Двофотонна задача	156
	Додаток Б Деякі деталі числового розв’язку рівнянь руху	
	та обчислення контрасту	160
	Додаток В Розклад множника $\mathcal{D}(t; \tau)$	161
	Додаток Г Тестові задачі Таллі	163
	Список використаних джерел	165
	Публікації здобувача за темою дисертації	185

ВСТУП

Актуальність теми. Розуміння процесів взаємодії світла та матерії на квантовому рівні є вкрай важливим для багатьох сфер досліджень, таких як нанофотоніка, квантові обчислення та квантова криптографія, а також лазерна спектроскопія, фотофізика та фотохімія. Сучасний рівень технологій дає змогу працювати зі світлом та матерією на рівні одиночних фотонів та окремих квантових випромінювачів. Такими випромінювачами можуть бути окремі атоми та молекули, центри забарвлення в кристалах, а також атомоподібні (*atom-like*) системи, такі як напівпровідникові квантові точки та штучні атоми на контактах Джозефсона.

Фотони можуть використовуватись для обміну квантовою інформацією між вузлами квантових мереж, в яких ця інформація може або зберігатись, або оброблятись та передаватись на інші вузли [1]. Вузли з'єднуються хвилеводами (мікрохвильовими чи оптичними), які забезпечують обмін фотонами у квантовій мережі майже без втрат. У хвилеводах випромінювання локалізується в поперечній (до напрямку поширення) площині, формуючи ефективний (квазі)-одновимірний електромагнітний континуум для фотонів, що поширюються. Завдяки ефекту Парселла [2], в такому модифікованому електромагнітному оточенні посилюється взаємодія між світлом та матерією [3]. Сильна взаємодія між світлом та квантовими випромінювачами дає змогу здійснювати швидку та точну передачу квантового стану між полем та випромінювачем, що є важливим для реалізації одно- та багатобітних квантових логічних операцій [11]. Стрімкий прогрес у створенні та контролі різноманітних хвицеводних систем [3] та експериментальна демонстрація детерміністичних джерел одно- та багатофотонних станів у мікрохвильовому [4, 5, 6, 7] та оптичному [8, 9, 10] спектральних діапазонах

вказують на перспективність хвилеводних систем як апаратної платформи. На цій платформі можна створювати і окремі пристрої, і комплексні системи квантової обробки інформації. Такий технологічний поступ стимулює теоретичні дослідження хвилеводних систем та можливих напрямів їхнього застосування. Наприклад, запропоновано декілька архітектур для реалізації універсальних квантових обчислень [12, 13] на базі хвилеводних систем. До того ж, вивчення фотонного транспорту в хвилеводах з квантовими випромінювачами має ще й фундаментальний аспект, оскільки такі системи є прикладом систем з сильними міжчастинковими кореляціями. Завдяки (квазі)-одновимірній геометрії та посиленню взаємодії між фотонами та випромінювачами з'являються сильні міжфотонні кореляції. Ці кореляції спричиняють утворення заплутаних (*entangled*) [14, 15] та зв'язаних [16, 17, 18] фотонних станів, генерацію суб- та суперпуассонівського світла [19, 20, 21, 22] та багатофотонних станів [23, 24, 25]. Останніми роками сформувався новий напрям квантової оптики – *квантова електродинаміка в хвилеводі* (*waveguide quantum electrodynamics*) [3], який охоплює широкий спектр задач, пов'язаних із взаємодією світла та квантових випромінювачів у одновимірних хвилеводах.

Для вивчення фотофізичних та фотохімічних процесів [26, 27], а також багатьох задач лазерної спектроскопії та матеріалознавства [28, 29] вкрай важливим є наявність ефективних методів симуляції неадіабатичної динаміки в молекулярних системах. Зазвичай для опису *ab initio* молекулярної динаміки використовують наближення Борна-Оппенгаймера [30]. Суть цього наближення полягає в тому, що завдяки суттєвій різниці в масах ядер та електронів, їхня динаміка може розглядатись окремо. Однак у фотоіндукованих процесах, таких як, наприклад, перенос енергії та заряду в фотосинтетичних комплексах та в системах фотовольтаїки [26, 27, 29, 31], стани ядер та електронів можуть стати заплутаними. Тоді наближення Борна-Оппенгаймера перестає працювати і необхідно використовувати точніші

методи для опису *неадиабатичної електронно-ядерної динаміки* в молекулярних системах [32, 33]. Використання повністю квантових підходів для моделювання систем, що складаються з великої кількості частинок (наприклад, органічних молекул) потребує значних обчислювальних ресурсів і в багатьох випадках практично неможливе. Тому для моделювання молекулярних систем використовують змішані квантово-класичні (*quantum-classical*) підходи [33, 34, 35]. Основна ідея цих методів полягає у тому, що еволюція ядерних ступенів вільності описується класичними (ньютонівськими) рівняннями руху. Динаміка електронної підсистеми описується квантовомеханічно, наприклад, методами залежного від часу функціоналу густини [36].

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Робота виконувалась у відділі теоретичної фізики Інституту фізики НАН України. Дослідження, які складають основний зміст дисертації, виконувались у рамках таких бюджетних тем:

- 1.4.1. ВЦ/138 «Нанофізика квантоворозмірних та низьковимірних структур, у тому числі на поверхні твердого тіла, в металоорганічних, полімерних та рідкокристалічних системах, молекулярна наноелектроніка» (№ держ. реєст. 0107U002165);
- 1.4.1. В/133 «Оптичні та транспортні властивості нелінійних і просторово обмежених систем» (№ держ. реєст. 0107U002349);
- 1.4. В/161 «Явища переносу і дисипації в нелінійних та обмежених середовищах» (№ держ. реєст. 0112U003150);
- 1.4. ВЦ/156 «Дослідження конденсованих систем на нанометровому рівні з метою з'ясування розмірних фізичних ефектів, розроблення фізичних основ нових електронних і іонних технологій» (№ держ. реєст. 0112U002509);
- 1.4. В/183 «Релаксаційні та розмірні явища в лінійних та нелінійних

середовищах» (№ держ. реєст. 0117U002613);

- 1.4. ВЦ/188 «Фундаментальні процеси, що визначають властивості новітніх фізичних об'єктів та матеріалів для електроніки, оптоелектроніки, фотоніки та спінтроніки» (№ держ. реєст. 0117U002612);

Мета і завдання дослідження. Мета дослідження полягала у вивченні взаємодії фотонних хвильових пакетів з локалізованими квантовими випромінювачами, такими як дворівневий атом (кубіт) та система резонатор-кубіт, в одновимірному електромагнітному середовищі, яке реалізуються у хвилеводах. Ще одна з основних цілей роботи полягала в побудові нового теоретичного підходу для опису електронно-ядерної динаміки в молекулярних системах, який послідовно враховував би кореляційні ефекти та явище декогеренції. *Завдання дослідження* полягало у виведенні рівнянь еволюції стану системи, розробці числових алгоритмів та проведенні симуляцій, які б дали вичерпну інформацію щодо динаміки розсіяння хвильових пакетів (фотонних чи ядерних) на квантових випромінювачах в одновимірній геометрії чи у випадку перетину ізоенергетичних поверхонь у молекулярних системах.

Об'єктами дослідження є: фотонні хвильові пакети, що поширюються в одновимірних хвилеводах; локалізовані квантові випромінювачі (дворівневий атом чи система резонатор-кубіт), що взаємодіють зі світлом в одновимірному хвилеводі; локалізовані ядерні хвильові пакети, еволюція яких визначається ізоенергетичними поверхнями відповідних молекулярних систем; електронні адіабатичні рівні.

Предметом дослідження є: 1) просторові, спектральні, та статистичні характеристики електромагнітного випромінювання, яке розсіюється на випромінювачах у одновимірних хвилеводах; 2) еволюція стану випромінювача під час взаємодії з фотонним хвильовим пакетом; 3) просторова та часова еволюція ядерних хвильових пакетів та часова динаміка насе-

ностей адіабатичних електронних рівнів у молекулярних системах.

Методи дослідження. Робота має теоретичний характер. В ній використовувались як аналітичні, так і числові методи розрахунків. Для аналітичного розв'язку більшості систем звичайних диференціальних рівнянь, які зустрічаються в роботі, використовувався метод інтегрального перетворення Лапласа. Розв'язок деяких диференціальних рівнянь здійснювався за допомогою числових методів таких як метод Ейлера та сімейство методів Рунге-Кутти.

Взаємодія атома з полем описується за допомогою гамільтоніанів Рабі та Джейнса-Каммінґса. Наближена діагоналізація гамільтоніанів здійснюється використовуючи метод унітарних перетворень типу Шріффера-Вольфа. Для опису еволюції просторово-часових та спектральних характеристик світла використовуються підходи рівнянь Гайзенберга та функції розподілу фотонів у (фазовому) координатно-імпульсному просторі.

Неадіабатична динаміка молекул досліджується за допомогою змішаного квантово-класичний підходу, в якому електронні переходи описуються використовуючи формалізм оператора густини, а рух ядер по ізоенергетичним поверхням описується класичними рівняннями руху.

Наукова новизна отриманих результатів. В дисертаційній роботі представлені такі нові результати:

1. При розсіянні хвильового пакету в когерентному стані на одиночному дворівневому атомі (кубіті) в одновимірному хвилеводі, продемонстровано переходи між суб- та супер-пуассонівською статистикою випромінювання, що відбилось від атома, в залежності від середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі та параметра зв'язку між атомом та модою хвилевода.
2. Показано, що після розсіяння фотона на одиночному дворівневому атомі (кубіті), фотонна функція розподілу в координатно-імпульсному (фазо-

вому) просторі (скрізь позитивна в початковий момент часу) набуває від'ємних значень. Така поведінка є проявом кореляції між станами поля та кубіта.

3. Для опису процесу розсіяння фоківських станів на системі резонатор-кубіт у хіральному (однонаправленому) хвилеводі отримані точні аналітичні вирази амплітуд ймовірностей, які описують еволюцію повного квантового стану системи хвилевід-резонатор-атом у випадку одно- та двофотонного вхідного хвильового пакету. Також отримано асимптотичні (довгочасові) розв'язки.
4. Показано, що при збудженні системи резонатор-атом однофотонним хвильовим пакетом, спектр вихідного випромінювання ідентичний спектру вхідного, тоді як у випадку вхідного хвильового пакету у двофотонному фоківському стані спектр випромінювання модифікується в результаті розсіяння на системі резонатор-атом.
5. Показано, що пара фотонів, що розсіялась на системі резонатор-атом, знаходиться в частотно-заплутаному (*frequency-entangled*) стані.
6. Продемонстровано переваги та фундаментальні обмеження дисперсного зчитування кубіта вимірюючим сигналом у однофотонному стані.
7. Показано, що зсув Блоха-Зіґерта частоти резонатора можна використати для збільшення контрасту зчитування кубіта.
8. Використовуючи формалізм оператора густини, побудовано новий підхід до опису корельованої електронно-ядерної динаміки.
9. Запропоновано модифікацію алгоритму «стрибків поверхонь із найменшою кількістю перемикачів» (*fewest switches surface hopping, FSSH*) для моделювання неадіабатичної молекулярної динаміки та продемонстровано його ефективність на наборі тестових задач *J. C. Tully*.

Практичне значення отриманих результатів. Продемонстроване в роботі явище модифікації спектру та індуковане частотне заплуту-

вання фотонів, що розсіялись на локалізованому випромінювачі в одновимірному хвилеводі, може використовуватись для створення спектральних фільтрів, частотних конверторів, та джерел пар частотно-заплутаних фотонів (біфотонів) з регульованими характеристиками.

Новий алгоритм моделювання неадіабатичної електронно-ядерної динаміки, представлений в цій роботі, в поєднанні з вже існуючими програмними пакетами для розрахунку електронних станів молекул, можна використати для моделювання фотоіндукованих процесів у складних молекулах та молекулярних комплексах. Такі симуляції можуть виявити нові шляхи покращення ефективності фотоелементів та надати нову інформацію щодо процесів у фотосинтетичних комплексах.

Особистий внесок здобувача. Результати, які складають основний зміст дисертації, опубліковані в статтях [20, 21, 15, 37, 38]. Робота [15] опублікована без співавторів. Статті [20, 21, 37, 38] опубліковані в співавторстві. В них дисертант брав безпосередню участь у постановці задач, розробці методів їхнього розв'язку, проведенні розрахунків, обговоренні та інтерпретації результатів, та написанні статей. Усі результати чисельних розрахунків у роботах [20, 21] та аналітичних розрахунків у статті [21] отримані автором. В статті [37] автор отримав усі чисельні та аналітичні результати, які стосуються моделі, що враховує парселівський розпад кубіта. В роботі [38] автор програмно реалізував запропонований алгоритм, отримав усі чисельні результати та зробив частину викладок. Автор запропонував використати розклад Шмідта для апроксимації інтегро-диференціального рівняння системою диференціальних рівнянь, що значно прискорило розрахунки.

Апробація матеріалів дисертації. Матеріали роботи доповідались на наукових семінарах відділу теоретичної фізики Інституту фізики НАН України, 39-й Підсумковій науковій конференції Інституту фізики НАН

України (2014 р.), та міжнародних конференціях:

- International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics (ICYS LTP2012), 14–18 May 2012, Kharkiv, Ukraine.
- 13-th International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science (SPO2012), 25–28 October 2012, Kyiv, Ukraine;
- 3-rd Young Scientists Conference Modern Problems of Theoretical Physics, 23–26 October 2012, Kyiv, Ukraine.
- 13-th Kharkiv Young Scientists Conference on Radiophysics, Electronics, Photonics and Biophysics, 4–7 December 2012, Kharkiv, Ukraine.
- 3-rd International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics (ICYS LTP2013), 3–7 June 2013, Kharkiv, Ukraine.
- International School & Conference on Nanoscience and Quantum Transport (nanoQT-2016), 8–14 October 2016, Kyiv, Ukraine.
- APS March Meeting 2020, 2–6 March 2020, Denver, USA.

Структура дисертації. Дисертація складається із анотації, вступу, п'яти розділів основної частини, висновків, чотирьох додатків, переліку посилань, та додатку з переліком публікацій автора. Основна частина дисертації містить 29 рисунків та 1 таблицю. Загальний обсяг роботи становить 195 сторінок. Кожен із розділів дисертації складається зі вступу, основної частини, в якій викладено результати, та висновків. В Розділі 1 представлено результати, опубліковані в статті [20]. Розділ 2 містить результати, опубліковані в статтях [20] та [21]. Результати, представлені в Розділі 3, опубліковані в роботі [15]. Розділ 4 ґрунтується на частині результатів, опублікованих у статті [37] (Частина VII та Додаток С). Зміст Розділу 5 складають результати, опубліковані в статті [38].

РОЗДІЛ 1

ДВОРІВНЕВИЙ АТОМ У ОДНОВИМІРНОМУ ХВИЛЕВОДІ

1.1 Вступ

Завдяки своїй гранично можливій швидкості поширення та нехтовно малій взаємодії один з одним¹, фотони розглядаються в ролі переносників квантової інформації, чи *мобільних кубітів* (*flying qubits*), між віддаленими вузлами в квантових мережах [1]. Хвилеводні структури можна використовувати як квантові канали, оскільки вони здатні забезпечити передачу сигналів на великі відстані майже без втрат. Завдяки поперечній локалізації електромагнітного випромінювання, у хвилеводах посилюється взаємодія між світлом та випромінювачами, наприклад, квантовими точками чи штучними атомами на джозефсонівських контактах. Квазіодновимір-на геометрія системи також призводить до інтерференції між полем, яке збуджує випромінювач, та полем яке цей об'єкт перевипромінює. В роботах [39, 40] теоретично продемонстровано, що в одновимірному хвилеводі квантовий випромінювач, наприклад, дворівневий атом, залежно від його параметрів, може або пропускати, або ж повністю відбивати вхідний фотон. Завдяки цьому, система хвилевід–атом розглядається як базовий елемент для створення різноманітних пристроїв призначених для когерентного контролю поширення випромінювання, таких як, наприклад, оптичні діоди та транзистори [41], однофотонні перемикачі [42, 43] та роутери [44, 45, 46]. Ці пристрої є важливими компонентами для побудови систем квантової обробки інформації.

¹ Фотон-фотонне розсіяння експериментально спостерігалось лише для високоенергетичних фотонів (γ -квантів). Для фотонів оптичних чи нижчих частот такі процеси не спостерігались.

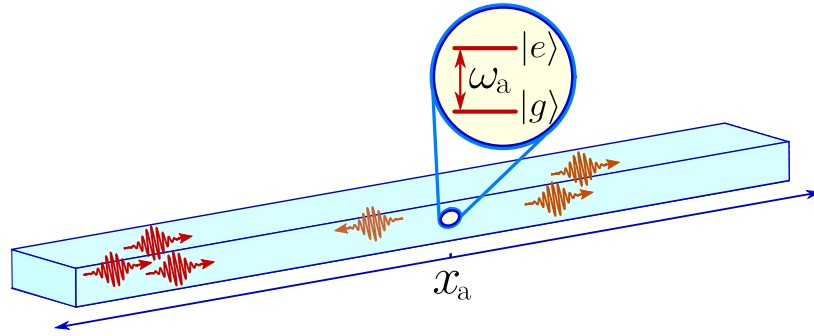


Рис. 1.1. Схематичне зображення системи одновимірний хвилевід-дворівневий атом (кубіт).

Вивчення взаємодії світла з квантовими випромінювачами в одновимірному електромагнітному оточенні почнемо з розгляду найпростішої модельної системи – дворівневого атома (кубіта), який взаємодіє з електромагнітним полем, що поширюється в одновимірному хвилеводі. Основний та збуджений стани атома позначатимемо, відповідно, як $|g\rangle$ та $|e\rangle$. Схематичне зображення системи хвилевід-кубіт показано на Рис. 1.1.

1.2 Реалізації квантової електродинаміки у хвилеводі

Квантова електродинаміка у хвилеводі, зокрема система хвилевід-кубіт, яка розглядатиметься у цьому та наступному розділах, може реалізовуватись у низці фізичних систем, наприклад, таких як мікрохвильові трансмісійні лінії [47], фотоннокристалічні хвилеводи [48], та оптичні нановолокна [49]. Перелік основних платформ для реалізації квантової електродинаміки у хвилеводі представлений у Таблиці 1.1. У цій таблиці для кожної системи також наведені типові діапазони значень фактора Парселла (*Purcell factor*) досягнуті в експерименті. Фактор Парселла $P = \Gamma/\Gamma_{ng}$ – це відношення швидкості релаксації збудженого стану випромінювача Γ за рахунок спонтанного випромінювання у хвилевід та швидкості релаксації Γ_{ng} у інші (нехвилеводні) канали, наприклад, розсіювання у вільний простір або поглинання в матеріалі. При $P \gg 1$, обмін збудженнями між модою хвилеводу та

Таблиця 1.1

**Приклади експериментальних реалізацій квантової
електродинаміки у хвилеводах.**

Тип хвилевода	Випромінювач	P
оптичне нановолокно	холодні атоми [50, 51]	~ 0.1
фотоннокристалічний хвилевід	напівпровідникові квантові точки [52, 53]	$\sim 1 - 50$
трансмісійна лінія	надпровідні атоми [54, 55]	$\sim 10 - 10^2$

випромінювачем домінує над процесами поглинання та розсіяння випромінювання у нехвильоводні моди. Коротко розглянемо особливості зазначених вище фізичних систем.

Мікрохвильові трансмісійні лінії. Однією з найбільш перспективних архітектур для реалізації квантової електродинаміки у хвилеводі є мікрохвильові надпровідні електричні кола [47]. Мікрохвильові трансмісійні лінії діють як хвилеводи, а квантові випромінювачі представлені штучними атомами, які є квантовими електричними колами з джозефсонівськими контактами [56]. Джозефсонівський контакт є нелінійним елементом, що додає ангармонізм енергетичному спектру системи. Ангармонізм потрібен для створення дворівневих систем (кубітів), які є базовим елементом квантового комп'ютера. Важливою особливістю надпровідних систем є можливість динамічного контролю параметрів системи, таких як частоти переходів штучних атомів та константи зв'язків. До того ж, можна створювати випромінювачі зі структурою енергетичних рівнів та переходів, які неможливі у реальних атомів. В останнє десятиліття в система на надпровідних квантових колах продемонстровано основні квантові алгоритми [57, 58, 59], протоколи квантової корекції помилок [60, 61, 62], а також «квантова перевага» (*quantum supremacy*) [63]. Поточний рівень технологій дає змогу

створювати складні системи з десятками кубітів розміщених на одному чіпі [64]. Ці системи можна використовувати для створення квантових симуляторів для вивчення, наприклад, поведінки багаточастинкових сильно корельованих систем [65, 66, 67] та калібрувальних полів [68, 69].

Фотоннокристалічні хвилеводи. Фотонні кристали – це структури, в яких показник заломлення змінюється в просторі періодично, що призводить до виникнення фотонних заборонених зон (*photonic bandgap*) [70]. Оптичний хвилевід можна створити у планарних фотоннокристалічних структурах, в які можна імплантувати напівпровідникові квантові точки [71] або центри забарвлення [72, 73]. Поблизу границі дозволеної фотонної зони групова швидкість фотонів в таких структурах зменшується. Такий режим поширення називається *повільне світло* (*slow light*) [74]. Зменшення групової швидкості фотонів призводить до посилення взаємодії світла з випромінювачами. Суттєвий прогрес у створенні фотоннокристалічних систем з квантовими точками та центрами забарвлення робить ці системи перспективною експериментальною платформою для створення компонентів для систем квантової обробки інформації.

Оптичні нановолокна. Оптичні нановолокна (*nanofibers*) є одним з типів оптичних волокон, в яких ділянка волокна витягнута та звужена до діаметру меншого за довжину хвилі світла [49]. Атоми, які знаходяться біля поверхні такого волокна можуть сильно взаємодіяти з еванесцентним (*evanescent*) полем моди нановолокна. Градієнт еванесцентного поля можна використати для створення оптичної пастки здатної утримувати атоми поблизу нановолокна [75]. В роботах [76, 77, 78] експериментально продемонстровані різноманітні схеми оптичного утримування атомів біля нановолокон. Ці методи відкривають нові шляхи для поєднання ансамблів ультрахолодних атомів та оптичних нановолокон. Такі системи можуть використовуватись, наприклад, для створення оптичної пам'яті [79].

1.3 Гамільтоніан системи

Система хвилевід–дворівневий атом моделюється таким гамільтоніаном [80]:

$$\hat{\mathcal{H}} = \overbrace{\hat{\mathcal{H}}_{\text{w}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{a}}}^{\hat{\mathcal{H}}_0} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{I}}. \quad (1.1)$$

Доданок $\hat{\mathcal{H}}_0$ описує вільну еволюцію системи, що складається з дворівневого атома (кубіта), який описується гамільтоніаном $\hat{\mathcal{H}}_{\text{a}}$, та одновимірного хвилевода, який описується гамільтоніаном $\hat{\mathcal{H}}_{\text{w}}$. Гамільтоніан кубіта записується як [81]

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{a}} = \hbar\omega_{\text{a}} \sigma_+ \sigma_-, \quad (1.2)$$

де ω_{a} – частота переходу між рівнями атома. Оператори $\sigma_+ = |e\rangle\langle g|$ та $\sigma_- = |g\rangle\langle e|$ є, відповідно, операторами підвищення (*raising*) та пониження (*lowering*) стану кубіта. Ці оператори виражаються через матриці (оператори) Паулі як $\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$ та $\sigma_+ \sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_z + 1)$.

Хвилевід моделюється континуумом незалежних бозонних мод, які описуються гамільтоніаном [81]

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{w}} = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} dp \omega_p b_p^{\dagger} b_p, \quad (1.3)$$

де b_p ($b_p^{\dagger}$) оператор знищення (народження) збудження (фотона) з хвильовим вектором p та частотою ω_p в хвилеводі. Цей оператор задовольняє комутаційним співвідношенням $[b_p, b_{p'}^{\dagger}] = \delta(p - p')$ та $[b_p, b_{p'}] = 0$.

Зв'язок між модами хвилеводу та кубітом описується гамільтоніаном дипольної взаємодії

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{I}} = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} dp g_p (b_p^{\dagger} e^{-ipx_{\text{a}}} + b_p e^{ipx_{\text{a}}}) (\sigma_- + \sigma_+), \quad (1.4)$$

де x_a – координата атома. Константа взаємодії між кубітом та полем хвильоводу g_p визначається як $g_p = d_{ge}\sqrt{\omega_p/(4\pi\hbar\epsilon_0 A)}$, де $d_{ge} = \langle g|\hat{\mathcal{D}}|e\rangle$ – матричний елемент електричного дипольного переходу кубіта, A – площа поперечного перерізу моди випромінювання. В подальшому, для скорочення запису, але не втрачаючи загальності розгляду, вважатимемо, що кубіт розташований в точці $x_a = 0$.

В загальному випадку, дисперсійне співвідношення ω_p залежить від конкретної фізичної реалізації хвильоводу та може бути нелінійним. Однак, теоретичний аналіз взаємодії фотонів з квантовими випромінювачами у хвильоводі спрощується, якщо зробити низку припущень. По-перше, зазвичай частота переходу атома ω_a та центральна частота збуджуючого імпульсу ω_0 є величинами одного порядку $\omega_a \sim \omega_0$. По-друге, спектральна ширина (*bandwidth*) γ_0 вхідного хвильового пакету, як правило, значно менша, ніж його центральна частота $\gamma_0 \ll \omega_0$. Тому, можна розглядати лише вузьку ділянку частот фотонів поблизу ω_0 та відповідні хвильові вектори поблизу $\pm p_0$, як схематично показано на Рис. 1.2. Отже, можемо записати *лінеаризоване* дисперсійне співвідношення [82]²:

$$\begin{aligned}\omega_{p \approx p_0} &\approx \omega_0 + v_g(p - p_0) \equiv \omega_p^l, \\ \omega_{p \approx p_0} &\approx \omega_0 - v_g(p - p_0) \equiv \omega_p^r.\end{aligned}\tag{1.5}$$

Моди з хвильовими векторами поблизу p_0 відповідають фотонам, які поширюються у хвильоводі зліва направо (*left-to-right*). Назвемо такі моди *l*-модами. Тоді як моди з хвильовими векторами поблизу $-p_0$, що відповідають поширенню фотонів справа наліво (*right-to-left*), назвемо *r*-модами. Гамільтоніан (1.3) можна апроксимувати як [82]

²Подібний прийом також широко використовується у фізиці конденсованих середовищ, наприклад, для опису збуджень у латтінжерівській рідині (*Luttinger liquid*) [83].

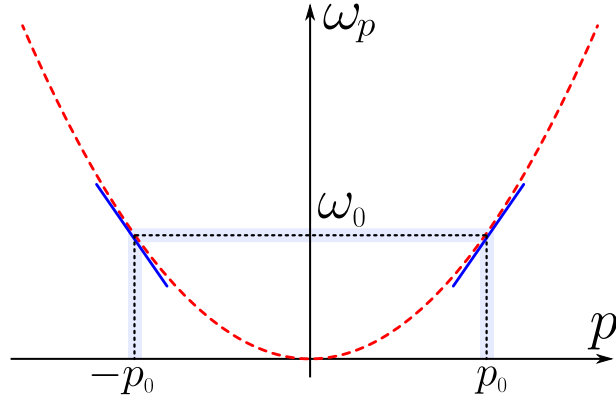


Рис. 1.2. Лінеаризація дисперсії хвильовода. Дисперсійне співвідношення хвильовода ω_p показано червоною штриховою лінією, сині суцільні лінії показують лінеаризовані дисперсійні співвідношення в околицях хвильових векторів $\pm p_0$, які відповідають частоті $\omega_0 = \omega_{\pm p_0}$.

$$\begin{aligned} \int dp \omega_p b_p^\dagger b_p &\approx \int_{p \approx p_0} dp \omega_p^l l_p^\dagger l_p, \\ \int dp \omega_p b_p^\dagger b_p &\approx \int_{p \approx -p_0} dp \omega_p^r r_p^\dagger r_p, \end{aligned} \quad (1.6)$$

де $\mu_p^\dagger$ (μ_p) – оператор народження (знищення) фотона з хвильовим вектором p в μ -моді ($\mu \in \{l, r\}$). Комутаційні співвідношення для цих операторів такі: $[\mu_p, \nu_{p'}^\dagger] = \delta(p - p')\delta_{\mu, \nu}$ та $[\mu_p, \nu_{p'}] = 0$, де $\mu, \nu \in \{l, r\}$.

Оскільки домінуючий внесок в інтеграли по хвильовим векторам в (1.6) дають лише вузькі смуги хвильових векторів поблизу $\pm p_0$, то межі інтегрування по хвильовим векторам в гамільтоніані можна розширити до $(-\infty, +\infty)$. Враховуючи ці міркування, гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}_w$ перепишеться у такому вигляді³

$$\hat{\mathcal{H}}_w = \int dp (\omega_p^l l_p^\dagger l_p + \omega_p^r r_p^\dagger r_p). \quad (1.7)$$

Використовуючи нові фотонні оператори, гамільтоніан взаємодії $\hat{\mathcal{H}}_I$ запи-

³Для спрощення запису далі в інтегралах по хвильовим векторам фотонів опускатимемо межі інтегрування $\int_{-\infty}^{\infty} dp \rightarrow \int dp$. Зазначимо також, що надалі вважатимемо $\hbar = 1$, а отже, імпульси та енергії вимірюватимуться, відповідно, в одиницях хвильового вектора та частоти.

шеться у вигляді

$$\hat{\mathcal{H}}_I = g \int dp [(l_p^\dagger + r_p^\dagger)\sigma_- + \sigma_+(l_p + r_p)] . \quad (1.8)$$

В цьому гамільтоніані зроблено наближення обертової хвилі (*rotating-wave approximation*) знехтувавши швидкоосцилюючими доданками $g(l_p^\dagger + r_p^\dagger)\sigma_+$ та $g(l_p + r_p)\sigma_-$. Це наближення працює за умови, коли частота кубіта ω_a близька до частоти збуджуючого випромінювання ω_0 , тобто $|\omega_a - \omega_0| \ll \omega_a + \omega_0$, та набагато більша за швидкість спонтанного випромінювання атома в хвилевід $\Gamma \ll \omega_a$.

Отже, повний гамільтоніан моделі має вигляд

$$\hat{\mathcal{H}} = \int dp \sum_{\mu=l,r} \omega_p^\mu \mu_p^\dagger \mu_p + \omega_a \sigma_+ \sigma_- + g \int dp \sum_{\mu=l,r} [\mu_p^\dagger \sigma_- + \sigma_+ \mu_p] . \quad (1.9)$$

Модельний гамільтоніан (1.9) зберігає кількість збуджень в системі, оскільки $[\hat{N}_{\text{ex}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$, де $\hat{N}_{\text{ex}}$ – оператор повної кількості збуджень в системі. Цей оператор визначається як $\hat{N}_{\text{ex}} = \int dp [l_p^\dagger l_p + r_p^\dagger r_p] + \sigma_+ \sigma_-$. Отже динаміка системи може еквівалентно описуватись таким гамільтоніаном

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &\rightarrow \hat{\mathcal{H}} - \omega_0 \hat{N}_{\text{ex}} \\ &= v_g \int dp p [l_p^\dagger l_p - r_p^\dagger r_p] + \Delta_a \sigma_+ \sigma_- \\ &\quad + g \int dp [(l_p^\dagger + r_p^\dagger)\sigma_- + \sigma_+(l_p + r_p)] , \end{aligned} \quad (1.10)$$

де $\Delta_a = \omega_a - \omega_0$.

1.4 Рівняння еволюції операторів системи

1.4.1 Рівняння руху для фотонних змінних

Гамільтоніан (1.10) породжує рівняння руху для фотонних операторів $l_p(t)$ та $r_p(t)$ такого виду:

$$(\partial_t + i v_g p) l_p = -i g \sigma_-, \quad (1.11a)$$

$$(\partial_t - i v_g p) r_p = -i g \sigma_-. \quad (1.11b)$$

Формальний розв'язок цієї пари рівнянь має вигляд

$$l_p(t) = \tilde{l}_p(t) - i g \int_{t_0}^t d\tau e^{-i v_g p(t-\tau)} \sigma_-(\tau), \quad (1.12a)$$

$$r_p(t) = \tilde{r}_p(t) - i g \int_{t_0}^t d\tau e^{i v_g p(t-\tau)} \sigma_-(\tau), \quad (1.12b)$$

де вважаємо, що $t > t_0$. Оператори $\tilde{l}_p$ та $\tilde{r}_p$ визначаються як

$$\tilde{l}_p(t) = l_p(t_0) e^{-i v_g p(t-t_0)}, \quad \tilde{r}_p(t) = r_p(t_0) e^{i v_g p(t-t_0)}. \quad (1.13)$$

Покажемо, що оператори $\tilde{l}_p(t)$ та $\tilde{r}_p(t)$ задовольняють таким комутаційним співвідношенням:

$$\left[\int dp \tilde{l}_p(t), \sigma_-(t') \right] = \left[\int dp \tilde{r}_p(t), \sigma_-(t') \right] = 0, \quad t \geq t'. \quad (1.14)$$

Використовуючи формальне представлення $\tilde{l}_p(t) = \tilde{l}_p(t') e^{-i v_g p(t-t')}$, одночасовий комутатор $[l_p, \sigma_-] = 0$ та рівняння (1.12a), отримуємо такий ре-

зультат

$$\begin{aligned}
\left[\int dp \tilde{l}_p(t), \sigma_-(t') \right] &= \int dp e^{-i v_g p (t-t')} [l_p(t'), \sigma_-(t')] \\
&+ i g \int dp e^{-i v_g p (t-t')} \int_0^{t'} d\tau e^{-i v_g p (t'-\tau)} [\sigma_-(\tau), \sigma_-(t')] \\
&= i g \int dp \int_0^{t'} d\tau e^{-i v_g p (t-\tau)} [\sigma_-(\tau), \sigma_-(t')] \\
&= i \frac{2\pi g}{v_g} [\sigma_-(t), \sigma_-(t')] \theta(t' - t),
\end{aligned} \tag{1.15}$$

де $\theta(t)$ – ступінчаста функція Гевісайда. Присутність θ -функції у останньому доданку в (1.14) показує, що вираз зліва дорівнює нулю при $t > t'$. При $t = t'$ маємо $[\sigma_-(t), \sigma_-(t')] = 0$, що доводить (1.14). Аналогічним чином отримаємо вираз

$$\left[\int dp \tilde{r}_p(t), \sigma_-(t') \right] = i \frac{2\pi g}{v_g} [\sigma_-(t), \sigma_-(t')] \theta(t' - t), \tag{1.16}$$

з якого випливає другий комутатор в (1.14).

1.4.2 Рівняння еволюції атомних операторів

Використовуючи гамільтоніан системи (1.10) отримаємо рівняння руху для оператора пониження стану кубіта σ_- :

$$(\partial_t + i \Delta_a) \sigma_- = i g \sigma_z \int dp (l_p + r_p). \tag{1.17}$$

Підстановка виразів (??) та (1.126) в праву частину цього рівняння дає такий результат

$$\left(\partial_t + i \Delta_a + \frac{\Gamma}{2} \right) \sigma_- = i g \sigma_z \beta, \tag{1.18}$$

де $\Gamma = 4\pi g^2/v_g$. В (1.18) введено новий оператор $\beta(t) = \int dp [\tilde{l}_p(t) + \tilde{r}_p(t)]$. Формальний розв'язок рівняння (1.18) записується як

$$\sigma_-(t) = \tilde{\sigma}_-(t) - ig \int_{t_0}^t d\tau e^{-(i\Delta_a + \Gamma/2)(t-\tau)} \sigma_z(\tau) \tilde{\beta}_p(\tau), \quad (1.19)$$

де $\tilde{\sigma}_-(t) = \sigma_-(t_0)e^{-(i\Delta_a + \Gamma/2)(t-t_0)}$. Оператор $\sigma_+\sigma_-$ задовольняє рівнянню руху такого виду

$$(\partial_t + \Gamma) \sigma_+\sigma_- = ig\beta^\dagger\sigma_- + \text{H. c.} \quad (1.20)$$

З цього рівняння явно видно, що параметр Γ – це швидкість спонтанного розпаду збудженого стану кубіта. Підстановка (1.19) в рівняння (1.20) дає

$$(\partial_t + \Gamma) \sigma_+\sigma_- = -g^2 \int_{t_0}^t d\tau \left[e^{(i\Delta_a - \Gamma/2)(t-\tau)} \beta^\dagger(\tau) \sigma_z(\tau) \beta(t) + \text{H. c.} \right]. \quad (1.21)$$

1.5 Взаємодія кубіта з хвильовим пакетом у когерентному стані

Розглянемо взаємодію кубіта, який у початковий момент часу t_0 знаходиться в основному стані, з оптичним імпульсом (хвильовим пакетом) у когерентному стані. Вважаємо, що в системі немає теплових збуджень. Таке припущення можна зробити, якщо виконується критерій $k_B T \ll \hbar\omega_a$, де T_s – температура системи, k_B – стала Больцмана.

Використовуючи означення *багатомодового когерентного стану* [85], початковий стан системи запишемо у такому вигляді

$$|\Psi\{\mathcal{A}\}\rangle = \exp \left\{ \int dp [\mathcal{A}_p l_p^\dagger(t_0) - \mathcal{A}_p^* l_p(t_0)] \right\} |\emptyset\rangle, \quad \mathcal{A}_p = \sqrt{N_0} \xi_p, \quad (1.22)$$

де N_0 – середня кількість фотонів у вхідному хвильовому пакеті, $|\emptyset\rangle =$

$|0\rangle_l|0\rangle_r|g\rangle$ – це стан системи без збуджень (вакуумним станом). Стан $|\Psi\{\mathcal{A}\}\rangle$ є власним станом оператора знищення фотона у l -моді хвилеводу

$$l_p(t_0)|\Psi\{\mathcal{A}\}\rangle = \mathcal{A}_p|\Psi\{\mathcal{A}\}\rangle. \quad (1.23)$$

Функція ξ_p є розподілом амплітуди ймовірності знаходження фотона з хвильовим вектором p . Цей розподіл також називають *спектральною функцією розподілу* (*spectral distribution function*) хвильового пакета [86]. Ми моделюємо спектральний розподіл вхідного імпульсу ξ_p гауссовою функцією

$$\xi_p = \sqrt{\frac{w^2}{\pi}} \exp\left(-\frac{w^2}{2}p^2 - ipx_0\right), \quad \int dp |\xi_p|^2 = 1, \quad (1.24)$$

де w – просторова ширина вхідного імпульсу, x_0 – початкова (в момент часу $t = t_0$) координата центру хвильового пакету. Вважатимемо, що $x_0 < 0$, тобто хвильовий пакет «налітає» на кубіт зліва, та $|x_0| \gg w$. Остання умова забезпечує те, що в початковий момент часу кубіт не «відчуває» вхідного імпульсу. Вважаємо, що спектральна ширина вхідного імпульсу $\gamma_0 \sim v_g/w$ задовольняє умову $\gamma_0 \ll \omega_0$, оскільки ця умова використовувалась для побудови гамільтоніану (1.9), яким описується динаміка системи.

1.5.1 Динаміка збудження кубіта

Усереднення рівняння (1.21) по початковому стану системи $|\Psi\{\mathcal{A}\}\rangle$ дає таке рівняння руху

$$(\partial_t + \Gamma)\langle\sigma_+\sigma_-\rangle = -2g^2N_0\Xi(t) \int_{t_0}^t d\tau Q(t-\tau)\Xi^*(\tau)\langle\sigma_z(\tau)\rangle, \quad (1.25)$$

де $Q(t) = \cos(\Delta_a t) e^{-\Gamma t/2}$. Функція $\Xi(t)$ визначається як

$$\Xi(t) = \int dp e^{-i v_g p t} \xi_p. \quad (1.26)$$

Для гауссового спектра (1.24) маємо

$$\Xi(t) = \sqrt[4]{\frac{4\pi}{w^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2w^2} [x_0 + v_g(t - t_0)]^2 \right\}. \quad (1.27)$$

Для виведення рівняння (1.25), використано властивість (1.23). Оскільки в початковий момент часу кубіт знаходився в основному стані, то початковою умовою для рівняння руху (1.25) є $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle|_{t_0} = 0$.

Розглянемо резонансний випадок $\Delta_a = 0$, коли частота кубіта збігається з центральною частотою хвильового пакету. У цьому режимі взаємодія між кубітом та полем хвилеводу найсильніша. При $\Delta_a = 0$, інтегродиференціальне рівняння (1.25) можна перетворити на диференціальне. Застосовуючи оператор $\mathcal{D}_t$ до обох частин рівняння (1.25), отримуємо такий результат

$$\mathcal{D}_t \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle = 2N_0 g^2 \Xi^2(t). \quad (1.28)$$

Диференціальний оператор $\mathcal{D}_t$ задається як

$$\mathcal{D}_t \equiv \partial_t^2 + \left[\frac{3\Gamma}{2} + \frac{t - t_e}{\tau_p^2} \right] \partial_t + \left[\frac{\Gamma^2}{2} + \Gamma \frac{t - t_e}{\tau_p^2} + 4N_0 g^2 \Xi^2(t) \right], \quad (1.29)$$

де $t_e = t_0 + |x_0|/v_g$ відповідає моменту часу, коли центр хвильового пакету досягає точки хвилеводу, в якій розташований кубіт, параметр $\tau_p = w/v_g$ — це тривалість вхідного імпульсу.

Якщо вхідний імпульс довгий, $\Gamma \tau_p \gg 1$, може реалізуватись квазістаціонарний режим збудження кубіта, який визначається як

$$\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_{\text{qs}} \approx \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\pi \Gamma}{2v_g N_0 \Xi^2(t)} \right]^{-1}. \quad (1.30)$$

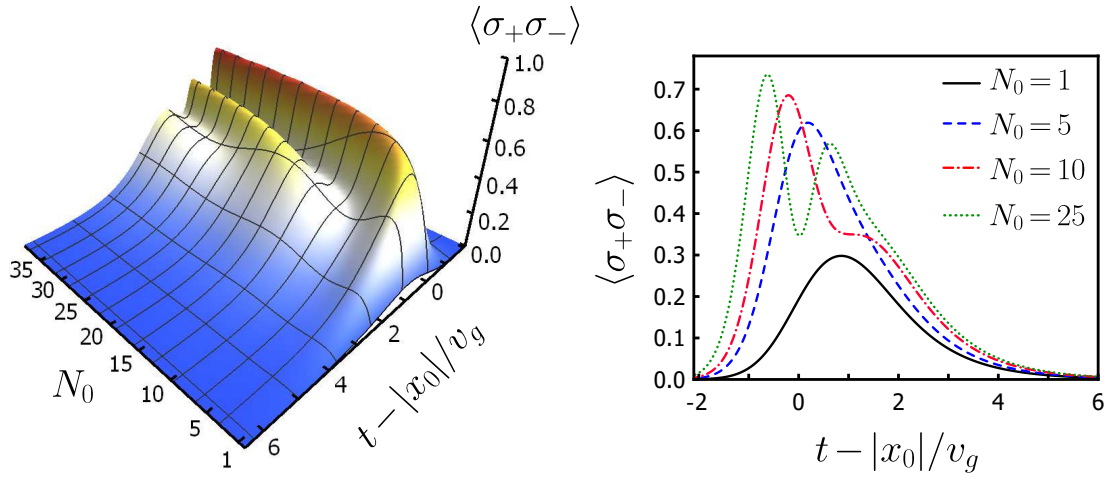


Рис. 1.3. Вплив середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі N_0 на динаміку населеності кубіта для $\Gamma\tau_p = 1$. Решта параметрів такі: $\Delta_a = 0$, $x_0/w = -10$. Час вимірюється в одиницях тривалості вхідного імпульсу τ_p .

З цього виразу випливає, що при інтенсивному збудженні кубіта, тобто при $v_g N_0 \Xi^2(t) \gg \Gamma$, маємо $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_{\text{qs}} \rightarrow 1/2$. Поблизу квазістаціонарного значення $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_{\text{qs}}$ є затухаючі коливання величини $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle$. Якщо представити населеність збудженого стану кубіта як $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle = \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_{\text{qs}} + \delta \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle$, то відхилення $\delta \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle$ від стаціонарного значення описується рівнянням (1.28), яке в граничному випадку довгих вхідних хвильових пакетів набуває такого виду

$$\tilde{\mathcal{D}}_t \delta \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle = 0, \quad (1.31)$$

де оператор $\tilde{\mathcal{D}}_t$ визначається як

$$\tilde{\mathcal{D}}_t \equiv \partial_t^2 + \frac{3\Gamma}{2} \partial_t + \left[\frac{\Gamma^2}{2} + 4N_0 g^2 \Xi^2(t) \right]. \quad (1.32)$$

Для довгих вхідних хвильових пакетів, залежністю функції $\Xi(t)$ від часу можна знехтувати $\Xi(t) \approx (\Xi = \text{const})$. У такому разі, можна представити розв'язок рівняння (1.31) у вигляді $\delta \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle \sim e^{\lambda t}$, що дає рівняння на λ такого виду

$$\lambda^2 + \frac{3\Gamma}{2} \lambda + 4N_0 g^2 \Xi^2 + \frac{\Gamma^2}{2} = 0. \quad (1.33)$$

Рівняння (1.33) показує, що осциляції населеності збудженого рівня кубіта $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle$ затухають зі швидкістю $\sim 3\Gamma/4$. Осцилюючий характер збудження кубіта при взаємодії з імпульсом у когерентному стані проілюстровано на Рис. 1.3, який демонструє залежність динаміки населеності кубіта від середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі. Обчислення демонструють, що осциляції населеності збудженого стану кубіта стають краще вираженими при збільшенні середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі.

1.5.2 Просторова густина випромінювання

Для аналізу еволюції просторової густини фотонів в процесі розсіяння на кубіті, введемо оператори $l(x, t)$ та $r(x, t)$, які є операторами знищення фотона в точці x в l - та r -моді, відповідно. Ці оператори визначаються як

$$\mu(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ipx} \mu_p(t), \quad \mu \in \{l, r\}, \quad (1.34)$$

та задовольняють комутаційному співвідношенню $[\mu(x), \mu^\dagger(x')] = \delta(x - x')$.

Підстановка виразів (1.12a) та (1.12б) в рівняння (1.34) дає такі результати

$$l(x, t) = \tilde{l}(x, t) - i\sqrt{2\pi} \frac{g}{v_g} \sigma_-(t - \frac{x}{v_g}) \theta(x) \theta(t - \frac{x}{v_g}), \quad (1.35a)$$

$$r(x, t) = \tilde{r}(x, t) - i\sqrt{2\pi} \frac{g}{v_g} \sigma_-(t + \frac{x}{v_g}) \theta(-x) \theta(t + \frac{x}{v_g}), \quad (1.35b)$$

де позначення $\tilde{\bullet}$ означає вільну еволюцію оператора $\bullet$. Просторова густина фотонів в μ -моді визначається як

$$\hat{\rho}_\mu(x, t) = \mu^\dagger(x, t) \mu(x, t), \quad \mu \in \{l, r\}. \quad (1.36)$$

Використовуючи вираз (1.35a), отримаємо таке рівняння для просторо-

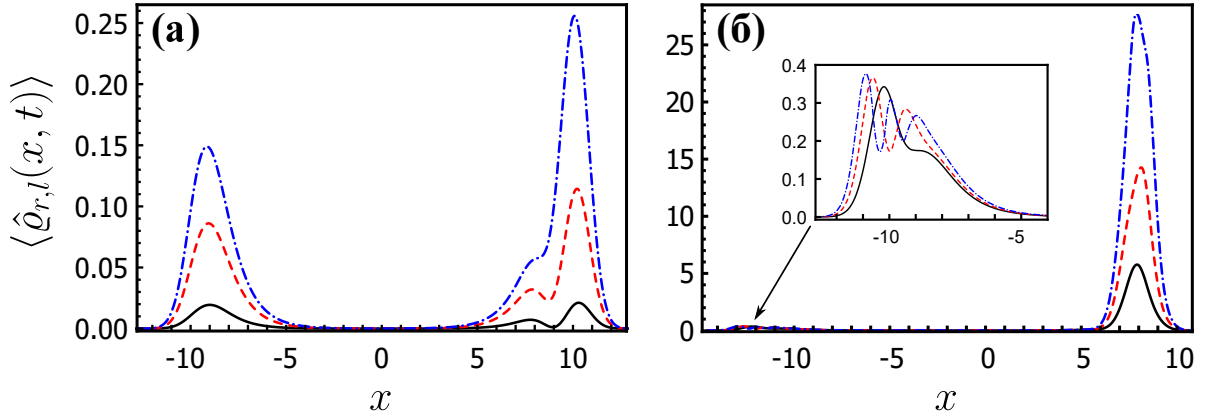


Рис. 1.4. Густина фотонів у конфігураційному просторі при розсіянні хвильового пакету у когерентному стані: (а) $N_0 = 0.1$ – чорна суцільна лінія, $N_0 = 0.5$ – червона штрихова лінія, та $N_0 = 1$ – синя штрихпунктирна лінія; (б) $N_0 = 10$ – чорна суцільна лінія, $N_0 = 25$ – червона штрихова лінія, та $N_0 = 50$ – синя штрихпунктирна лінія (частина імпульсу, що відбилась, показана у вставці). Параметри $\Gamma\tau_p = 1$, $x_0/w = -10$, та $\Delta_a = 0$ використані для розрахунку всіх кривих.

вої густини фотонів в l -моді:

$$\langle \hat{\rho}_l(x, t) \rangle = \langle \tilde{\rho}_l(x, t) \rangle - \left(\frac{\Gamma}{2v_g} \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_{t-x/v_g} + \frac{1}{v_g} \partial_t \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_{t-x/v_g} \right) \theta(x) \theta\left(x - \frac{t}{v_g}\right). \quad (1.37)$$

Пара доданків у дужках в формулі (1.37) описують, відповідно, відгук (перевипромінювання) кубіта та інтерференцію вхідного поля та поля, яке кубіт перевипромінює. Просторова густина фотонів в r -моді визначається як

$$\langle \hat{\rho}_r(x, t) \rangle = \frac{\Gamma}{2v_g} \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_{t+x/v_g} \theta(-x) \theta\left(t + \frac{x}{v_g}\right). \quad (1.38)$$

Рівняння (1.38) описує відбиття випромінювання кубітом. Можна помітити, що просторовий розподіл тієї частини випромінювання, яка відбилась від кубіта, виражається суто через населеність його збудженого стану $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle$.

Для обчислення $\langle \hat{\rho}_{l,r}(x, t) \rangle$ рівняння (1.28) розв'язується чисельно. Для

чисельного розв'язку диференціального рівняння (1.28) використовуємо функцію `NDSolve` системи комп'ютерної алгебри `MATHEMATICA`. Результати обчислень показані на Рис. 1.4. Усі розрахунки на Рис. 1.4 проведені для моменту часу $t = |x_0|/v_g + 1/\Gamma + 10\tau_p$.

Для $N_0 \sim 1$, просторовий розподіл фотонів, що пройшли, має виражене заглиблення. Це заглиблення виникає завдяки інтерференції вхідного поля та поля, яке перевипромінює кубіт. При збільшенні середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі, цей провал зникає. Просторовий розподіл випромінювання, що відбилось від кубіта, стає осцилюючим [дивіться вставку на Рис. 1.4(6)]. Це відбувається завдяки осциляціям населеності кубіта, які продемонстровані у попередній частині.

1.5.3 Середня кількість фотонів, що розсіялись

Інтегрування (1.36) по конфігураційному простору дає оператори повної кількості фотонів в μ -моді в момент часу t :

$$\hat{N}_\mu(t) = \int dx \hat{\varrho}_\mu(x, t). \quad (1.39)$$

Підстановка у це означення виразів (1.36) та (1.35) дає такий результат

$$\hat{N}_\mu(t) = \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{\Gamma}{2} \sigma_+ \sigma_- + ig \int dp (\sigma_+ \tilde{\mu}_p - \tilde{\mu}_p^\dagger \sigma_-) \right]_\tau. \quad (1.40)$$

Використовуючи співвідношення (1.39), середню кількість фотонів, що пройшли та що відбилися, можна виразити через відповідні розподіли просторової густини фотонів у l - та r -модах як

$$N_r \equiv \langle \hat{N}_r(t) \rangle = \int_{-\infty}^0 dx \langle \hat{\varrho}_r(x, t) \rangle, \quad (1.41)$$

$$N_l \equiv \langle \hat{N}_l(t) \rangle = \int_0^\infty dx \langle \hat{\rho}_l(x, t) \rangle. \quad (1.42)$$

Використовуючи рівняння (1.38) та (1.37), умову (1.44), а також властивість $\tilde{r}_p |\Psi\{\mathcal{A}\}\rangle = \langle \Psi\{\mathcal{A}\} | \tilde{r}_p^\dagger = 0$, приходимо до такого результату:

$$N_r(t) = \frac{\Gamma}{2} \int_{t_0}^t d\tau \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_\tau, \quad (1.43a)$$

$$N_l(t) = v_g \int_{t_0}^t d\tau \langle \tilde{\rho}_l[v_g(t - \tau), t] \rangle - N_r. \quad (1.43b)$$

Зазначимо, що для обчислення N_r та N_l обирався момент часу $t = t_\infty$, коли процес взаємодії між кубітом та випромінюванням вже завершився та атом повернувся в свій основний стан $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle|_{t=t_\infty} = 0$. Цей момент часу задовольняє такій умові

$$t_\infty \gg t_0 + \tau_p + \frac{1}{\Gamma} + \frac{|x_0|}{v_g}. \quad (1.44)$$

Цікавою особливістю є те, що за умови (1.44) доданок $-\partial_t \langle \sigma_z \rangle / 2v_g$, який визначає просторовий розподіл хвильового пакету, що пройшов кубіт, не дає внеску при обчисленні середньої кількості фотонів, що пройшли N_l , оскільки $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle|_{t=t_0} = \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle|_{t>t_\infty} = 0$.

Для оцінки верхньої границі середньої кількості фотонів, що відбилися, N_r , використаємо рівняння (1.41) та той факт, що кубіт (дворівневий атом) не може містити більше одного збудження $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle < 1$. Це дає оцінку кількості фотонів, що відбилися, $N_r \leq \Gamma \tau_p / 2$. Як бачимо, граничне значення N_r не залежить від середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі N_0 та може бути малим навіть при $N_0 \gg 1$. Отже, контролюючи параметри зв'язку кубіта з хвилеводом, можна використовувати кубіт як *джерело хвильових*

пакетів, що містять декілька фотонів.

1.5.4 Статистичні властивості фотонів, що розсіялись

Для визначення статистичних властивостей випромінювання, що розсіялось в процесі взаємодії з кубітом, використаємо дисперсію (*variance*) кількості фотонів $\langle \delta \hat{N}_\mu^2 \rangle \equiv \langle (\hat{N}_\mu - N_\mu)^2 \rangle$, де $\mu \in \{l, r\}$. Використовуючи співвідношення (1.39) та (1.34), а також рівняння руху (1.21), можна показати, що в асимптотичному випадку довгих часів еволюції системи (1.44) виконується співвідношення $\hat{N}_l + \hat{N}_r \equiv \tilde{N}_l$. Отже дисперсію кількості фотонів в l -моді для довгих часів еволюції системи ($t \geq t_\infty$) можна визначити як $\langle \delta \hat{N}_l^2 \rangle_\infty = \langle (\tilde{N}_l - \hat{N}_r)^2 \rangle_\infty - (\tilde{N}_l - N_r)^2$, де індекс ∞ показує, що величина береться в асимптотиці довгих часів еволюції системи, тобто при t_∞ .

Для спрощення подальшого аналізу розглядатимемо резонансний випадок взаємодії кубіта з хвильовим пакетом $\Delta_a = 0$. Використовуючи вираз (1.40) знаходимо таке рівняння для $\langle \hat{N}_r^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{N}_r^2 \rangle &= \frac{\Gamma^2}{4} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^t d\tau' \langle \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \sigma_+(\tau') \sigma_-(\tau') \rangle \\ &+ \frac{iv\Gamma^2}{8\pi g} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^t d\tau' \int dp \langle \sigma_+(\tau') \tilde{r}_p(\tau') \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) - \text{H. c.} \rangle \\ &+ \frac{v\Gamma}{4\pi} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^t d\tau' \int dp \int dp' \langle \sigma_+(\tau) \tilde{r}_p(\tau) \tilde{r}_{p'}^\dagger(\tau') \sigma_-(\tau') \rangle. \end{aligned} \quad (1.45)$$

Розглянемо останній доданок в рівнянні (1.45). Використовуючи співвідношення

$$\tilde{r}_p(\tau) \tilde{r}_{p'}^\dagger(\tau') = \tilde{r}_{p'}^\dagger(\tau') \tilde{r}_p(\tau) + \delta(p' - p) e^{iv_g p(\tau' - \tau)}, \quad (1.46)$$

комутатор (1.15), та властивість початкового стану фотонів

$$\tilde{r}_p|\emptyset\rangle = \langle\emptyset|\tilde{r}_p^\dagger = 0, \quad (1.47)$$

цей доданок можна переписати у такому вигляді:

$$\frac{v\Gamma}{4\pi} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^t d\tau' \int dp \int dp' \langle \sigma_+(\tau) \tilde{r}_p(\tau) \tilde{r}_{p'}^\dagger(\tau') \sigma_-(\tau') \rangle = \frac{\Gamma}{2} \int_{t_0}^t d\tau \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle|_\tau. \quad (1.48)$$

Подібним чином можна спростити третій доданок в рівнянні (1.45). Використовуючи вирази (1.46), (1.47), та (1.15), отримаємо такі співвідношення⁴:

$$\int dp \tilde{r}_p(\tau') \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) |\Psi\rangle = i \frac{2\pi g}{v} [\sigma_-(\tau'), \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau)] |\Psi\rangle \theta(\tau - \tau'), \quad (1.49)$$

$$\int dp \langle \Psi | \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \tilde{r}_p^\dagger(\tau') = i \frac{2\pi g}{v} \langle \Psi | [\sigma_+(\tau'), \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau)] \theta(\tau - \tau'). \quad (1.50)$$

Використовуючи рівняння (1.49) та (1.50) маємо

$$\begin{aligned} & \frac{iv\Gamma^2}{8\pi g} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^t d\tau' \int dp [\langle \sigma_+(\tau') \tilde{r}_p(\tau') \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \rangle - \text{H. c.}] \\ &= \frac{\Gamma^2}{4} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^\tau d\tau' [2\langle \sigma_+(\tau') \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \sigma_-(\tau') \rangle \\ & \quad - \langle \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \sigma_+(\tau') \sigma_-(\tau') - \sigma_+(\tau') \sigma_-(\tau') \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \rangle]. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Після підстановки виразів (1.48) та (1.51) в рівняння (1.45) воно набуває такого вигляду

$$\langle \hat{N}_r^2 \rangle = \frac{\Gamma^2}{2} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^\tau d\tau' \langle S(\tau, \tau') \rangle + N_r, \quad (1.52)$$

⁴Подібні співвідношення отримані також в додатку до статті [87].

де $S(\tau, \tau') = \sigma_+(\tau')\sigma_+(\tau)\sigma_-(\tau)\sigma_-(\tau')$. Корелятор $\langle S(\tau, \tau') \rangle$ описується рівнянням руху

$$\mathcal{D}_\tau \langle S(\tau, \tau') \rangle = 2N_0 g^2 \Xi^2(\tau) \langle \sigma_+(\tau') \sigma_-(\tau') \rangle, \quad (1.53)$$

яке отримується аналогічно до рівняння (1.28).

Використовуючи визначення оператора $S(\tau, \tau')$ та співвідношення $(\sigma_+)^2 = (\sigma_-)^2 = 0$, отримаємо початкову умову для корелятора $\langle S(\tau, \tau') \rangle$:

$$\langle S(\tau, \tau') \rangle|_{\tau=\tau'} = \partial_\tau \langle S(\tau, \tau') \rangle|_{\tau=\tau'} = 0. \quad (1.54)$$

Розв'язок рівнянь (1.28) та (1.53) дає змогу обчислити величину $\langle \hat{N}_r^2 \rangle$.

Для обчислення $\langle \delta \hat{N}_l^2 \rangle$ треба визначити не тільки $\langle \hat{N}_r^2 \rangle$, але й корелятор $\langle \tilde{N}_l \hat{N}_r \rangle$. Останній описується таким рівнянням

$$\langle \tilde{N}_l \hat{N}_r \rangle = \Gamma \int_{t_0}^t d\tau \langle \tilde{N}_l(t) \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \rangle. \quad (1.55)$$

Рівняння руху для корелятора $\langle \tilde{N}_l(t) \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \rangle$, який виник в (1.55), має такий вигляд

$$\mathcal{D}_\tau \langle \tilde{N}_l(t) \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \rangle = 2N_0 g^2 \Xi^2(\tau) [N_0 - \langle \sigma_z(\tau) \rangle]. \quad (1.56)$$

Початковими умовами для цього рівняння є

$$\tilde{N}_l(t) \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau)|_{\tau=t_0} = \partial_\tau \langle \tilde{N}_l(t) \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \rangle|_{\tau=t_0} = 0. \quad (1.57)$$

Статистика фотонів, що відбилися від кубіта, визначається першим доданком у правій частині рівняння (1.52). Якщо значення цього доданку відмінне від N_r^2 , то фотони, що відбилися, вже не описуються пуассонівською

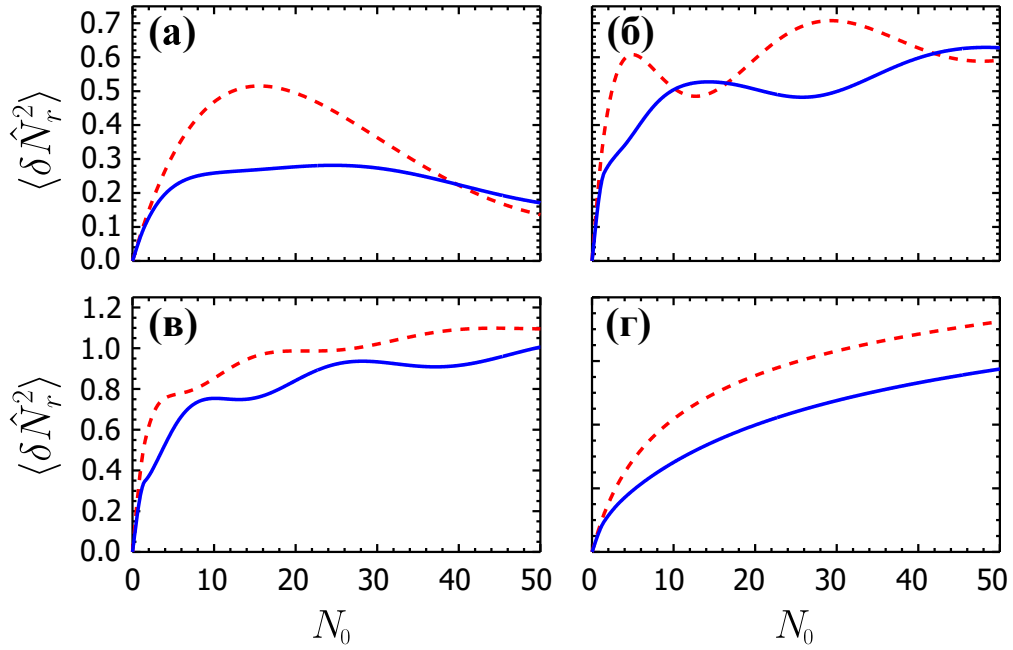


Рис. 1.5. Залежність дисперсії кількості фотонів, що відбилися, від середньої кількості фотонів у вхідному хвильовому пакеті для різних Γ . Суцільні лінії – значення $\langle \delta \hat{N}_r^2 \rangle$ отримане числовим розв’язанням рівнянь (1.53) та (1.56). Штиховані лінії – дисперсія при пуассонівській статистиці фотонів. Параметри системи такі: $\Delta_a = 0$, $x_0/w = -10$, (а) $\Gamma\tau_p = 1/10$, (б) $\Gamma\tau_p = 1/2$, (в) $\Gamma\tau_p = 1$, та (г) $\Gamma\tau_p = 10$.

статистикою. Рисунки 1.5(а) та 1.5(б) показують *переходи від субпуассонівської до суперпуассонівської статистики* для певних значень середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі та швидкості спонтанного розпаду збудженого стану кубіта в хвилевід⁵. Рисунки 1.5(в) та 1.5(г) демонструють, що при збільшенні Γ , дисперсія кількості відбитих фотонів стає при будь-яких значеннях N_0 меншою за їхню середню кількість $\langle \delta \hat{N}_r^2 \rangle < N_r$. Це відповідає субпуассонівській статистиці. Отже, контролюючи взаємодію між кубітом та модою хвилеводу, можна контролювати статистику випромінювання, що відбулось від кубіта. Це означає, що дворівневий атом можна використовувати як *регульоване джерело суб- чи суперпуассонівського світла*. При $N_0 \gg 1$ статистика випромінювання, що пройшло, подібна до статистики вхідного випромінювання, тобто воно є майже когерентним.

⁵До аналогічних висновків дійшли також автори статті [22].

Це пояснюється тим, що дворівневий атом може поглинути тільки одне збудження (фотон), тобто є *нелінійною системою з насиченням*. Через це, лише невелика кількість фотонів у вхідному імпульсі поглинаються та перевипромінюється кубітом.

1.6 Висновки

У цьому розділі досліджено процес розсіяння хвильового пакета в когерентному стані на дворівневому атомі (кубіті) в одновимірному хвилеводі. Продемонстровано, що характер збудження кубіта залежить від середньої кількості фотонів N_0 у вхідному хвильовому пакеті. При збільшенні N_0 часова залежність населеності збудженого рівня кубіта набуває осцилюючого характеру. При $N_0 \gg 1$ частота осциляцій населеності пропорційна $\sqrt{N_0}$. Також досліджено статистичні властивості випромінювання, що розсіялось після взаємодії з кубітом. Встановлено, що при $N_0 \gg 1$ випромінювання, яке пройшло кубіт, має суперпуассонівську статистику, тоді як випромінювання, що відбилось може мати як суб- та і суперпуассонівську статистику залежно від середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі та зв'язку кубіта з модою хвилеводу.

РОЗДІЛ 2

РОЗСІЯННЯ ОДНО- ТА ДВОФОТОННИХ ХВИЛЬОВИХ ПАКЕТІВ НА КУБІТІ: ПІДХІД ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ В ФАЗОВОМУ ПРОСТОРІ

2.1 Вступ

Вивчення взаємодії між квантовими випромінювачами, наприклад, атомами, та випромінюванням на рівні окремих фотонів у одновимірній геометрії є важливою задачею, яка привернула до себе значну увагу [3, 88]. Дослідження таких систем є важливим, по-перше, з точки зору фундаментального розуміння процесів взаємодії світла та матерії на квантовому рівні в системах з пониженою розмірністю. По-друге, хвилеводні системи розглядаються як перспективна платформа для створення пристроїв призначених для контролю поширення фотонів.

Розсіяння однофотонних станів на дворівневому атомі (кубіті) в одновимірному хвилеводі розглядалось у роботах *J.-T. Shen* та *S. Fan* [39, 89]. Використовуючи гамільтоніан у конфігураційному просторі та анзатц Бете (*Bethe ansatz*), вони описали розсіяння монохроматичних фотонів на кубіті та отримали вирази для коефіцієнтів відбиття та пропускання. Із цих результатів випливає, що завдяки квантовій інтерференції, монохроматичний фотон повністю відбивається від дворівневого атома, якщо його частота у резонансі з частотою атомного переходу. Розсіяння окремих фотонів на атомі вивчалось також за допомогою теорії розсіяння Ліппмана-Швінгера. Цей підхід використовувався в роботах [90, 91] для виведення однофотонної матриці розсіяння (S -матриці). В роботі [80] автори продемонстрували зв'язок між S -матрицею та формалізмом «вхід-вихід» (*input-*

output formalism). Підхід хвильової функції для дослідження просторово-часової динаміки розсіювання однофотонних хвильових пакетів на дворівневому атомі застосовувався в роботі [92].

Розсіювання дво- та багатифотонних станів світла на квантових випромінювачах становить більш складну задачу. При розсіюванні багатифотонних станів на квантових випромінювачах, наприклад, дворівневих атомах, виникають просторові та часові кореляції між розсіяними фотонами [14, 93, 94, 95], а також формуються багатифотонні зв'язані стани [16, 17, 18]. Для дослідження розсіювання багатифотонних станів на дворівневих атомах у хвилеводній геометрії застосовувалась низка підходів квантової теорії поля, таких як анзац Бете [93, 94], теорія розсіювання Ліпмана-Швінгера [90], різноманітні діаграмні техніки [97, 98, 99, 100, 101, 102]. Окрім цього, також використовувались підходи кінетичного рівняння (*master equation*) [95, 103], формалізм операторів «вхід-вихід» [80], та підхід хвильової функції [104, 105, 106].

В цьому розділі ми продовжимо вивчення взаємодії хвильових пакетів з дворівневим атомом (кубітом) у одновимірному хвилеводі та розглянемо динаміку розсіювання одно- та двофотонних хвильових пакетів. Систему хвилевід-кубіт описуємо використовуючи гамільтоніаном (1.9) виписаним та обґрунтованим у Розділі 1.3. Для опису еволюції хвильового пакету використаємо оператор розподілу густини фотонів у фазовому просторі [107] в представлення Гайзенберга.

2.2 Функція розподілу густини фотонів у фазовому просторі

Перш ніж перейти до вивчення розсіювання одно- та двофотонних хвильових пакетів на кубіті, дамо визначення функції розподілу густини фотонів у фазовому просторі та дослідимо її основні властивості. Під фазовим простором ми розуміємо (x, p) -простір – простір координат та хвильових ве-

кторів (імпульсів) фотона. Функція (оператор) розподілу густини фотонів у фазовому просторі визначається як [107]:

$$\hat{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{A}_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}/2}, \quad (2.1)$$

де $A_{\mathbf{p}}^\dagger(A_{\mathbf{p}})$ – оператор народження (знищення) фотона з хвильовим вектором $\mathbf{p}$. Визначення оператора (2.1) аналогічно функціям розподілу для квазічастинок (наприклад, електронів чи фононів), які використовуються у фізиці конденсованого стану [108]. Оскільки розглядається (квазі)одновимірна геометрія, то в подальшому використовуватимемо функцію розподілу густини фотонів у одновимірному випадку, яка записується як

$$\hat{f}(x, p, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ikx} \hat{A}_{p+k/2}^\dagger \hat{A}_{p-k/2}, \quad (2.2)$$

У подальшому називатимемо оператор розподілу густини фотонів у фазовому просторі $\hat{f}(x, p, t)$ просто *функцією розподілу фотонів*.

Випишемо основні властивості функції розподілу фотонів $\hat{f}(x, p, t)$. Інтегрування функції розподілу по (конфігураційному) простору дає оператор густини фотонів у імпульсному (частотному) просторі (спектр):

$$\int dx \hat{f}(x, p, t) = A_p^\dagger(t) A_p(t) \equiv \hat{n}(p, t). \quad (2.3)$$

Інтегрування функції розподілу по імпульсам (хвильовим векторам) фотонів дає оператор просторової густини фотонів

$$\int dp \hat{f}(x, p, t) = \hat{\varrho}(x, t). \quad (2.4)$$

Інтеграл від функції розподілу по всьому фазовому (x, p) -простору відпо-

відає оператору кількості фотонів:

$$\int dx \int dp \hat{f}(x, p, t) = \int dx \hat{\varrho}(x, t) = \int dp \hat{n}(p, t) = \hat{N}_{\text{ph}}(t). \quad (2.5)$$

Із цих співвідношень випливає, що функція розподілу у фазовому просторі містить інформацію і про просторові, і про спектральні характеристики хвильового пакету.

Використовуючи означення функції розподілу (2.2) та рівняння (1.12), запишемо функцію розподілу фотонів у μ -моді хвилевода виражену через оператори дворівневої системи і вхідного поля:

$$\begin{aligned} f_{\mu}(x, p, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ikx} & \left[\tilde{\mu}_{p+k/2}^{\dagger} + ig \int_{t_0}^t d\tau e^{i(\omega_p^{\mu} - \omega_a)(t-\tau)} \sigma_{+}(\tau) \right] \\ & \times \left[\tilde{\mu}_{p-k/2} - ig \int_{t_0}^t d\tau e^{-i(\omega_p^{\mu} - \omega_a)(t-\tau)} \sigma_{-}(\tau) \right]. \end{aligned} \quad (2.6)$$

2.3 Розсіяння однофотонного імпульсу на кубіті

Розглянемо ситуацію, коли вхідний хвильовий пакет містить лише один фотон. В такому випадку, стан системи в початковий момент часу t_0 задається як

$$|1_l\rangle = \int dp \alpha_p l_p^{\dagger}(t_0) |\emptyset\rangle, \quad (2.7)$$

де $|\emptyset\rangle = |0\rangle_l |0\rangle_r |g\rangle$ – вакуумний стану системи – стан, в якому у хвилеводі немає збуджень (фотонів), а кубіт знаходиться в основному стані $|g\rangle$. Послугуючись міркуваннями, наведеними у Розділі 1.5, знехтуємо наявністю теплових збуджень у системі. Спектральний розподіл вхідного

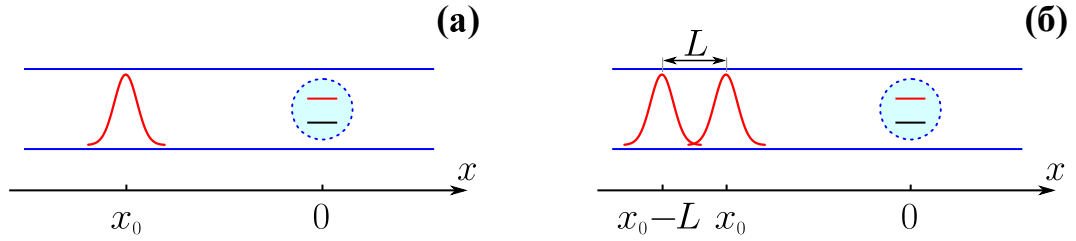


Рис. 2.1. Геометрія системи, що розглядається: (а) у випадку однофотонного хвильового пакету, його центр в початковий момент часу t_0 розташований в точці $x_0 < 0$; (б) у випадку двофотонного хвильового пакету, центри однофотонних пакетів, які його утворюють, в початковий момент часу розташовані в точках $x_0 < 0$ та $x_0 - L$, $L > 0$. Кубіт розташований в точці $x_a = 0$.

однофотонного імпульсу α_p задаємо як

$$\alpha_p = \sqrt[4]{\frac{w^2}{\pi}} \exp\left(-\frac{w^2}{2}p^2 - ipx_0\right), \quad (2.8)$$

де параметр w визначає просторову ширину вхідного імпульсу. Як і в Розділі 1.5, вважаємо, що $(\gamma_0 = v_g/w) \ll \omega_0$.

Для стану $|1_l\rangle$ та гауссового спектрального розподілу амплітуди ймовірності (2.8), середнє значення функції розподілу фотонів в момент часу t_0 визначається як

$$\langle 1_l | f_l(x, p, t_0) | 1_l \rangle = \frac{1}{\pi} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{w^2} - w^2 p^2\right]. \quad (2.9)$$

До моменту, коли хвильовий пакет почне взаємодіяти з кубітом в основному стані $|g\rangle$, функція розподілу фотонів еволюціонує як

$$\langle 1_l | f_l(x, p, t) | 1_l \rangle = \frac{1}{\pi} \exp\left[-\frac{X_l(t)^2}{w^2} - w^2 p^2\right], \quad (2.10)$$

де $X_l(t) = x - x_0 - v_g(t - t_0)$. Вираз (2.10) описує просторовий перенос центра функції розподілу зі швидкістю v_g .

Для визначення функцій розподілу $\langle 1_l | f_l(x, p, t) | 1_l \rangle$ в області простору

$v_g(t - t_0) > -x_0$, використаємо усереднимо рівняння (2.6) по стану $|1_l\rangle$, що дає такий результат:

$$\begin{aligned} \langle 1_l | f_l(x, p, t) | 1_l \rangle &= \frac{w}{2\pi\sqrt{\pi}} \int dk e^{-ikX_l(t)} e^{-w^2(p^2+k^2/4)} \\ &\times \left[1 - \frac{\Gamma}{2} \frac{\Gamma/2 + ikv_g}{(\Delta_a - pv_g)^2 - (kv_g - i\Gamma)^2/4} \right]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Щоб отримати рівняння (2.11) використано співвідношення

$$\begin{aligned} \sigma_-(t) | 1_l \rangle &= [\langle 1_l | \sigma_+(t)]^\dagger \\ &= -ig \int_{t_0}^t d\tau e^{-(i\Delta_a + \Gamma/2)(t-\tau)} A(\tau) | \emptyset \rangle, \end{aligned} \quad (2.12)$$

де функція $A(t) = \int dp e^{-iv_g pt} \alpha_p$. Для спектрального розподілу α_p гауссового виду (2.8), інтегрування в (2.12) можна провести аналітично, що дає такий результат

$$\begin{aligned} \sigma_-(t) | 1_l \rangle &= -ig \frac{\sqrt[4]{\pi^3 w^2}}{v_g} \exp \left[-\frac{\tilde{\Gamma}}{2} \left(t - \frac{|x_0|}{v_g} - \frac{\tilde{\Gamma} \tau_p^2}{4} \right) \right] \\ &\times \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{\Gamma} \tau_p}{2} + \frac{|x_0|}{w} \right) \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{\Gamma} \tau_p}{2} + \frac{|x_0| - v_g t}{w} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

де $\tilde{\Gamma} = \Gamma - 2i\Delta_a$. Вираз (2.12) випливає з рівняння (1.19) та властивості однофотонного стану $|1_l\rangle$:

$$\tilde{l}_p(t) | 1_l \rangle = A(t) | \emptyset \rangle, \quad \tilde{r}_p(t) | 1_l \rangle = 0. \quad (2.14)$$

При виведенні виразу (2.11) також вважаємо, що пройшло достатньо часу для того, щоб кубіт повернувся у свій основний стан $|g\rangle$, тобто виконується умова (1.44).

Інтегрування по всім координатам в рівнянні (2.11) дає розподіл спектральної густини (спектр) фотонів, що пройшли кубіт:

$$\langle 1_l | \hat{n}_l(p, t) | 1_l \rangle = \sqrt{\frac{w^2}{\pi}} e^{-w^2 p^2} \left[1 - \frac{\Gamma^2/4}{(\Delta_a - p v_g)^2 + \Gamma^2/4} \right]. \quad (2.15)$$

Другий доданок в дужках описує процес резонансного відбиття фотона. З рівняння (2.15) можна побачити, що $\langle 1_l | \hat{n}_l(p, t) | 1_l \rangle = 0$ при $\Delta_a = p v_g$. Цей результат означає, що частина хвильового пакета з хвильовими векторами $p \approx \Delta_a/v_g$ відбивається від кубіта, тобто останній діє як квантовий *режес-кторний фільтр* (*band-stop filter*) для фотонів. З рівняння (2.15) також випливає, що при $\Delta_a \neq 0$ спектр частини випромінювання, яке пройшло кубіт, стає асиметричним відносно точки $p = 0$.

Густина фотонів, що пройшли кубіт, визначається як

$$\langle 1_l | \hat{\varrho}_l(x, t) | 1_l \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi w^2}} \left| e^{-X_l^2(t)/2w^2} - i \frac{w\Gamma}{2\sqrt{2\pi}} G[X(t)] \right|^2, \quad (2.16)$$

де функція $G(x)$ записується як

$$G(x) = \int dp \frac{e^{-ipx - w^2 p^2/2}}{\Delta_a - p v_g + i\Gamma/2}. \quad (2.17)$$

З рівняння (2.16) випливає, що для коротких входних імпульсів $\Gamma\tau_p \ll 1$ внесок доданку, який містить $G(x)$, є нехтовним незалежно від значення Δ_a , а отже, майже весь однофотонний хвильовий пакет проходить кубіт без відбиття. У протилежному випадку довгих входних імпульсів $\Gamma\tau_p \gg 1$, вираз для просторового розподілу фотонної густини (2.16) можна наближено записати як

$$\langle 1_l | \hat{\varrho}_l(x) | 1_l \rangle \approx \frac{1}{\sqrt{\pi w^2}} e^{-X^2(t)/w^2} \left| 1 - \frac{\Gamma}{\Gamma - 2i\Delta_a} \right|^2. \quad (2.18)$$

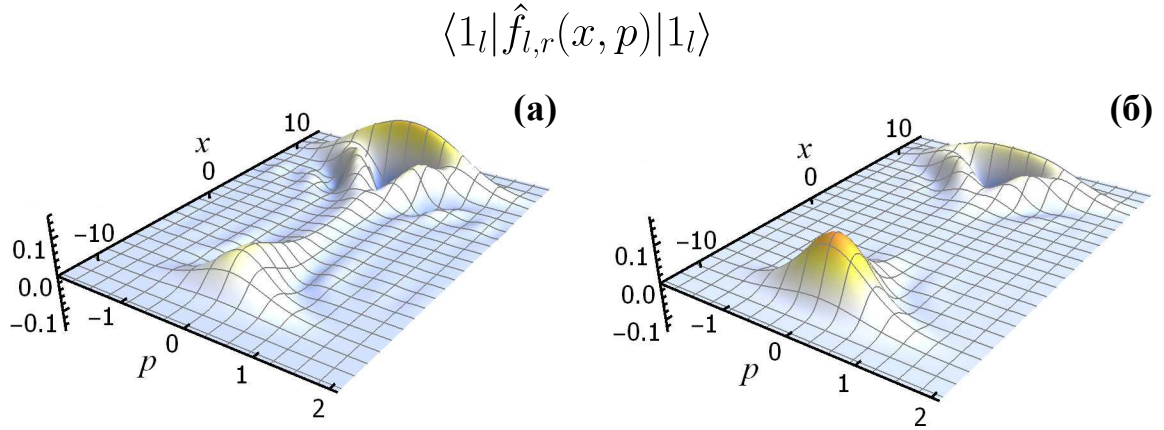


Рис. 2.2. Розподіли густини фотонів у фазовому просторі $\langle 1_l | f_l(x, p, t) | 1_l \rangle$ ($x > 0$) та $\langle 1_l | f_r(x, p, t) | 1_l \rangle$ ($x < 0$) для $\Gamma = 1$, $\Delta_a = 0$, та $x_0 = -10$. Розподіли обчислювались при $t = 20$ та $t_0 = 0$. Величини x, p, t , та Γ наведено в одиницях $w, 1/w, \tau_p$, та $1/\tau_p$, відповідно.

В резонансному випадку $\Delta_a = 0$ вираз в правій частині обертається в нуль, що відповідає повному відбиттю фотона. Для $|\Delta_a| \gg \Gamma$ з (2.18) отримаємо

$$\langle 1_l | \hat{\varrho}_l(x, t) | 1_l \rangle \approx \frac{1}{\sqrt{\pi w^2}} e^{-X^2(t)/w^2}, \quad (2.19)$$

що означає майже повне проходження фотона. Цей результат пояснюється зменшенням взаємодії між кубітом та хвильовим пакетом при $|\Delta_a| \gg \Gamma$.

Функція розподілу відбитих фотонів має такий вигляд

$$\langle 1_l | f_r(x, p, t) | 1_l \rangle = \frac{w\Gamma^2}{8\pi\sqrt{\pi}} \int dk e^{-ikX_r(t)} \frac{e^{-w^2(p^2+k^2/4)}}{(\Delta_a + pv_g)^2 - (kv_g + i\Gamma)^2/4}, \quad (2.20)$$

де $X_r(t) = x + x_0 + v_g(t - t_0)$.

На Рис. 2.2 показані функції розподілу розсіяних фотонів $\langle 1_l | f_{l,r}(x, p, t) | 1_l \rangle$, обчислені для різних параметрів системи. Результати обчислень демонструють, що на відміну від всюди позитивної функції розподілу вхідного хвильового пакету (2.9), функція розподілу фотонів, що пройшли кубіт, $\langle f_l(x, p, t) \rangle$, має область від'ємних значень. Це означає, що фізична величина $\langle f_{l,r}(x, p, t) \rangle$ – це, строго кажучи, розподіл густини *квазіймовірно-*

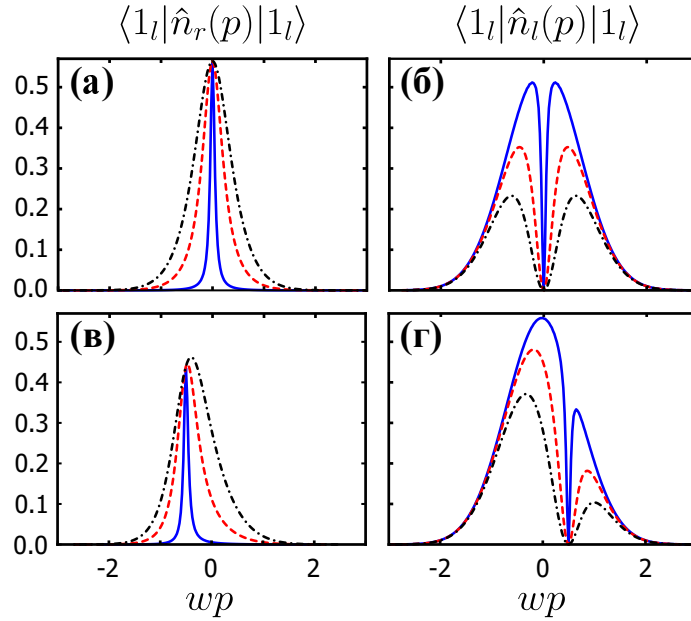


Рис. 2.3. Розподіл густини фотонів у імпульсному просторі при (а,б) $\Delta_a = 0$ та (в,г) $\Delta_a \tau_p = 0.5$. Решта параметрів такі ж, як на Рис. 2.2.

сти (а не ймовірності) знаходження фотона у певній точці фазового (x, p) -простору. Від'ємні значення функції розподілу виникають через інтерференцію вхідного поля та поля, яке перевипромінив кубіт. Зазначимо, що взаємодія між атомом та фотоном є найбільш ефективною поблизу значень хвильового вектора $p = 0$, де виконуються умови резонансу. Як показано на Рис. 2.2, мінімум функції розподілу фотонів, що пройшли кубіт, спостерігається саме при цьому значенні p . На відміну від цього, «крила» початкового розподілу проходять кубіт без істотних змін. Появу від'ємних значень функції розподілу розсіяних фотонів можна інтерпретувати як прояв *антикореляції* між станом кубіта та станом поля хвилевода. Коли кубіт у збудженому стані $|e\rangle$, тобто поглинув фотон, поле хвилеводу буде у вакуумному стані, оскільки інших збуджень в системі немає. Якщо кубіт перебуває в основному стані $|g\rangle$, то в хвилеводі знаходиться фотон.

Використовуючи рівняння (2.20) отримаємо вирази для просторового

та імпульсного (спектрального) розподілів фотонів, що відбилися:

$$\langle \hat{\varrho}_r(x, t) \rangle = \frac{w\Gamma^2}{8\pi\sqrt{\pi}} |\Phi[-X^r(t)]|^2, \quad (2.21)$$

$$\langle \hat{n}_r(p, t) \rangle = \frac{w\Gamma^2}{4\sqrt{\pi}} \frac{e^{-w^2 p^2}}{(\Delta_a + pv_g)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (2.22)$$

Результати, показані на Рис. 2.3, демонструють очікувану закономірність – при зростанні зв'язку між кубітом та хвилеводом (полем), відбиття посилюється. Як видно з Рис. 2.3(в) та 2.3(г), при $\Delta_a > 0$, спектри є асиметричними відносно точки $p = 0$. Ця асиметрія виникає через те, що тільки частини хвильового пакету з хвильовими векторами $p > 0$ можуть бути в резонансі з частотою переходу кубіта, а отже, мають найбільшу ймовірність відбитись. Це проявляється як локальний мінімум у спектрі тієї частини хвильового пакету, що пройшла, $\langle 1_l | \hat{n}_l(p) | 1_l \rangle$ та відповідний максимум у спектрі випромінювання, що відбилось, $\langle 1_l | \hat{n}_r(p) | 1_l \rangle$. Для $\Delta_a < 0$, подібні графіки можна отримати формальною заміною p на $-p$ на Рис. 2.3(в) та 2.3(г).

2.4 Розсіяння двофотонного імпульсу на кубіті

Розглянемо розсіяння хвильового пакету, який містить два фотона. Як і у випадку вхідного хвильового пакету в однофотонному стані, вважаємо, що в початковий момент часу ($t = t_0$) кубіт знаходиться у основному стані $|g\rangle$, а хвильовий пакет поширюється зліва направо як показано на Рис. 2.1. Вхідний двофотонний хвильовий пакет складається з двох однофотонних пакетів, які описуються станами $|1_\alpha\rangle$ та $|1_\beta\rangle$, які визначаються як:

$$|1_\alpha\rangle = \int dp \alpha_p l_p^\dagger(t_0) |\emptyset\rangle \equiv a_\alpha^\dagger |\emptyset\rangle, \quad (2.23a)$$

$$|1_\beta\rangle = \int dp \beta_p l_p^\dagger(t_0) |\emptyset\rangle \equiv a_\beta^\dagger |\emptyset\rangle, \quad (2.236)$$

де функції α_p та β_p – нормовані однофотонні спектральні розподіли. Надалі вважатимемо, що спектральні розподіли α_p та β_p співвідносяться як

$$\beta_p = \alpha_p e^{ipL}. \quad (2.24)$$

В такому разі, розподіли просторової густини фотонів у станах $|1_{\alpha,\beta}\rangle$ пов'язані як $\langle 1_\beta | \hat{\rho}_l(x, t_0) | 1_\beta \rangle = \langle 1_\alpha | \hat{\rho}_l(x + L, t_0) | 1_\alpha \rangle$. З цього співвідношення видно, що β - та α -пакети мають однаковий просторовий розподіл та зміщені один від одного на відстань L .

Також корисно записати, як оператори $\tilde{l}_p$ та $\tilde{r}_p$ діють на одно- та двофотонні стани $|1_{\alpha,\beta}\rangle$ та $|2_{\alpha\beta}\rangle$. Використовуючи визначення цих операторів (1.12), а також визначення однофотонних (2.23) і двофотонних станів (2.28), отримаємо такі співвідношення

$$\int dp \tilde{l}_p(t) |1_\alpha\rangle = A(t) |\emptyset\rangle, \quad \int dp \tilde{l}_p(t) |1_\beta\rangle = B(t) |\emptyset\rangle, \quad (2.25)$$

$$\int dp \tilde{l}_p(t) |2\rangle = \nu [A(t) |1_\beta\rangle + B(t) |1_\alpha\rangle] \quad (2.26)$$

та

$$\tilde{r}_p(t) |2\rangle = \tilde{r}_p(t) |1_\alpha\rangle = \tilde{r}_p(t) |1_\beta\rangle = 0. \quad (2.27)$$

Подіємо операторами $a_\alpha^\dagger$ та $a_\beta^\dagger$ на вакуумний стан $|\emptyset\rangle$ та отримаємо двофотонний стан

$$|2_{\alpha\beta}\rangle = \nu a_\beta^\dagger a_\alpha^\dagger |\emptyset\rangle, \quad \nu = \frac{1}{\sqrt{1 + |\chi|^2}}. \quad (2.28)$$

Параметр $\chi = \int dp \alpha_p^* \beta_p$ описує перекриття однофотонних станів (2.23a) та (2.236). При $L = 0$, константа ν стає рівною $1/\sqrt{2}$, і визначення двофотонного стану (2.28) збігається з визначенням багатомодового n -фотонного

фоківського стану [85]:

$$|n_\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_\xi^\dagger)^n|\emptyset\rangle, \quad a_\xi \equiv \int dp \xi_p a_p. \quad (2.29)$$

Вважатимемо, що вхідні імпульси мають гауссовий спектр (2.8). У такому разі, просторова густина для однофотонних компонент вхідного імпульсу визначається як

$$\begin{aligned} \langle 1_\alpha | \hat{\varrho}_l(x, t_0) | 1_\alpha \rangle &= \frac{1}{w\sqrt{\pi}} e^{-(x-x_0)^2/w^2}, \\ \langle 1_\beta | \hat{\varrho}_l(x, t_0) | 1_\beta \rangle &= \frac{1}{w\sqrt{\pi}} e^{-(x+L-x_0)^2/w^2}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Просторова густина для двофотонного вхідного стану $|2_{\alpha\beta}\rangle$ має такий вигляд

$$\begin{aligned} \langle 2_{\alpha\beta} | \hat{\varrho}_l(x, t_0) | 2_{\alpha\beta} \rangle &= \frac{\nu^2}{w\sqrt{\pi}} \left[e^{-(x-x_0)^2/w^2} + e^{-(x+L-x_0)^2/w^2} \right. \\ &\quad \left. + 2e^{-L^2/2w^2} e^{-(x-x_0+L/2)^2/w^2} \right], \end{aligned} \quad (2.31)$$

де $\nu = 1/\sqrt{1 + e^{-L^2/w^2}}$. При великих L коефіцієнт ν^2 прямує до одиниці, а останній доданок у квадратних дужках в (2.31) зникає. Отже, вхідне поле можна розглядати як два незалежних однофотонних імпульси.

2.4.1 Динаміка кубіта

Використовуючи рівняння (1.20) та (1.18), а також визначення початкового стану системи (2.28) отримаємо систему рівнянь, які описують динаміку збудження кубіта¹:

$$(\partial_t + \Gamma) \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle = i g [A^*(t) \langle 1_\beta | \sigma_- | 2 \rangle + B^*(t) \langle 1_\alpha | \sigma_- | 2 \rangle] + \text{с. с.}, \quad (2.32a)$$

¹Для скорочення запису надалі опускатимемо індекс $\alpha\beta$ у позначенні стану $|2_{\alpha\beta}\rangle$.

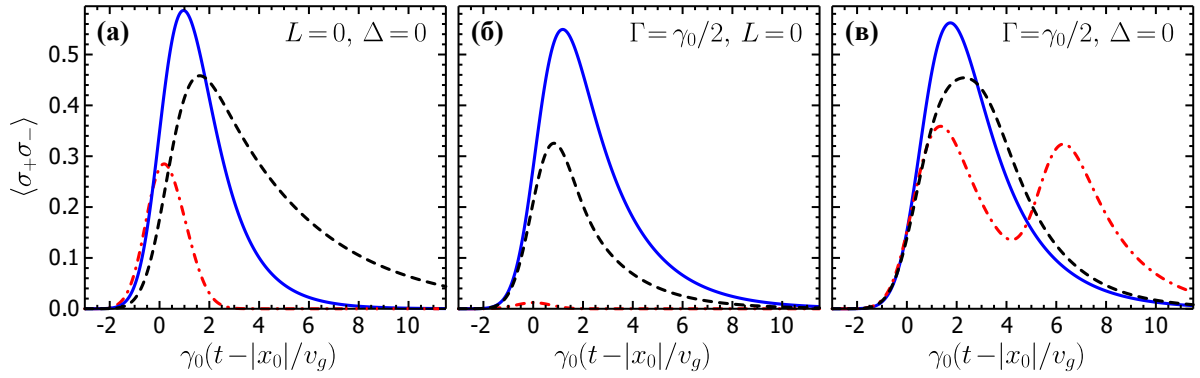


Рис. 2.4. Динаміка збудження кубіта: (а) $\Gamma = 3\gamma_0/4$ (синя суцільна лінія), $\Gamma = \gamma_0/4$ (чорна пунктирна лінія), $\Gamma = 5\gamma_0$ (червона пунктирна лінія); (б) $|\Delta_a| = \gamma_0/4$ (синя суцільна лінія), $|\Delta_a| = \gamma_0$ (чорна пунктирна лінія), $|\Delta_a| = 5\gamma_0$ (червона пунктирна лінія); (в) $L = w$ (синя суцільна лінія), $L = 2w$ (чорна пунктирна лінія), $L = 5w$ (червона пунктирна лінія).

$$\begin{aligned} \left(\partial_t + i\Delta_a + \frac{\Gamma}{2} \right) \langle 1_\alpha | \sigma_-(t) | 2 \rangle &= 2ig\nu \langle 1_\alpha | \sigma_+(t) | \emptyset \rangle [A(t) \langle \emptyset | \sigma_-(t) | 1_\beta \rangle \\ &+ B(t) \langle \emptyset | \sigma_-(t) | 1_\alpha \rangle] - ig\nu [\chi A(t) + B(t)], \end{aligned} \quad (2.326)$$

де функції $A(t) = \int dp e^{-i v_g p t} \alpha_p$ та $B(t) = \int dp e^{-i v_g p t} \beta_p$. Рівняння руху для матричного елемента $\langle 1_\beta | \sigma_-(t) | 2 \rangle$ можна отримати взаємною зміною індексів α на β та $A(t)$ на $B(t)$ у рівнянні (2.326). Явний вираз для $\langle \emptyset | \sigma_- | 1_{\alpha,\beta} \rangle$ випливає з рівнянь (1.18) та (2.25) та має такий вигляд

$$\langle \emptyset | \sigma_-(t) | 1_\alpha \rangle = -ig \int_0^t d\tau e^{-(i\Delta_a + \Gamma/2)(t-\tau)} A(\tau). \quad (2.33)$$

Рівняння для $\langle \emptyset | \sigma_-(t) | 1_\beta \rangle$ отримується зміною $A(t)$ на $B(t)$. Для зручності вважатимемо, що $t_0 = 0$.

Еволюція населеності збудженого стану кубіта $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle = (\langle \sigma_z \rangle + 1)/2$ для різних значень параметрів Γ , Δ_a та L показана на Рис. 2.4. Обчислення показують, що найбільше збудження кубіта досягається коли $L = 0$ та спектральна ширина вхідного хвильового пакета $\gamma_0 = v_g/w$ близька до швидкості спонтанного розпаду збудженого стану кубіта $\gamma_0 \sim \Gamma$. Змен-

шення чи збільшення Γ призводить до того, що кубіт збуджується менш ефективно. Ці результати продемонстровані на Рис. 2.4(а). Збільшення величини $|\Delta_a|$ призводить до зменшення ефективності збудження кубіта, що показано на Рис. 2.4(б). У граничному випадку $|\Delta_a| \gg \Gamma$ ймовірність знаходження кубіта у збудженому стані $|e\rangle$ прямує до нуля. Рисунок 2.4(в) показує як динаміка населеності збудженого стану кубіта змінюється для різних значень відстані L між однофотонними пакетами. Для $L < v_g/\Gamma$ час, протягом якого кубіт перебуває у збудженому стані $|e\rangle$, збільшується при збільшенні L , однак, максимальне значення населеності збудженого рівня падає. Подальше збільшення L призводить до того, що часова залежність населеності збудженого стану набуває двопікової структури. При $L \gg v_g/\Gamma$ поведінка кубіта відповідає збудженню двома незалежними однофотонними хвильовими пакетами, оскільки перед тим, як другий фотон досягне кубіта, останній має достатньо часу щоб зрелаксувати та «забути» про перший фотон. Результати представлені на Рис. 2.4 демонструють можливість контролю стану кубіта регулюванням взаємодії між атомом та полем хвильоводу та параметрами вхідного хвильового пакету.

2.4.2 Еволюція хвильового пакету у фазовому просторі

Використовуючи (1.34) оператор розподілу фотонів у l -моді можна представити у такому вигляді

$$\hat{f}_l(x, p, t) = \frac{1}{2\pi} \int d\xi e^{ip\xi} l^\dagger(x + \xi/2, t) l(x - \xi/2, t). \quad (2.34)$$

Підстановка виразу (1.35a) в (2.34) та врахування співвідношень

$$\tilde{l}(x, t)|2\rangle = \frac{\nu}{\sqrt{2\pi}} \left[A(t - \frac{x}{v_g}) |1_\beta\rangle + B(t - \frac{x}{v_g}) |1_\alpha\rangle \right], \quad (2.35a)$$

$$\tilde{r}(x, t)|2\rangle = 0, \quad (2.35b)$$

дає такий вираз для середнього значення функції розподілу фотонів у l -моді хвилевода:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{f}_l(x, p, t) \rangle &= \langle \tilde{f}_l(x, p, t) \rangle \\
&+ \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-2x/v_g}^{2x/v_g} d\tau e^{-i v_g p \tau} \langle \sigma_+(t' + \frac{\tau}{2}) \sigma_-(t' - \frac{\tau}{2}) \rangle \Big|_{t'=t-x/v_g} \\
&- i \frac{g\nu}{2\pi} \int_{2(x/v_g-t)}^{2x/v_g} d\tau e^{i v_g p \tau} A^*(t' - \frac{\tau}{2}) \langle 1_\beta | \sigma_-(t' + \frac{\tau}{2}) | 2 \rangle \Big|_{t'=t-x/v_g} \\
&- i \frac{g\nu}{2\pi} \int_{2(x/v_g-t)}^{2x/v_g} d\tau e^{i v_g p \tau} B^*(t' - \frac{\tau}{2}) \langle 1_\alpha | \sigma_-(t' + \frac{\tau}{2}) | 2 \rangle \Big|_{t'=t-x/v_g} \\
&+ i \frac{g\nu}{2\pi} \int_{2(x/v_g-t)}^{2x/v_g} d\tau e^{-i v_g p \tau} A(t' - \frac{\tau}{2}) \langle 2 | \sigma_+(t' + \frac{\tau}{2}) | 1_\beta \rangle \Big|_{t'=t-x/v_g} \\
&+ i \frac{g\nu}{2\pi} \int_{2(x/v_g-t)}^{2x/v_g} d\tau e^{-i v_g p \tau} B(t' - \frac{\tau}{2}) \langle 2 | \sigma_+(t' + \frac{\tau}{2}) | 1_\alpha \rangle \Big|_{t'=t-x/v_g}.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Перший доданок у правій частині рівняння (2.36) описує вільне поширення вхідного хвильового пакета. Середнє значення функції розподілу $\langle \tilde{f}_l(x, p, t) \rangle$ для спектральних розподілів вхідних імпульсів (2.24) та (2.8) виражається як

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{f}_l(x, p, t) \rangle &= \frac{\nu^2}{\pi} e^{-p^2 w^2} \left[e^{-X^2(t)/w^2} + e^{-[X(t)+L]^2/w^2} \right. \\
&\quad \left. + 2 \cos(pL) e^{-L^2/4 w^2} e^{-[X(t)+L/2]^2/w^2} \right],
\end{aligned} \tag{2.37}$$

де $X(t) = x - x_0 - v_g t$. Інтегрування $\langle \tilde{f}_l(x, p, t) \rangle$ по хвильовим векторам p дає розподіл густини фотонів у конфігураційному просторі (2.31).

Другий та третій доданки в правій частині рівняння (2.36) виникають через взаємодію між вхідним хвильовим пакетом та кубіт. Ці доданки відмінні від нуля тільки в області простору $x > 0$. Межі інтегрування встановлюються θ -функціями в рівняннях (1.35а) та (1.35б). Другий доданок в правій частині виразу (2.36) описує l -моду поля, яке перевипромінилось кубітом. Третій доданок в правій частині виразу (2.36) описує інтерференцію вхідного поля та поля, яке перевипромінив кубіт.

Оператор розподілу фотонів у r -моді, $\hat{f}_r(x, p, t)$, отримується заміною l на r у виразі (2.34). Використовуючи рівняння (1.35б) та (2.35б), отримаємо функцію розподілу фотонів $\langle \hat{f}_r(x, p, t) \rangle$ такого вигляду

$$\langle \hat{f}_r(x, p, t) \rangle = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{2x/v_g}^{-2x/v_g} d\tau e^{i v_g p \tau} \langle \sigma_+(t' + \frac{\tau}{2}) \sigma_-(t' - \frac{\tau}{2}) \rangle \Big|_{t'=t+x/v_g}. \quad (2.38)$$

Цей розподіл ненульовий в області $x < 0$ та збігається з другим доданком у правій частині виразу (2.36), де v_g замінено на $-v_g$ завдяки симетрії системи.

З рівнянь (2.36) та (2.38) випливає, що для обчислення розподілу фотонів у фазовому просторі треба обчислити корелятор $\langle \sigma_+(t) \sigma_-(t') \rangle$ та матричні елементи $\langle 1_{\alpha, \beta} | \sigma_-(t) | 2 \rangle$. Використовуючи рівняння (1.18), отримаємо рівняння еволюції корелятора $\langle \sigma_+(t) \sigma_-(t') \rangle$:

$$\begin{aligned} \left(\partial_t - i \Delta_a + \frac{\Gamma}{2} \right) \langle \sigma_+(t) \sigma_-(t') \rangle = & i g \nu [A^*(t) \langle 1_\beta | + B^*(t) \langle 1_\alpha |] \sigma_-(t') | 2 \rangle \\ & - 2 i g \nu A^*(t) \langle 1_\beta | \sigma_+(t) | \emptyset \rangle \langle \emptyset | \sigma_-(t) \sigma_-(t') | 2 \rangle \\ & - 2 i g \nu B^*(t) \langle 1_\alpha | \sigma_+(t) | \emptyset \rangle \langle \emptyset | \sigma_-(t) \sigma_-(t') | 2 \rangle. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Рівняння руху для матричного елемента $\langle \emptyset | \sigma_-(t) \sigma_-(t') | 2 \rangle$ має такий ви-

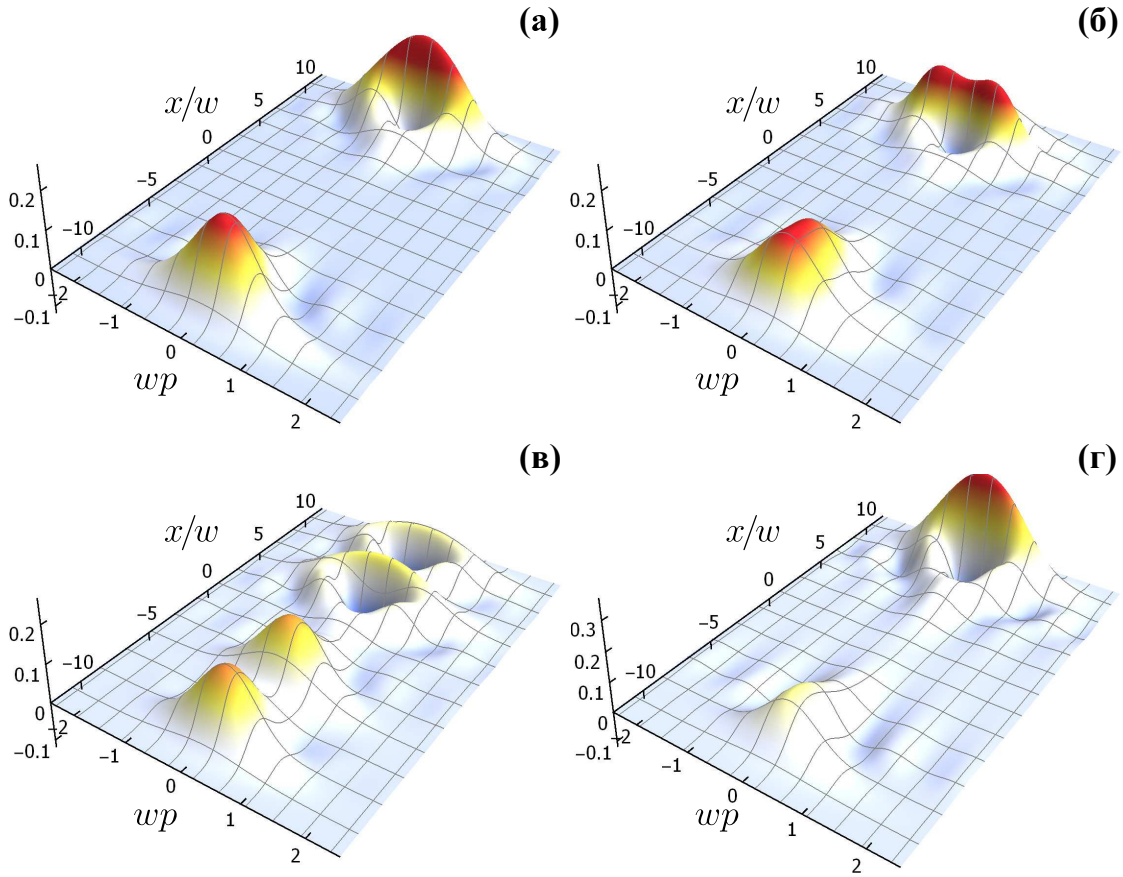


Рис. 2.5. Функція розподілу фотонів у фазовому просторі після взаємодії хвильового пакету з кубітом для різних значень параметрів Γ та L . Обчислення проведено для резонансного випадку $\Delta_a = 0$ та при $t = (10w + |x_0|)/v_g$, $x_0 = -10w$. Решта параметрів системи такі: (а) $\Gamma = \gamma_0$, $L = 0$; (б) $\Gamma = \gamma_0$, $L = 2w$; (в) $\Gamma = \gamma_0$, $L = 5w$; (г) $\Gamma = 2\gamma_0$, $L = 0$.

ГЛЯД

$$\left(\partial_t + i\Delta_a + \frac{\Gamma}{2} \right) \langle \emptyset | \sigma_-(t) \sigma_-(t') | 2 \rangle = -ig\nu [A(t) \langle \emptyset | \sigma_-(t') | 1_\beta \rangle + B(t) \langle \emptyset | \sigma_-(t') | 1_\alpha \rangle]. \quad (2.40)$$

Використовуючи властивість $\sigma_-(t) | 1_{\alpha,\beta} \rangle = [\langle 1_{\alpha,\beta} | \sigma_+(t) \rangle]^\dagger$ та співвідношення

$$\sigma_-(t) | 1_{\alpha,\beta} \rangle = \langle \emptyset | \sigma_-(t) | 1_{\alpha,\beta} \rangle | \emptyset \rangle, \quad \langle 1_{\alpha,\beta} | \sigma_+(t) = \langle \emptyset | \sigma_-(t) | 1_{\alpha,\beta} \rangle^* \langle \emptyset |, \quad (2.41)$$

отримаємо праву частину рівнянь (2.39) та (2.40). Покажемо звідки беру-

ться співвідношення (2.41) використавши розв'язки рівняння (1.18). Враховуючи співвідношення $\sigma_-(t)|0\rangle = \tilde{\sigma}_-(t)|1_{\alpha,\beta}\rangle = 0$ та рівняння (1.19), отримуємо такий результат

$$\overbrace{\sigma_-(t)|1_\alpha\rangle}^{C_\alpha(t)} = -ig \int_{t_0}^t d\tau e^{-(i\Delta_a + \Gamma/2)(t-\tau)} A(\tau) |\emptyset\rangle. \quad (2.42)$$

Відповідний вираз для стану $\sigma_-(t)|1_\beta\rangle$ можна отримати заміною $A(t)$ на $B(t)$ в (2.42). Отже, дія оператора $\sigma_-(t)$ на однофотонний стан $|1_{\alpha,\beta}\rangle$ породжує вакуумний стан $|\emptyset\rangle$: $\sigma_-(t)|1_{\alpha,\beta}\rangle = C_{\alpha,\beta}(t)|\emptyset\rangle$, де множник $C_{\alpha,\beta}(t)$ виражається як (2.42). Це означає, що стан $\sigma_-(t)|1_{\alpha,\beta}\rangle$ можна представити як

$$\sigma_-(t)|1_{\alpha,\beta}\rangle = \langle\emptyset|0|\sigma_-(t)|1_{\alpha,\beta}\rangle|\emptyset\rangle, \quad (2.43)$$

де $\langle\emptyset|\sigma_-(t)|1_{\alpha,\beta}\rangle \equiv C_{\alpha,\beta}(t)$.

В (2.39) вважаємо, що $t > t'$. Для $t < t'$ можна використати співвідношення $\langle\sigma_+(t')\sigma_-(t)\rangle = \langle\sigma_+(t)\sigma_-(t')\rangle^*$. При $t = t'$ маємо $\langle\sigma_+(t)\sigma_-(t')\rangle|_{t=t'} = \langle\sigma_+\sigma_-\rangle|_t$ та $\langle\emptyset|\sigma_-(t)\sigma_-(t')|2\rangle|_{t=t'} = 0$.

Рисунок 2.5 демонструє функцію розподілу фотонів після взаємодії з кубітом для різних значень параметрів L та Γ . На відміну від усяди позитивної функції розподілу вхідного пакету (2.37), функція розподілу фотонів, що пройшли кубіт ($x > 0$), має виражений «провал», в якому функція розподілу може набувати від'ємних значень. Аналогічно до випадку розсіяння однофотонних хвильових пакетів, який вивчався у частині 2.3, ця особливість функції розподілу фотонів виникає внаслідок анти-кореляції між станами поля хвилевода та станом кубіта. У разі, коли однофотонні компоненти вхідного двофотонного імпульсу (2.28) сильно перекриваються ($L < 2w$), «провал» функції розподілу є менш вираженим порівняно з випадком однофотонного вхідного стану. При збільшенні Γ від'ємні області

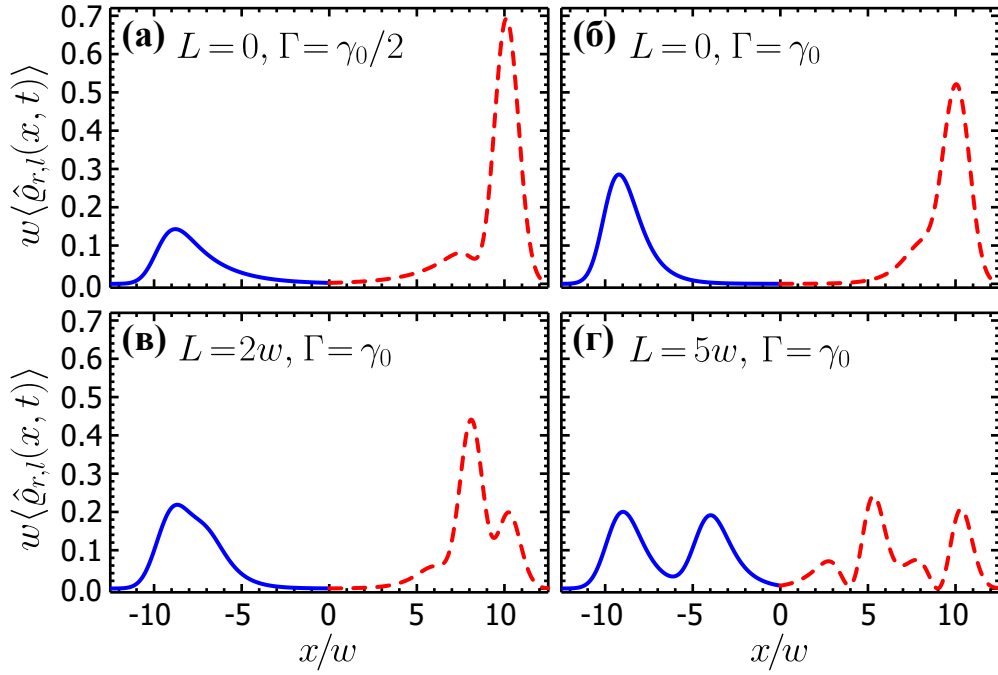


Рис. 2.6. Розподіл просторової густини фотонів, що відбилися від кубіта (суцільні сині лінії) та пройшли (штрихові червоні лінії). Решта параметрів системи такі ж як на Рис. 2.5.

функції розподілу зникають, тоді як для вхідного однофотонного стану такі області виникають за будь-яких значень Γ . Причина цього «обміління» області від’ємних значень полягає у тому, що у двофотонному випадку при збільшенні Γ внесок доданку, який описує процес перевипромінювання кубіта у виразі (2.36), починає переважати внесок інтерференційного доданку.

2.4.3 Просторова густина та спектр розсіяних фотонів

Середнє значення просторової густини фотонів $\langle \hat{\rho}_{l,r}(x, t) \rangle$ можна отримати використавши співвідношення (2.4), що одразу дає такий вираз

$$\langle \hat{\rho}_{l,r}(x, t) \rangle = \int dp \langle \hat{f}_{l,r}(x, p, t) \rangle \quad (2.44)$$

Результати обчислення $\langle \hat{\rho}_{l,r}(x, t) \rangle$ показані на Рис. 2.6. Обчислення показують поведінку аналогічну випадку вхідного однофотонного хвильового пакету – ймовірність відбиття збільшується при збільшенні швидкості спо-

нанного розпаду збудженого стану кубіта Γ або зменшенні довжини вхідного хвильового пакету w [87, 16, 20]. Це є наслідком того, що збільшення взаємодії між кубітом та хвилеводом (або збільшення довжини вхідного хвильового пакету) призводить до більш вираженої деструктивної інтерференції, яка призводить до збільшення відбиття.

Аналогічні міркування застосовні також для пояснення особливостей спектра випромінювання, що розсіялось на кубіті. Для лінійного дисперсійного співвідношення хвилевода маємо залежність між хвильовим вектором (імпульсом) фотона та його частотою: $p = \pm(\omega - \omega_0)/v_g$, де знак «+»/«-» відповідає l/r -моді. У такому разі, розподіл спектральної густини (спектр) фотонів, що розсіялись, визначається як

$$\langle \hat{n}_{l,r}(\omega, t) \rangle = \int dx \langle \hat{f}_{l,r}(x, \pm(\omega - \omega_0)/v_g, t) \rangle.$$

Рисунок 2.7 демонструє спектри випромінювання, що розсіялось, для різних параметрів системи. Спектр випромінювання кубіта у хвилеводі має максимум на частоті ω_a та ширину лінії Γ . Найбільшого збудження верхнього рівня кубіта $|e\rangle$ та максимального відбиття фотонів можна досягти за умови резонансу $\omega_0 = \omega_a$. У разі, якщо спектральна ширина вхідного хвильового пакету більша за ширину лінії спонтанного випромінювання кубіта, тільки компоненти хвильового пакету з частотами близькими до резонансу $\omega - \omega_0 = \Delta_a$ взаємодіють з кубітом найбільше. Тоді як спектральні компоненти хвильового пакета з частотами відділеними від частоти кубіта ω_a поширюються майже без взаємодії з кубітом. Цим пояснюється те, що спектр відбитого випромінювання має максимум на частоті $\omega - \omega_0 = \Delta_a$ та ширину Γ , тоді як спектр випромінювання, що пройшло кубіт, має виражений локальний мінімум на частоті $\omega - \omega_0 = \Delta_a$. Для $\Delta_a = 0$ спектри випромінювання, що відбилось та пройшло, є симетричними відносно точки $\omega - \omega_0 = 0$, а для $\Delta_a \neq 0$ спектри стають асиметричними, як показано

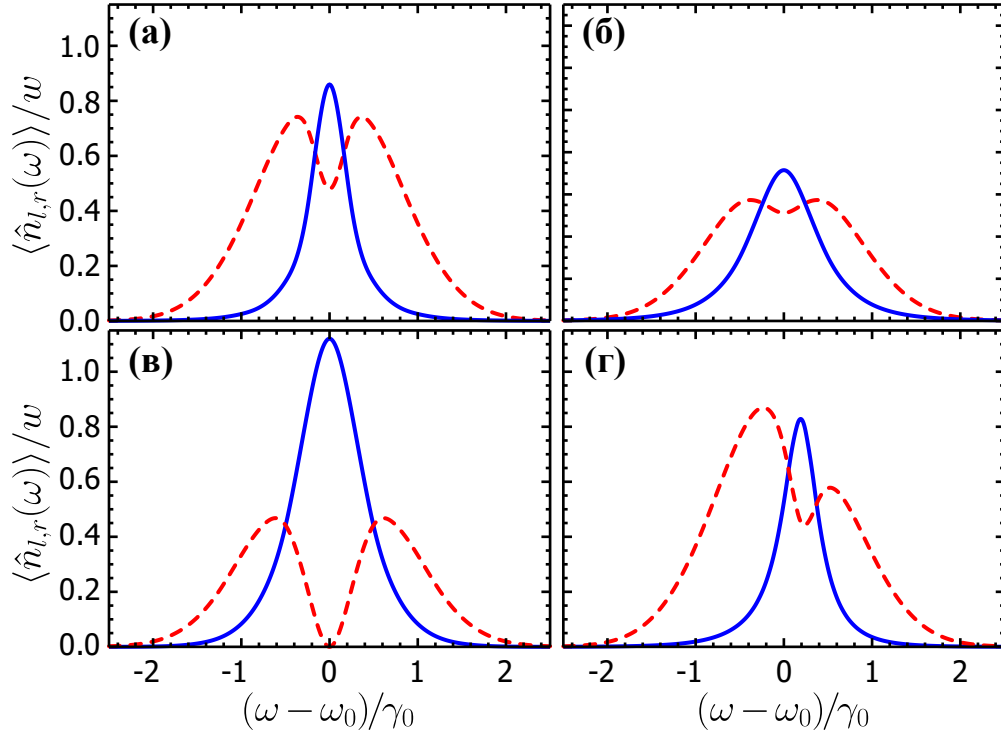


Рис. 2.7. Спектри випромінювання, що пройшло (червоні пунктирні лінії) та відбилося (сині суцільні лінії). Параметри, які використовувались для обчислень такі: (а) $\Gamma\tau_p = 1/2$, $L = 0$, $\Delta_a = 0$; (б) $\Gamma\tau_p = 1$, $L = 0$, $\Delta_a = 0$; (в) $\Gamma\tau_p = 1$, $L = 10w$, $\Delta_a = 0$; (г) $\Gamma\tau_p = 1/2$, $L = 0$, $\Delta_a = \gamma_0/5$. Решта параметрів збігаються з тими, що використовувались для обчислень на Рис. 2.6.

на Рис. 2.7. Варто зауважити, що у випадку вхідного двофотонного хвильового пакету (окрім граничного випадку $L \gg w$) спектральна густина фотонів, що пройшли кубіт, $\langle \hat{n}_l(\omega) \rangle$ не обертається в нуль при $\omega - \omega_0 = \Delta_a$, тоді як у випадку однофотонного хвильового пакету спектральна густина випромінювання, що пройшло, має нульове значення на цій частоті [20]. Така відмінність виникає через те, що дворівневий атом не може поглинути більше одного фотона в один момент часу, тобто є *квантовою нелінійною системою з насиченням*.

2.4.4 Статистика фотонів

Флуктуації кількості фотонів у світлі, що розсіялось на кубіті, можна описати за допомогою дисперсії кількості фотонів $\langle \delta \hat{N}_\mu^2 \rangle = \langle (\hat{N}_\mu - \langle \hat{N}_\mu \rangle)^2 \rangle$,

$\mu \in \{l, r\}$. Надалі розглядатимемо довгі часи еволюції системи, коли виконується умова (1.44). За цієї умови, система знаходиться у стані, в якому кубіт повернувся у основний стан $|g\rangle$, а фотони поширюються у хвильоводі як вільні збудження. Середня кількість фотонів, що розсіялись в l та r моди, пов'язана співвідношенням

$$\langle \hat{N}_l \rangle = \langle \hat{N}_0 \rangle - \langle \hat{N}_r \rangle, \quad (2.45)$$

де $\hat{N}_0 = \hat{N}_l(t = 0)$ – оператор кількості фотонів у вхідному хвильовому пакеті. Використовуючи співвідношення (2.45) та властивість початкового стану фотонів $\langle \delta N_0^2 \rangle = 0$, отримаємо, що $\langle \delta \hat{N}_l^2 \rangle = \langle \delta \hat{N}_r^2 \rangle$. Для обчислення $\langle \delta \hat{N}_r^2 \rangle$ маємо визначити $\langle \hat{N}_r^2 \rangle$ та $\langle \hat{N}_r \rangle$. Середня кількість відбитих фотонів $\langle \hat{N}_r \rangle$ визначається як $\langle \hat{N}_r \rangle = \int dx \int dp \langle \hat{f}_r(x, p) \rangle$. Використовуючи рівняння (2.38), отримаємо такий результат:²

$$\langle \hat{N}_r \rangle = \frac{\Gamma}{2} \int_0^t d\tau \langle \sigma_+ \sigma_- \rangle_\tau, \quad (2.46)$$

де $\langle \sigma_+ \sigma_- \rangle$ описується рівнянням (2.32a). Для $\hat{N}_r^2$ можемо використати таке представлення

$$\hat{N}_r^2 = \int dx_1 \int dx_2 r^\dagger(x_1) r^\dagger(x_2) r(x_2) r(x_1) + \hat{N}_r \quad (2.47)$$

Враховуючи рівняння (1.356) та (2.356) отримаємо

$$\langle \hat{N}_r^2 \rangle = \frac{\Gamma^2}{2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' \langle \sigma_+(\tau') \sigma_+(\tau) \sigma_-(\tau) \sigma_-(\tau') \rangle + \langle \hat{N}_r \rangle.$$

²Ідентичний вираз отримано у Розділі 1.5.3 – рівняння (1.43a).

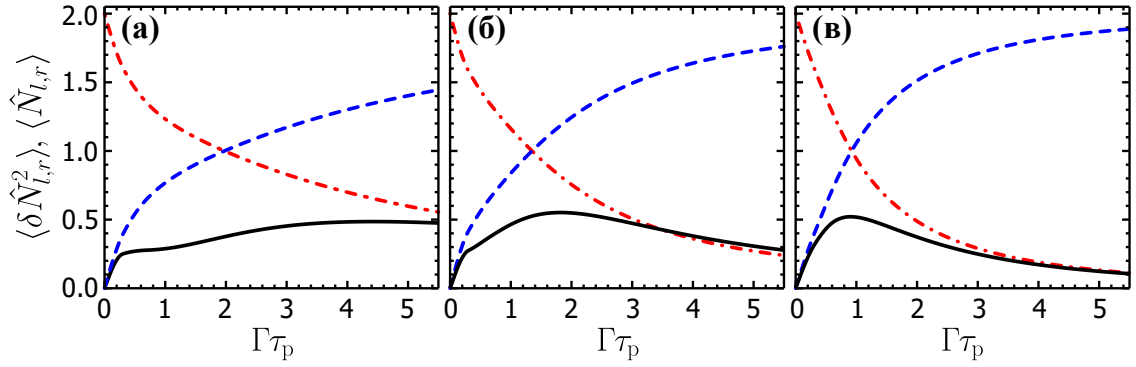


Рис. 2.8. Залежність дисперсії кількості фотонів, що розсіялись на кубіті (суцільні чорні лінії) та середньої кількості фотонів, що відбилися (штрихові сині лінії) та пройшли (штрих-пунктирні червоні лінії), від Γ для різних значень L у випадку $\Delta_a = 0$: (а) $L = 0$, (б) $L = 2w$, та (в) $L = 5w$.

Покажемо, що виконується таке співвідношення

$$\sigma_-(t) \sigma_-(t') |2\rangle = \langle \emptyset | \sigma_-(t) \sigma_-(t') |2\rangle | \emptyset \rangle. \quad (2.48)$$

Використовуючи вирази (1.14), (2.26) та (2.27), рівняння руху для стану $\sigma_-(t) \sigma_-(t') |2\rangle$ при $t > t'$ має такий вигляд

$$\begin{aligned} \left(\partial_t + i \Delta_a + \frac{\Gamma}{2} \right) \sigma_-(t) \sigma_-(t') |2\rangle &= 2i g \nu \sigma_+(t) \sigma_-(t) \sigma_-(t') [A(t) |1_\beta\rangle + B(t) |1_\alpha\rangle] \\ &\quad - i g \nu \sigma_-(t') [A(t) |1_\beta\rangle + B(t) |1_\alpha\rangle]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Формальний розв'язок цього рівняння записується як

$$\sigma_-(t) \sigma_-(t') |2\rangle = i g \nu \int_{t'}^t d\tau e^{-(i \Delta_a + \Gamma/2)(t-\tau)} \sigma_z(\tau) \sigma_-(t') [A(\tau) |1_\beta\rangle + B(\tau) |1_\alpha\rangle].$$

Завдяки співвідношенню (2.43) та властивості $\sigma_+ \sigma_- |\emptyset\rangle = 0$ отримаємо

$$\sigma_-(t) \sigma_-(t') |2\rangle = -ig\nu \int_{t'}^t d\tau e^{-(i\Delta_a + \Gamma/2)(t-\tau)} [A(\tau) C_\beta(t') + B(\tau) C_\alpha(t')] |\emptyset\rangle, \quad (2.50)$$

з чого випливає співвідношення (2.48). Використовуючи (2.48), отримаємо для $\langle \hat{N}_r^2 \rangle$ такий вираз

$$\langle \hat{N}_r^2 \rangle = \frac{\Gamma^2}{2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' |\langle \emptyset | \sigma_-(\tau) \sigma_-(\tau') |2\rangle|^2 + \langle \hat{N}_r \rangle, \quad (2.51)$$

де матричний елемент $\langle \emptyset | \sigma_-(t) \sigma_-(t') |2\rangle$ описується рівнянням (2.40).

Результати обчислень, представлені на Рис. 2.8, показують, що при збільшенні зв'язку кубіта з модою хвилеводу, середня кількість відбитих фотонів збільшується. Така закономірність стає більш вираженою при збільшенні відстані між однофотонними компонентами вхідного хвильового пакету L . Дисперсія кількості відбитих від кубіта фотонів є меншою за їхню середню кількість при всіх значеннях Γ та L , що вказує на субпуассонівську статистику. Фотони, що пройшли кубіт, можуть мати як супер- так і субпуассонівську статистику залежно від значень параметрів Γ та L .

2.5 Висновки

У цьому розділі досліджено розсіяння одно- та двофотонних хвильових пакетів на дворівневому атомі (кубіті) в одновимірному хвилеводі. Для опису еволюції хвильового пакету використано підхід функції розподілу фотонів у фазовому (x, p) -просторі. Ми отримали та розв'язали замкнену систему рівнянь руху, які описують еволюцію таких величин як населеність збудженого рівня кубіта, функція розподілу фотонів та кількість фотонів у l - та r -моді у довільний момент часу. Ми визначили, що внаслідок ан-

тикореляції між станами поля хвилеводу та кубіта утворюється локальний мінімум («провал») у функції розподілу фотонів, що пройшли кубіт. У випадку однофотонного вхідного імпульсу цей «провал» при будь-яких параметрах системи досягає від’ємних значень. Отже, функція розподілу фотонів є розподілом густини *квазіймовірності* знаходження фотона у точці (x, p) -простору. У випадку вхідного хвильового пакету у двофотонному стані також утворюється «провал» функції розподілу фотонів, що пройшли. Однак область від’ємних значень функції розподілу виникають лише при певних значеннях параметра зв’язку кубіта з модою хвилеводу g та відстані між однофотонними компонентами вхідного хвильового пакету L . Розподіл спектральної густини фотонів, що пройшли кубіт, має локальний мінімум на частоті переходу кубіта. Отже, кубіт діє як спектральний фільтр для фотонів. У випадку вхідного хвильового пакету в однофотонному стані, на цій частоті спектральна густина має нульове значення незалежно від сили зв’язку кубіта з хвилеводом та довжини (тривалості) вхідного хвильового пакету.

Ми дослідили флуктуації кількості фотонів, що розсіялись, у випадку вхідного хвильового пакету у двофотонному стані. Ми визначили залежність дисперсії кількості фотонів, що розсіялись, від параметра зв’язку g та відстані між однофотонними компонентами вхідного двофотонного хвильового пакету L . Обчислення показують, що відбиті фотони мають субпуассонівську статистику незалежно від значень параметрів Γ та L . Фотони, що пройшли кубіт, можуть мати суб- або суперпуассонівську статистику залежно від параметрів системи.

РОЗДІЛ 3

РОЗСІЯННЯ ФОКІВСЬКИХ СТАНІВ НА СИСТЕМІ РЕЗОНАТОР–КУБІТ

3.1 Вступ

В цьому розділі розглядається поширення одно- та двофотонних хвильових пакетів у одновимірному хіральному (однонаправленому) хвилеводі та їхнє розсіяння на локалізованому квантовому випромінювачі, що складається з одномодового резонатора зв'язаного з одиночним дворівневим атомом (кубітом). Мода резонатора перекривається з модами хірального хвилевода. Це призводить до того, що фотони можуть витікати з резонатора у хвилевід і навпаки, тобто резонатор є *відкритим*. Система резонатор-кубіт збуджується хвильовим пакетом, який поширюється у хвилеводі. На Рис. 3.1 схематично показана система хвилевід–резонатор–кубіт, яка розглядається в цьому розділі.

Система резонатор–кубіт, або система Джейнса–Каммінґса, є прикладом важливої моделі для опису взаємодії між світлом та квантовим випромінювачем. В цій системі можна спостерігати низку ефектів, таких як одно- та двофотонна блокада [122, 123, 124], фазове перемикування [125], генерація «пачок» фотонів (*photon bundles*) [126].

На практиці, модельна система хвилевід–резонатор–кубіт, яка розглядатиметься у цьому розділі, може реалізовуватись у різних фізичних системах¹. Прикладами таких систем є: фотоннокристалічні структури, які утворюють хвилеводи та резонатори для світла, що може взаємодіяти з природними атомами [122, 125], напівпровідниковими квантовими точками

¹Стислий огляд цих фізичних систем та їхніх параметрів наведено у Розділі 1.2.

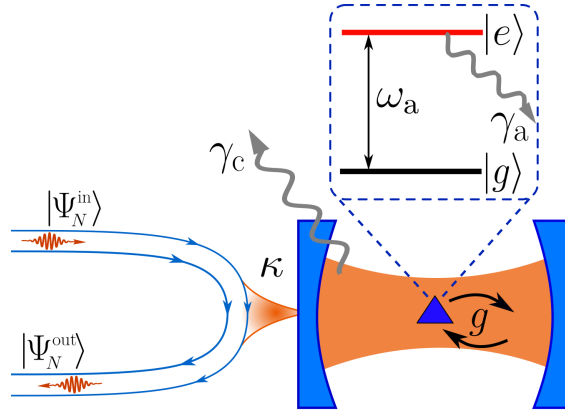


Рис. 3.1. Схематичне зображення системи хвилевід-резонатор-кубіт. Хіральний одновимірний хвилевід взаємодіє із системою резонатор-кубіт. Константа зв'язку резонатора з кубітом – g . Параметр κ – швидкість витікання випромінювання з моди резонатора у хвилевід. Швидкості дисипації резонатора та кубіта – γ_c та γ_a , відповідно.

[48], чи центрами забарвлення [72, 73]; оптичні нановолокна зв'язані з *whispering gallery mode* резонаторами, що взаємодіють з холодними атомами утримуваними біля їхньої поверхні [127]; надпровідні квантові електричні кола, в яких нелінійні властивості джозефсонівських контактів використовуються для створення штучних атомів [56, 128, 47]. Однак загальні властивості цього розмаїття фізичних систем можуть описуватись спільною математичною моделлю, яка обговорюватиметься нижче.

На відміну від випадку розсіяння фотонів на дворівневому атомі (кубіті), який розглядався в Розділі 2, взаємодія світла з системою резонатор-кубіт є більш складним процесом. Зв'язок резонатора з дворівневим атомом (кубітом) призводить до виникнення ефекту *фотонної блокади*. Цей ефект полягає у тому, що система резонатор-кубіт може містити тільки одне збудження у певний момент часу.

Розсіяння фоківських станів на системі резонатор-дворівневий атом вивчалось у низці робіт [82, 109, 111]. У цих роботах розраховувалась одно- та двофотонна матриця розсіяння (S матриця) використовуючи різні підходи, такі як координатний анзац Бете [82], формалізм Леманна-Сіманзіка-

Ціммермана (*Lehmann-Symanzik-Zimmerman formalism*) [109], та формалізм операторів «вхід-вихід» [111]. Зазначимо, що матриця розсіяння містить інформацію тільки про асимптотичну (довгочасову) поведінку системи. Для того, щоб описати повну еволюцію квантового стану системи необхідно використовувати інші підходи такі, наприклад, як підхід хвильової функції. Цей підхід використовувався, наприклад, для вивчення поширення одно- та багатофотонних хвильових пакетів у хвилеводі з одним чи декількома дворівневими атомами [14, 115, 92, 104, 105, 106], поширення однофотонних пакетів у хвилеводі з ланцюжком неідентичних дворівневих атомів [116], взаємодію одно- [117] та двофотонних хвильових пакетів [118] із системою резонатор-атом, та в системах з когерентним квантовим зворотнім зв'язком [119, 120]. Детальну інформацію про стан системи можна отримати, якщо відома її залежна від часу хвильова функція. Останню можна визначити шляхом розв'язку системи рівнянь руху для амплітуд ймовірностей, які визначають повний квантовий стан системи. Ця система звичайних диференціальних рівнянь може розв'язуватись або чисельно, використовуючи один з багатьох відомих обчислювальних методів, або, у деяких випадках, аналітично. Саме підхід хвильової функції застосовуватиметься в цьому розділі для вивчення розсіяння хвильових пакетів у фоківських станах на системі резонатор-кубіт в одновимірному хвилеводі.

3.2 Гамільтоніан моделі та рівняння руху операторів

Система хвилевід–резонатор–дворівневий атом, яка розглядається в цьому розділі, описується таким гамільтоніаном [82, 111, 129, 130]:

$$\hat{\mathcal{H}} = \overbrace{\omega_c a^\dagger a + \omega_a \sigma_+ \sigma_- + g (a^\dagger \sigma_- + \sigma_+ a)}^{\hat{\mathcal{H}}_{\text{JC}}} + \underbrace{\int_0^\infty d\omega \omega b_\omega^\dagger b_\omega}_{\hat{\mathcal{H}}_w} + \underbrace{f \int_0^\infty d\omega (b_\omega^\dagger a + a^\dagger b_\omega)}_{\hat{\mathcal{H}}_t}. \quad (3.1)$$

Як і в Розділах 1 та 2, для зручності вважатимемо, що $\hbar \equiv 1$, а отже, енергія вимірюється в одиницях частоти.

Перші три доданки у правій частині гамільтоніану (3.1) описують систему резонатор–кубіт та утворюють гамільтоніан моделі Джейнса–Каммінгса (*Jaynes-Cummings model*) $\hat{\mathcal{H}}_{\text{JC}}$ [139]. Перший доданок у $\hat{\mathcal{H}}_{\text{JC}}$ описує вільну моду резонатора з частотою ω_c , де a ($a^\dagger$) – бозонний оператор знищення (створення) фотона у моді резонатора. Другий доданок в гамільтоніані описує дворівневий атом (кубіт) з частотою переходу ω_a між основним станом $|g\rangle$ та збудженим станом $|e\rangle$. Ми ввели оператори підвищення $\sigma_+ = |e\rangle\langle g|$ та пониження $\sigma_- = |g\rangle\langle e|$ стану кубіта. Ці оператори пов’язані з матрицями Паулі як $\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-$, $i\sigma_y = \sigma_+ - \sigma_-$ та $\sigma_z = 2\sigma_+\sigma_- - 1$. Гамільтоніан взаємодії резонатора з кубітом, представлений третім доданком у 3.1, записаний у наближенні обертової хвилі, тобто мають виконуватись такі критерії

$$|\Delta_a| \ll \omega_a + \omega_c, \quad g \ll \{\omega_c, \omega_a\} \quad (3.2)$$

де $\Delta_a = \omega_a - \omega_c$, g – параметр зв’язку резонатора з кубітом. Критерії (3.2) добре працюють для широкого спектру експериментальних реалізацій квантової електродинаміки в резонаторі від мікрохвильових надпровід-

них електричних кіл до фотоннокристалічних структур, які працюють в оптичному діапазоні. Варто також зазначити істотний прогрес у створенні різноманітних систем², в яких реалізується режим надсильного зв'язку (*ultrastrong coupling*) та перестає працювати наближення обертової хвилі. Однак, режим надсильного зв'язку розглядатись у цій роботі не буде.

Доданок $\hat{\mathcal{H}}_w$ у рівнянні (3.1) описує континуум незалежних бозонних мод, що моделює хвилевід. Оператор b_ω ($b_\omega^\dagger$) знищує (створює) у хвилеводі збудження (фотон) з енергією ω . Цей оператор задовольняє стандартним одночасовим комутаційним співвідношенням $[b_\omega, b_{\omega'}^\dagger] = \delta(\omega' - \omega)$. Взаємодія хвилевода з резонатором описується доданком $\hat{\mathcal{H}}_I$, де $f \equiv \sqrt{\kappa/(2\pi)}$ – параметр зв'язку хвилевода з модою резонатора. Ми знехтували залежністю параметра зв'язку від частоти фотона вважаючи, що частота резонатора та центральна частота вхідного хвильового пакету близькі та набагато більші за спектральну ширину вхідного хвильового пакету. Це виражається такими критеріями

$$|\omega_0 - \omega_c| \ll \omega_0 + \omega_c, \quad \gamma_0 \ll \{\omega_0, \omega_c\}, \quad (3.3)$$

де ω_0 – центральна частота вхідного хвильового пакету зі спектральною шириною γ_0 . Завдяки другій умові в (3.3) можна розширити межі інтегрування по частоті фотона до $(-\infty, +\infty)$. Таке наближення вносить нехтовну похибку, оскільки спектр хвильового пакету сильно локалізований поблизу частоти ω_0 , що виражається другим критерієм у (3.3).

Модельний гамільтоніан (3.1) не містить доданків які описують взаємодію системи із зовнішніми резервуарами, що призводить до дисипації. Отже, розглядається *унітарну* еволюцію системи. Це спрощення працює, коли параметри системи задовольняють умові $\max\{\gamma_c, \gamma_a\} \ll \min\{\gamma_0, \kappa\}$, яка означає, що процеси дисипації є найповільнішими процесами в систе-

²Див., наприклад, ґрунтовні огляди [131, 132].

мі. Ми також вважаємо, що температура системи T_s задовольняє критерію $\omega_c/(k_B T_s) \gg 1$, де k_B – стала Больцмана. Якщо ця умова виконується, то кількість теплових збуджень у системі нехтовно мала

$$n_{\text{th}} = [\exp(-\frac{\omega_c}{k_B T_s}) - 1]^{-1} \ll 1.$$

Вищеназвані умови реалізуються, наприклад, у надпровідних квантових електричних колах.³

Можна показати, що оператор кількості збуджень в системі $\hat{\mathcal{N}}_{\text{ex}} = a^\dagger a + \sigma_+ \sigma_- + \int d\omega b_\omega^\dagger b_\omega$ комутує з гамільтоніаном системи (3.1) $[\hat{\mathcal{N}}_{\text{ex}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$, а отже, кількість збуджень в системі є сталою.

Гамільтоніан (3.1) породжує таке рівняння руху для змінних хвилеводу b_ω

$$i\partial_t b_\omega = [b_\omega, \hat{\mathcal{H}}] = \omega b_\omega + f a. \quad (3.4)$$

Формальний роз'язок цього рівняння записується як

$$b_\omega(t) = \tilde{b}_\omega(t) - if \int_0^t d\tau e^{-i\omega(t-\tau)} a(\tau). \quad (3.5)$$

де $\tilde{b}_\omega(t) = b_\omega(0)e^{-i\omega t}$ – оператор знищення фотона, що поширюється у хвилеводі як вільне збудження.

Рівняння руху для оператора знищення фотона у резонаторі має такий вигляд

$$(i\partial_t - \omega_c) a = g\sigma_- + f \int d\omega b_\omega. \quad (3.6)$$

Підстановка рівняння (3.5) в (3.6) та інтегрування по ω дає змогу виключити змінні резервуару (хвилевода) у рівнянні руху оператора a , що дає

³Див., наприклад, огляд [128].

рівняння такого вигляду

$$(\mathrm{i}\partial_t - \tilde{\omega}_c) a = g\sigma_- + f\beta, \quad (3.7)$$

де введено оператор $\beta(t) = \int d\omega \tilde{b}_\omega(t)$. Використовуючи рівняння (3.5) можна показати, що виконується таке комутаційне співвідношення

$$[\beta, b_\omega] = [\beta, a] = [\beta, \sigma_-] = 0. \quad (3.8)$$

Рівняння Гайзенберга для оператора σ_- мають вигляд

$$(\mathrm{i}\partial_t - \omega_a) \sigma_- = -g\sigma_z a. \quad (3.9)$$

3.3 Однофотонна задача

Розглянемо випадок збудження системи резонатор-кубіт хвильовим пакетом у однофотонному стані. Залежна від часу хвильова функція системи запишеться як суперпозиція усіх станів системи з одним збудженням:

$$|\Psi_1(t)\rangle = \left[A^g(t)a^\dagger + A^e(t)\sigma_+ + \int d\omega B_\omega(t)b_\omega^\dagger \right] |\emptyset\rangle, \quad (3.10)$$

де $|\emptyset\rangle = |\emptyset_w\rangle|\emptyset_{JC}\rangle$ – вакуумний стан всієї системи – стан без збуджень і в хвилеводі $|\emptyset_w\rangle$, і в системі резонатор-кубіт $|\emptyset_{JC}\rangle \equiv |\emptyset_c\rangle|g\rangle$. У виразі (3.10) $B_\omega(t)$ – це однофотонний розподіл густини спектральної амплітуди (або спектральний розподіл [86]), $A^g(t)$ – амплітуда стану системи з кубітом у основному стані та полем резонатора у однофотонному стані, $A^e(t)$ є амплітудою стану системи, в якому кубіт знаходиться у збудженому стані, а поле хвилевода у вакуумному стані. Зазначимо, що ми працюємо у представленні Шрьодінгера з незалежними від часу операторами, якщо не зазначено інакше. Початковий (при $t = 0$) стан системи записується у

вигляді

$$|\Psi_1^{\text{in}}\rangle = |\psi_1^{\text{in}}\rangle |\emptyset_{\text{JC}}\rangle, \quad (3.11)$$

де $|\psi_1^{\text{in}}\rangle$ – стан вхідного фотона, який виражається як

$$|\psi_1^{\text{in}}\rangle = \int d\omega \xi_\omega b_\omega^\dagger |\emptyset_{\text{w}}\rangle, \quad (3.12)$$

де ξ_ω – спектральний розподіл вхідного хвильового пакету. Функція ξ_ω задовольняє умові нормування $\int d\omega |\xi_\omega|^2 = 1$.

Використовуючи вираз для хвильової функції (3.10) формально представимо амплітуди ймовірностей однофотонних станів як

$$A^g(t) = \langle \emptyset | a(0) | \Psi_1(t) \rangle, \quad A^e(t) = \langle \emptyset | \sigma_-(0) | \Psi_1(t) \rangle, \quad B_\omega(t) = \langle \emptyset | b_\omega(0) | \Psi_1(t) \rangle.$$

Використовуючи властивість вакуумного стану системи $e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} |\emptyset\rangle = |\emptyset\rangle$ і співвідношеннями $|\Psi_1(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} |\Psi_1^{\text{in}}\rangle$ та $\hat{\mathcal{O}}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{\mathcal{O}}(0) e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}$, де $\hat{\mathcal{O}}(t)$ позначає квантовомеханічний оператор, можна перенести часову залежність зі стану системи на оператори, що дає $\langle \emptyset | \hat{\mathcal{O}}(0) | \Psi_1(t) \rangle = \langle \emptyset | \hat{\mathcal{O}}(t) | \Psi_1^{\text{in}} \rangle$. Отже, це дає таке представлення амплітуд ймовірностей:

$$A^g(t) = \langle \emptyset | a(t) | \Psi_1^{\text{in}} \rangle, \quad A^e(t) = \langle \emptyset | \sigma_-(t) | \Psi_1^{\text{in}} \rangle, \quad B_\omega(t) = \langle \emptyset | b_\omega(t) | \Psi_1^{\text{in}} \rangle.$$

Використовуючи ці співвідношення та рівняння Гайзенберга для відповідних операторів отримаємо систему диференціальних рівнянь, які описують еволюцію амплітуд ймовірностей:

$$(i\partial_t - \tilde{\omega}_c) A^g(t) = f\Xi(t) + gA^e(t), \quad (3.13\text{a})$$

$$(i\partial_t - \omega_a) A^e(t) = gA^g(t), \quad (3.13\text{б})$$

$$(i\partial_t - \omega) B_\omega(t) = fA^g(t), \quad (3.13\text{в})$$

де $\tilde{\omega}_c = \omega_c - i\kappa/2$. При виведенні рівнянь (3.13) ми використали співвідношення $\langle \emptyset | \sigma_z = -\langle \emptyset |$ та $\beta(t) |\Psi_1^{\text{in}}\rangle = \Xi(t) |\emptyset\rangle$, де $\Xi(t) \int d\omega e^{-i\omega t} \xi_\omega$. Початкові умови для рівнянь руху (3.13) такі: $B_\omega(0) = \xi_\omega$ та $A^g(0) = A^e(0) = 0$. Точні аналітичні розв'язки системи рівнянь (3.13) можна отримати використовуючи інтегральне перетворення Лапласа. Деталі розв'язку показані в Додатку A).

Оскільки вхідний хвильовий пакет має скінчену тривалість $\tau_p \sim \gamma_0^{-1}$ і фотони мають скінчений час життя в резонаторі $\sim \kappa^{-1}$, то у випадку довгих часів еволюції системи, тобто коли виконується умова

$$t \gg \{\gamma_0^{-1}, \kappa^{-1}\}, \quad (3.14)$$

вона досягає стаціонарного стану, в якому поле резонатора у вакуумному стані, а кубіт знаходиться в своєму основному стані $|g\rangle$, тоді як розсіяні фотони поширюються у хвилеводі як вільні збудження. Застосовуючи умову (3.14) до розв'язків системи рівнянь (3.13) отримаємо кінцевий стан системи $|\Psi_1^{\text{out}}\rangle = |\psi_1^{\text{out}}\rangle |\emptyset_{\text{JC}}\rangle$, де $|\psi_1^{\text{out}}\rangle$ – стан розсіяних фотонів. Цей стан визначається як

$$|\psi_1^{\text{out}}\rangle = \int d\omega e^{-i\omega t} e^{i\Theta_\omega} \xi_\omega b_\omega^\dagger |\emptyset_w\rangle. \quad (3.15)$$

Параметр Θ_ω – залежний від частоти однофотонний фазовий зсув індукований внаслідок взаємодії з системою резонатор-кубіт. Це зсув визначається як [82, 111, 129]:

$$\Theta_\omega = \arg \left[\frac{(\omega - \mathcal{E}_1^+)^*(\omega - \mathcal{E}_1^-)^*}{(\omega - \mathcal{E}_1^+)(\omega - \mathcal{E}_1^-)} \right]. \quad (3.16)$$

Комплексні однофотонні резонанси $\mathcal{E}_1^\pm = E_1^\pm - i\Gamma_1^\pm/2$ відкритої (тобто зв'язаної з хвилеводом) системи резонатор-кубіт визначаються як:

$$\mathcal{E}_1^\pm = \tilde{\omega}_c + \frac{\tilde{\Delta}_a}{2} \pm \frac{\mathcal{R}_1}{2}, \quad \mathcal{R}_1 = \sqrt{4g^2 + \tilde{\Delta}_a^2}, \quad (3.17)$$

де $\tilde{\Delta}_a = \omega_a - \tilde{\omega}_c$. У випадку резонансу між частотами резонатора та кубіта ($\Delta_a = 0$), маємо

$$E_1^\pm = \omega_c \pm g \sqrt{1 - \left(\frac{\kappa}{4g}\right)^2}, \quad \Gamma_1^\pm = \frac{\kappa}{2}. \quad (3.18)$$

У режимі сильного зв'язку кубіта з резонатором ($g \gg \kappa$) можна використовувати таке наближення $E_1^\pm \approx \omega_c \pm g$.

3.4 Двофотонна задача

3.4.1 Хвильова функція системи

Розглянемо тепер випадок, коли система резонатор-кубіт збуджується хвильовим пакетом у двофотонному фоківському стані. Хвильова функція системи у довільний момент часу $|\Psi_2(t)\rangle$ є суперпозицією усіх станів системи з двома збудженнями:

$$\begin{aligned} |\Psi_2(t)\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} \iint d\omega d\omega' \Phi_{\omega,\omega'}(t) b_\omega^\dagger b_{\omega'}^\dagger |\emptyset\rangle \\ & + \int d\omega [X_\omega^g(t) b_\omega^\dagger a^\dagger + X_\omega^e(t) b_\omega^\dagger \sigma_+] |\emptyset\rangle \\ & + \left[\frac{1}{\sqrt{2}} Z^g(t) (a^\dagger)^2 + Z^e(t) \sigma_+ a^\dagger \right] |\emptyset\rangle. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Перший доданок у виразі (3.19) описує стан системи з двома фотонами у хвилеводі та вакуумним станом системи резонатор-кубіт. Залежний від часу двофотонний спектральний розподіл $\Phi_{\omega,\omega'}(t)$ є симетричним відносно перестановки фотонних частот $\Phi_{\omega,\omega'}(t) = \Phi_{\omega',\omega}(t)$ через бозонну природу фотонів. Величина $|\Phi_{\omega,\omega'}(t)|^2$ – двофотонним спектром, який визначає спільний розподіл ймовірності знаходження у хвилеводі пари фотонів з частотами ω та ω' у момент часу t . Амплітуди ймовірностей $X_\omega^{g,e}(t)$ відповідають станам системи в яких і хвилевід і система резонатор-кубіт містять

по одному збудженню. Функції $Z^{g,e}(t)$ – це амплітуди ймовірностей станів, в яких поле хвилевода у вакуумному стані, а система резонатор-кубіт містить два збудження, тобто або поле резонатора містить два збудження, а кубіт знаходиться в основному стані $|g\rangle$, або одне збудження є в моді резонатора, а кубіт перебуває у збудженому стані $|e\rangle$.

Початковий стан системи у випадку вхідного хвильового пакету у двофотонному стані записується як $|\Psi_2^{\text{in}}\rangle = |\psi_2^{\text{in}}\rangle|\emptyset_{\text{JC}}\rangle$ де вхідний двофотонний стан $|\psi_2^{\text{in}}\rangle$ має такий вигляд

$$|\psi_2^{\text{in}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \iint d\omega d\omega' \Phi_{\omega,\omega'}^{\text{in}} b_{\omega}^{\dagger} b_{\omega'}^{\dagger} |\emptyset_{\text{w}}\rangle. \quad (3.20)$$

У цьому виразі $\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{in}}$ означає двофотонний спектральний розподіл вхідного хвильового пакету.

Вважаємо, що вхідний хвильовий пакет утворено парою нерозрізненних фотонів з однофотонним спектральним розподілом ξ_{ω} . У цьому випадку, функція $\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{in}}$ факторизується і її можна виразити як добуток однофотонних спектральних розподілів:

$$\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{in}} = \xi_{\omega} \xi_{\omega'}. \quad (3.21)$$

Отже, початковий стан фотонів $|\psi_2^{\text{in}}\rangle$ є сепарабельним. Цей стан можна представити у такому вигляді:

$$|\psi_2^{\text{in}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\psi_1^{\text{in}}\rangle |\psi_1^{\text{in}}\rangle. \quad (3.22)$$

Використовуючи термінологію, запропоновану *Rohde et. al* в роботі [86], тут розглядається вхідних хвильовий пакет у двофотонному *багатомодовому фоківському стані*. *Багатомодові фоківські стани* є частковим випадком ширшого класу *багатомодових багафотонних станів*.

3.4.2 Рівняння еволюції стану системи

Послуговуючись підходом, який застосовувався при виводі рівнянь руху для амплітуд ймовірностей у однофотонній задачі, представимо амплітуди ймовірностей, що входять у хвильову функцію (3.19) у вигляді

$$\begin{aligned}\Phi_{\omega,\omega'}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \emptyset | b_{\omega}(t) b_{\omega'}(t) | \Psi_2^{\text{in}} \rangle, \\ X_{\omega}^g(t) &= \langle \emptyset | b_{\omega}(t) a(t) | \Psi_2^{\text{in}} \rangle, \\ X_{\omega}^e(t) &= \langle \emptyset | b_{\omega}(t) \sigma_{-}(t) | \Psi_2^{\text{in}} \rangle, \\ Z^g(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \emptyset | a^2(t) | \Psi_2^{\text{in}} \rangle, \\ Z^e(t) &= \langle \emptyset | \sigma_{-}(t) a(t) | \Psi_2^{\text{in}} \rangle.\end{aligned}\tag{3.23}$$

Використовуючи рівняння Гайзенберга (3.4), (3.7) та (3.9), а також комутаційні співвідношення (3.8) разом зі співвідношеннями $\langle \emptyset | \sigma_{+} = 0$ та $\beta | \Psi_2^{\text{in}} \rangle = \sqrt{2} \Xi(t) | \Psi_1^{\text{in}} \rangle$, виведем рівняння руху для амплітуд ймовірностей.

Рівняння руху, яке описує еволюцію двофотонного спектра $\Phi_{\omega,\omega'}(t)$ має вигляд

$$[i\partial_t - (\omega + \omega')] \Phi_{\omega,\omega'}(t) = \frac{f}{\sqrt{2}} [X_{\omega}^g(t) + X_{\omega'}^g(t)].\tag{3.24}$$

Початковою умовою для цього рівняння є $\Phi_{\omega,\omega'}(0) = \Phi_{\omega,\omega'}^{\text{in}}$. Решта амплітуд ймовірностей в (3.19) при $t = 0$ обертаються в нуль та описуються такими рівняннями руху:

$$[i\partial_t - (\omega + \tilde{\omega}_c)] X_{\omega}^g(t) = f\sqrt{2}\Xi(t)B_{\omega}(t) + gX_{\omega}^e(t) + f\sqrt{2}Z^g(t),\tag{3.25a}$$

$$[i\partial_t - (\omega + \omega_a)] X_{\omega}^e(t) = gX_{\omega}^g(t) + fZ^e(t),\tag{3.25б}$$

$$[i\partial_t - 2\tilde{\omega}_c] Z^g(t) = 2f\Xi(t)A^g(t) + g\sqrt{2}Z^e(t),\tag{3.25в}$$

$$[i\partial_t - (\tilde{\omega}_c + \omega_a)] Z^e(t) = f\sqrt{2}\Xi(t)A^e(t) + g\sqrt{2}Z^g(t).\tag{3.25г}$$

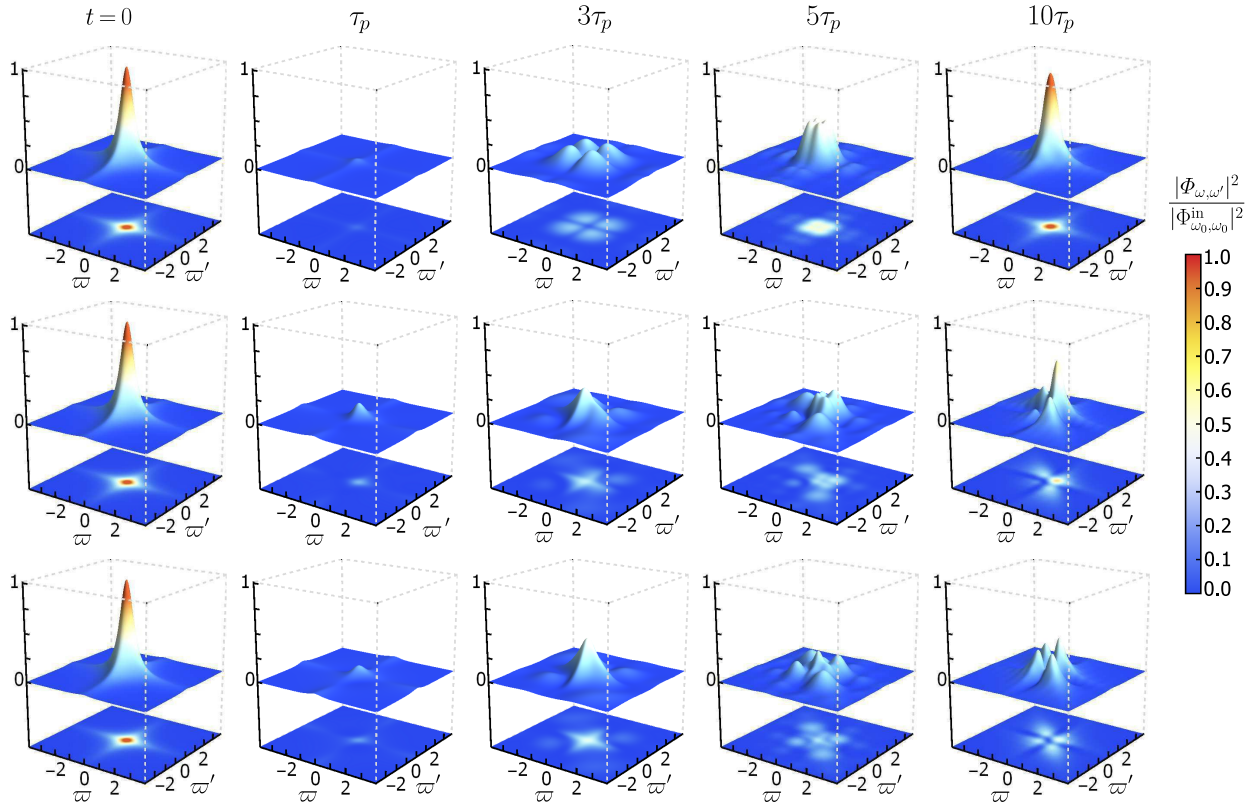


Рис. 3.2. «Моментальні знімки» еволюції двофотонного спектра в процесі розсіяння хвильового пакету на системі резонатор-кубіт для різних параметрів системи. Для розрахунків вважаємо, що резонатор та кубіт у резонансі ($\Delta_a = 0$), система резонатор-кубіт збуджується на одній зі своїх однофотонних власних частот $\omega_0 = E_1^+$. Решта параметрів такі: $\gamma_0/\kappa = 0.2$, (верхній ряд) $g = 0$, (середній ряд) $g = 2\kappa$, та (нижній ряд) $g = 10\kappa$. Для скорочення запису використовуємо позначення $\varpi = (\omega - \omega_0)/\gamma_0$ $\varpi' = (\omega' - \omega_0)/\gamma_0$. На всіх графіках дані нормовані на максимальне значення двофотонного спектра вхідного хвильового пакету $|\Phi_{\omega_0, \omega_0}^{\text{in}}|^2 = 4/(\pi\gamma_0)^2$.

Ця система рівнянь розв'язана і аналітично і чисельно. Аналітичні розв'язки отримано використанням інтегрального перетворення Лапласа. Деталі розв'язку наведені в Додатку A. Для чисельного розв'язку системи рівнянь використовуємо функцію `NDSolve` пакету `MATHEMATICA`. Результати, отримані аналітичним та чисельним розв'язком рівнянь, дуже добре збігаються.⁴

Наведений вище підхід можна застосувати до випадку вхідного хвильового пакету в N -фотонному стані. У цьому випадку отримаємо систему

⁴Код, який демонструє реалізацію чисельного розв'язку системи рівнянь руху (3.25) та порівняння результатів з аналітичними розв'язками можна знайти у додаткових матеріалах до статті [15].

зв'язаних диференціальних рівнянь руху, в якій амплітуди ймовірностей станів з N збудженнями будуть залежати від амплітуд станів з $(N - 1)$ збудженнями і так далі до амплітуд з одним збудженням, які описуються рівняннями руху (3.13). Цю ієрархію рівнянь еволюції амплітуд ймовірностей можна розв'язати чисельно з довільною точністю використовуючи один з багатьох доступних солверів систем звичайних диференціальних рівнянь.

Перейдемо до дослідження еволюції двофотонного спектра в процес взаємодії хвильового пакету з системою резонатор-кубіт. Для обчислень однофотонний спектральний розподіл вхідного хвильового пакету ξ_ω моделюється лоренцівською функцією

$$\xi_\omega = \sqrt{\frac{\gamma_0}{2\pi}} \left[(\omega - \omega_0) + i \frac{\gamma_0}{2} \right]^{-1} e^{i(\omega - \omega_0)t_0}, \quad (3.26)$$

де параметр t_0 означає момент часу, в який хвильовий пакет досягає резонатора. Нижче, для зручності, але без втрати загальності, вважаємо $t_0 = 0$. Для ξ_ω модельованої лоренціаною (3.26) отримаємо

$$\Xi(t) = -\sqrt{\frac{2\pi}{\tau_p}} e^{-i\omega_0 t} \exp \left[-\frac{t}{2\tau_p} \right] \theta(t), \quad (3.27)$$

де $\theta(t)$ – функція Гевісайда.

Набір «знімків» двофотонного спектра для певних моментів часу та різних параметрів системи продемонстровано на Рис. 3.2.⁵ Обчислення показують, що двофотонний спектр хвильового пакету змінюється в процес взаємодії з системою резонатор-кубіт. Важливою деталлю є те, що при $g = 0$, що відповідає випадку, коли резонатор від'єднаний від кубіта, двофотонний спектр відновлює свою початкову форму для часів, які задовольняють

⁵ Анімацію еволюції двофотонного спектра можна знайти в додатковому матеріалі (*Supplemental Material*) до статті [15].

критерію (3.14). Це результат буде обґрунтований нижче. У випадку ввімкненої взаємодії ($g \neq 0$) резонатора з кубітом, двофотонний спектр хвильового пакету, що розсіявся [для часів, що задовольняють критерію (3.14)] відрізняється від двофотонного спектра вхідного хвильового пакету. Як буде продемонстровано нижче (в частині 3.8), на відміну від вхідних фотонів, які не є заплутаними⁶, у випадку $g \neq 0$ фотони, що розсіялись, утворюють пару частотно-заплутаних (*frequency-entangled*) фотонів, або *біфотон*.

3.5 Динаміка системи резонатор–кубіт

Для аналізу динаміки збудження системи резонатор-кубіт використаємо хвильову функцію системи (3.19). Середня кількість фотонів у резонаторі в довільний момент часу t визначається як

$$\begin{aligned} N_c(t) &= \langle \Psi_2(t) | a^\dagger a | \Psi_2(t) \rangle \\ &= \int d\omega |X_\omega^g(t)|^2 + |Z^e(t)|^2 + 2|Z^g(t)|^2. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Населеність збудженого стану кубіта визначається як

$$\begin{aligned} P_a(t) &= \langle \Psi_2(t) | \sigma_+ \sigma_- | \Psi_2(t) \rangle \\ &= \int d\omega |X_\omega^e(t)|^2 + |Z^e(t)|^2. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Окрім населеностей резонатора та кубіта, використовуючи хвильову функцію системи (3.19) можна обчислити ймовірність знайти систему резонатор-кубіт у стані з певною кількістю збуджень $p_{\text{JC}}^{(j)}(t)$ ($j \leq 2$). Ймовірності знайти одне та два збудження в системі резонатор-кубіт у довільний

⁶Це можна побачити з виразу (3.20).

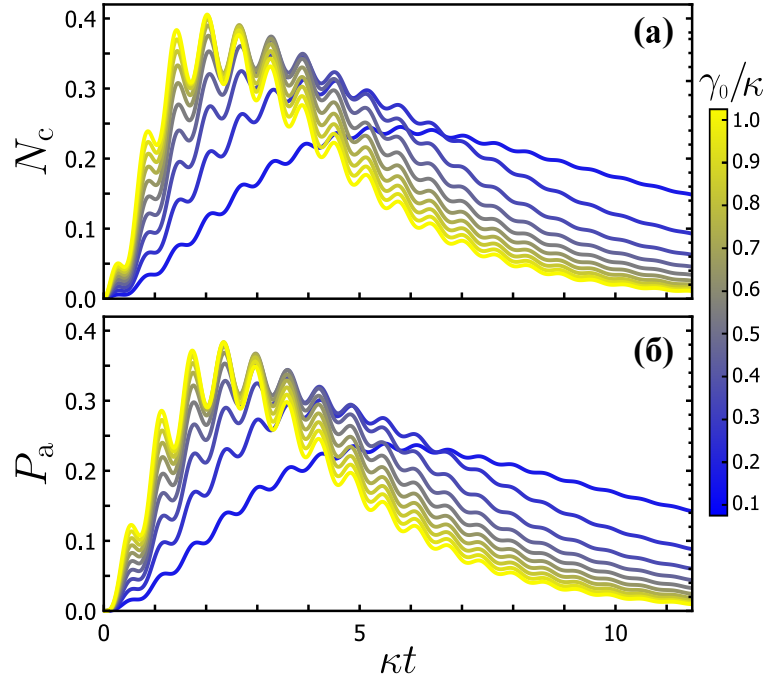


Рис. 3.3. Динаміка збудження (а) резонатора та (б) дворівневого кубіта для різних значень γ_0/κ , які на графіках кодуються градієнтом кольору. Для розрахунків використані такі параметри: $g = 5\kappa$, $\Delta_a = 0$, та $\omega_0 = E_1^+$.

момент часу t визначаються як

$$p_{\text{JC}}^{(1)}(t) = \int d\omega |X_\omega^g(t)|^2 + \int d\omega |X_\omega^e(t)|^2 \quad (3.30)$$

та

$$p_{\text{JC}}^{(2)}(t) = |Z^g(t)|^2 + |Z^e(t)|^2. \quad (3.31)$$

Розрахунки динаміки населеності резонатора та кубіта, показані на Рис. 3.3, демонструють, що коротші вхідні хвильові пакети (більше значення γ_0/κ) призводять до більш ефективного збудження як резонатора так і кубіта. Населеності резонатора та кубіта є осцилюючими завдяки обміну збудженнями між ними. Для часів довших за тривалість вхідного хвильового пакету $t > \tau_p$ населеності резонатора та кубіта спадають приблизно як $\propto e^{-\kappa t}$.

Часові залежності ймовірностей $p_{\text{JC}}^{(1)}$ та $p_{\text{JC}}^{(2)}$, показані на Рис. 3.4, свідчать про те, що ймовірність знаходження системи резонатор-кубіт у стані

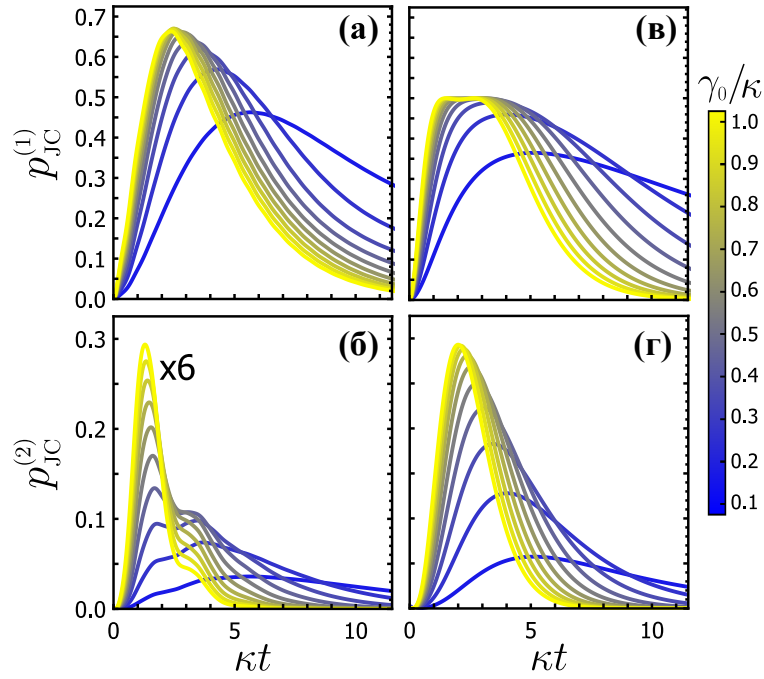


Рис. 3.4. На графіках (а) та (б) показано, як ймовірності знаходження, відповідно, одного та двох збуджень у системі резонатор-кубіт залежать від $\gamma_0\kappa$ при $g = 5\kappa$. На графіку (б) відповідні ймовірності домножені на 6 для кращої візуалізації. На графіках (в) та (г) показані аналогічні залежності, коли взаємодії резонатора з кубітом немає ($g = 0$). Решта параметрів системи такі ж, як на Рис. 3.3.

з двома збудженнями значно пригнічена порівняно з випадком системи з резонатором від'єднаним від кубіта ($g = 0$). Пояснимо цей ефект. Дворівневий атом (кубіт) є нелінійною системою, оскільки здатний поглинати/випромінювати тільки одне збудження в певний момент часу. Отже, під'єднання резонатора до кубіта призводить до того, що композитна система резонатор-кубіт стає нелінійною. Ця нелінійність породжує ефект *фотонної блокади* [122, 123], коли наявність збудження в системі пригнічує поглинання нею ще одного збудження.

Оскільки через фотонну блокаду ймовірність знайти систему резонатор-кубіт у стані з двома збудженнями є малою, то частота осциляцій населеностей резонатора та кубіта приблизно збігається з частотою вакуумних

осциляцій Рабі Ω_R , яка визначається як

$$\Omega_R \equiv \frac{2\pi}{\tau_R} = \sqrt{g^2 + \left(\frac{\Delta_a}{2}\right)^2}, \quad (3.32)$$

де τ_R – період осциляцій Рабі. Незначне відхилення від вакуумної частоти Рабі Ω_R виникає через вплив другого фотона та зв'язок резонатора з хвилеводом.

Можна помітити схожість кривих (для однакових значень γ_0/κ), які відповідають $N_c(t)$ та $P_a(t)$ на Рис. 3.3. Ця особливість має таке пояснення. Завдяки ефекту фотонної блокади, перший доданок в рівнянні (3.28), який відповідає ймовірності знаходження одного фотона в хвилеводі та кубіта у основному стані $p_g^{(1)}(t) = \int d\omega |X_\omega^g(t)|^2$, дає домінуючий внесок у динаміку збудження резонатора. Аналогічно, населеність кубіта в основному визначається першим доданком в рівнянні (3.29). Цей доданок відповідає ймовірності знаходження кубіта у збудженому стані та одного фотона у хвилеводі $p_e^{(1)}(t) = \int d\omega |X_\omega^e(t)|^2$. При $g > \kappa$ процес обміну збудженням між кубітом та резонатором переважає над витіканням фотона з резонатора назад у хвилевід. Це призводить до того, що огинаючі функцій $p_g^{(1)}(t)$ та $p_e^{(1)}(t)$ стають подібними, тоді як їхні осцилюючі частини зсунуті в часі одна відносно одної приблизно на півперіода осциляцій Рабі $\approx \tau_R/2$. Ці міркування підтверджуються обчисленнями, результати яких представлені на Рис. 3.5. Цей рисунок демонструє вплив сили зв'язку резонатора з кубітом g та спектральної ширини вхідного хвильового пакету γ_0 на часову еволюцію ймовірностей $p_{g,e}^{(1)}(t)$.

3.6 Розсіяний двофотонний стан

Окрім точної перехідної динаміки квантового стану системи, інтерес також представляють асимптотичні (довгочасові) розв'язки. Для часів, які

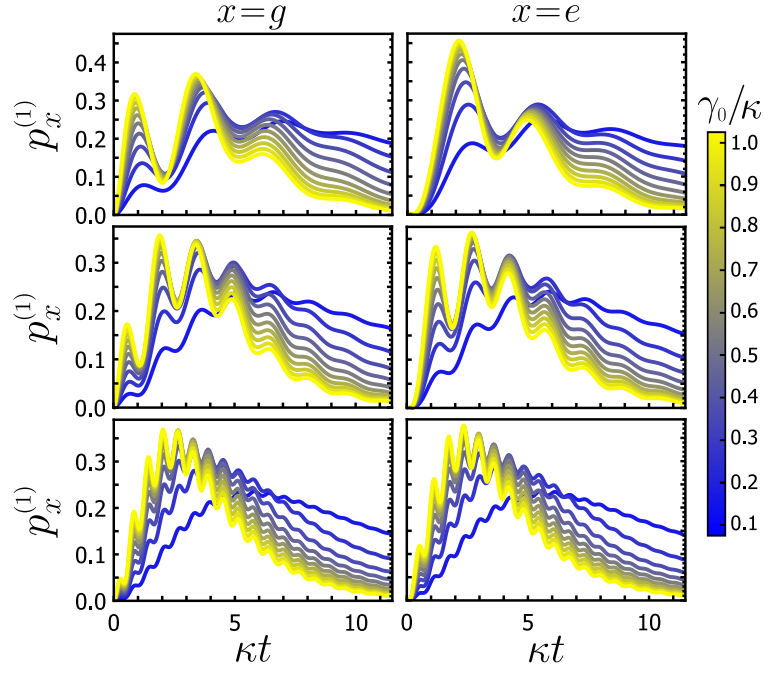


Рис. 3.5. Залежність ймовірностей $p_g^{(1)}(t)$ (лівий стовпчик) та $p_e^{(1)}(t)$ (правий стовпчик) від γ_0/κ для різних g : $g = \kappa$ (верхній ряд), $g = 2\kappa$ (середній ряд), та $g = 5\kappa$ (нижній ряд). Решта параметрів такі ж, як на Рис. 3.3 та 3.4.

задовольняють умові (3.14), отримуємо, що відмінним від нуля у хвильовій функції системи (3.19) залишається тільки доданок, який відповідає вільному поширенню двофотонного стану у хвилеводі. Решта доданків зникають, що відповідає тому, що система резонатор-кубіт повернулася у свій основний стан $|\emptyset_{\text{JC}}\rangle \equiv |\emptyset_c\rangle|g\rangle$. Кінцевий стан системи у такому випадку запишеться як

$$|\Psi_2^{\text{out}}\rangle = |\psi_2^{\text{out}}\rangle|\emptyset_{\text{JC}}\rangle, \quad (3.33)$$

де $|\psi_2^{\text{out}}\rangle$ – стан розсіяних фотонів. Цей стан записується як

$$|\psi_2^{\text{out}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \iint d\omega d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} \Phi_{\omega,\omega'}^{\text{out}} b_{\omega}^{\dagger} b_{\omega'}^{\dagger} |\emptyset_w\rangle, \quad (3.34)$$

де $\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{out}}$ – двофотонний спектральний розподіл розсіяного хвильового пакету. Функція $\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{out}}$ має такий вигляд (дивіться вивід у Додатку А):

$$\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{out}} = \overbrace{e^{i(\Theta_\omega + \Theta_{\omega'})} \xi_\omega \xi_{\omega'}}^{\phi_{\omega,\omega'}^{\text{el}}} + F_{\omega,\omega'} \overbrace{\prod_{\mu=\pm} \xi_{\omega+\omega'-\mathcal{E}_1^\mu}}^{\phi_{\omega,\omega'}^{\text{inel}}}, \quad (3.35)$$

де $F_{\omega,\omega'}$ записується як

$$F_{\omega,\omega'} = 16\pi^2 f^4 g^4 \left[\frac{1}{2} + \frac{\omega + \omega' - \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_1^-}{\omega + \omega' + i\gamma_0} \right] \times \prod_{\mu=\pm} \frac{1}{(\omega - \mathcal{E}_1^\mu)(\omega' - \mathcal{E}_1^\mu)(\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^\mu)}. \quad (3.36)$$

Вираз (3.35) можна отримати використовуючи двофотонну S матрицю системи резонатор-кубіт отриману, наприклад, у роботах [109, 111, 129].

Доданок $\phi_{\omega,\omega'}^{\text{el}}$ у виразі (3.35) описує нескорельоване пружне розсіяння двох фотонів у результаті чого енергія кожного з них не змінюється. Доданок $\phi_{\omega,\omega'}^{\text{inel}}$ описує непружне розсіяння в результаті якого енергія кожного з фотонів змінюється. Сумарна енергія фотонів, звичайно, лишається сталою. Комплексні двофотонні резонансні частоти відкритої системи резонатор-кубіт $\mathcal{E}_2^\pm = E_2^\pm - i\Gamma_2^\pm/2$ визначаються як

$$\mathcal{E}_2^\pm = 2\tilde{\omega}_c + \frac{\tilde{\Delta}_a}{2} \pm \frac{\mathcal{R}_2}{2}, \quad \mathcal{R}_2 = \sqrt{8g^2 + \tilde{\Delta}_a^2}. \quad (3.37)$$

Резонатор від'єднаний від кубіта

Розглянемо граничний випадок системи резонатор-кубіт, коли взаємодії кубіта з резонатором немає ($g = 0$), тобто резонатор або від'єднаний від кубіта⁷, або ж останнього просто немає. У випадку $g = 0$, доданок $\phi_{\omega,\omega'}^{\text{inel}}$, який

⁷Наприклад, у надпровідних квантових колах є змога контролювати зв'язок резонатора зі штучним атомом []

описує процес непружного розсіяння, зникає в рівнянні (3.35), і двофотонна спектральна функція хвильового пакету, що розсіявся, спрощується до такого виразу

$$\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{out}} \xrightarrow{g=0} \mathring{\Phi}_{\omega,\omega'}^{\text{out}} = \mathring{\xi}_{\omega} \mathring{\xi}_{\omega'}, \quad (3.38)$$

де $\mathring{\xi}_{\omega} = \exp(i\mathring{\Theta}_{\omega}) \xi_{\omega}$ – однофотонна спектральна функція. Однофотонний фазовий зсув $\mathring{\Theta}_{\omega}$ визначається як

$$\mathring{\Theta}_{\omega} = \arg \left[\frac{\omega - \tilde{\omega}_c^*}{\omega - \tilde{\omega}_c} \right]. \quad (3.39)$$

Із виразу (3.38) випливає, що при розсіянні фотони набувають тільки додаткову фазу. Використовуючи (3.34) отримаємо, що

$$|\psi_2^{\text{out}}\rangle = |\psi_1^{\text{out}}\rangle |\psi_1^{\text{out}}\rangle, \quad |\psi_1^{\text{out}}\rangle = \int d\omega \mathring{\xi}_{\omega} b_{\omega}^{\dagger} |\emptyset_{\text{w}}\rangle. \quad (3.40)$$

Вираз (3.40) показує, що при $g = 0$ стан фотонів, що розсіявся, залишається сепарабельним.

Рівняння (3.38) означає, що двофотонний спектр вихідного хвильового пакету ідентичний спектру вхідного пакету:

$$|\mathring{\Phi}_{\omega,\omega'}^{\text{out}}|^2 = |\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{in}}|^2, \quad (3.41)$$

що підтверджує результати, які відповідають випадку $g = 0$, наведені на Рис. 3.2.

3.7 Спектр розсіяних фотонів

Розподіл спектральної густини (спектр) фотонів, що розсіялись, визначається як [20, 21]

$$S_{\omega}^{\text{out}} = \langle \Psi_2^{\text{out}} | b_{\omega}^{\dagger} b_{\omega} | \Psi_2^{\text{out}} \rangle. \quad (3.42)$$

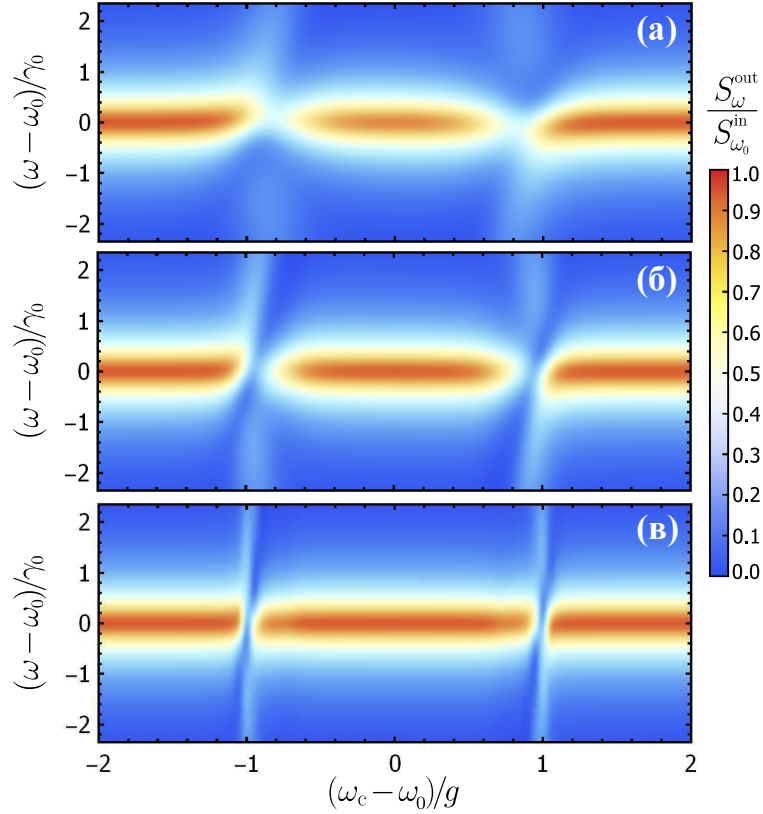


Рис. 3.6. Залежність спектру вихідного хвильового пакету від центральної частоти вхідного хвильового пакету ω_0 для системи резонатор-кубіт у резонансному режимі ($\Delta_a = 0$). Параметри системи, використані для обчислень: $\gamma_0 = 0.2\kappa$, (а) $g = \kappa$, (б) $g = 2\kappa$, та (в) $g = 10\kappa$.

Середня кількість фотонів у частотному діапазоні $[\Omega, \Omega + \delta]$ обчислюється як $\int_{\Omega}^{\Omega+\delta} d\omega S_{\omega}^{\text{out}}$. Інтегрування S_{ω}^{out} по всім частотам дає середню кількість фотонів. Оскільки кількість фотонів у системі зберігається, то маємо

$$\int d\omega S_{\omega}^{\text{out}} = \int d\omega S_{\omega}^{\text{in}} = 2, \quad (3.43)$$

де S_{ω}^{in} – спектр вхідного хвильового пакету:

$$S_{\omega}^{\text{in}} = \langle \Psi_2^{\text{in}} | b_{\omega}^{\dagger} b_{\omega} | \Psi_2^{\text{in}} \rangle = 2|\xi_{\omega}|^2 \quad (3.44)$$

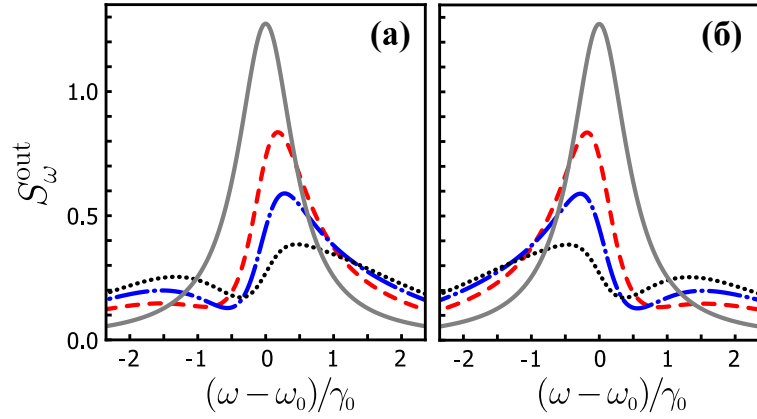


Рис. 3.7. Спектри випромінювання, що розсіялось, для (а) $\omega_0 = E_1^+$ та (б) $\omega_0 = E_1^-$, та різних значень g : (червона штрихова лінія) $g = \kappa$, (синя штрих-пунктирна лінія) $g = 2\kappa$, та (чорна пунктирна лінія) $g = 10\kappa$. Решта параметрів такі: $\gamma_0 = 5\kappa$ $\Delta_a = 0$. Сіра суцільна лінія відповідає розподілу спектральної густини вхідного хвильового пакету $S_\omega^{\text{in}} = 2|\xi_\omega|^2$.

Використовуючи вихідний стан системи (3.34), отримаємо такий вираз для S_ω^{out} :

$$S_\omega^{\text{out}} = 2 \int d\omega' |\Phi_{\omega, \omega'}^{\text{out}}|^2. \quad (3.45)$$

Як впливає з рівнянь (3.45) та (3.41) у системі, в якій кубіт від'єднаний від резонатора ($g = 0$), маємо $S_\omega^{\text{out}} = S_\omega^{\text{in}}$, а отже, спектр хвильового пакету, що розсіявся, ідентичний спектру вхідного хвильового пакету.

Рисунок 3.6 демонструє залежність розподілу спектральної густини фотонів, що розсіялись, від значення центральної частоти вхідного хвильового пакету ω_0 . Обчислення показують, що найбільш виражена модифікація спектру вихідного хвильового пакету відбувається коли ω_0 близька до однофотонних резонансних частот системи резонатор-кубіт $\omega_0 \approx E_1^\pm$. Вплив величини параметру взаємодії кубітом з резонатором g на спектр розсіяних фотонів у випадку $\omega_0 = E_1^\pm$ показано на Рис. 3.7. Можна помітити, що збільшення зв'язку між резонатором та кубітом призводить до більш вираженої модифікації спектру вихідного випромінювання порівняно зі спектром вхідного.

Якщо підставити (3.35) в (3.45), спектр фотонів, що розсіялись S_ω^{out} ,

можна представити як $S_{\omega}^{\text{out}} = S_{\omega}^{\text{in}} + S_{\omega}^{\text{inel}} + S_{\omega}^{\text{el-in}}$. У цьому виразі S_{ω}^{inel} відповідає внеску, який виникає від непружного розсіяння фотонів. Цей доданок визначається як

$$S_{\omega}^{\text{inel}} = 2 \int d\omega' |\phi_{\omega,\omega'}^{\text{inel}}|^2. \quad (3.46)$$

Доданок

$$S_{\omega}^{\text{el-in}} = 4 \int d\omega' \text{Re} \{ (\phi_{\omega,\omega'}^{\text{el}})^* \phi_{\omega,\omega'}^{\text{inel}} \} \quad (3.47)$$

виникає через інтерференцію компонент вихідного хвильового пакету, які виникли внаслідок процесів пружного та непружного розсіяння на системі резонатор-кубіт. Обчислення показують, що $S_{\omega}^{\text{el-in}}$ має від'ємні значення. Це призводить до виникнення «провалу» у формі спектрів випромінювання, що розсіялось, який можна побачити на Рис. 3.7.

3.8 Утворення заплутаних станів фотонів

Як показано в частині 3.6, при взаємодії двофотонного хвильового пакету з резонатором від'єднаним від кубіта ($g = 0$) фотони, що розсіялись, набувають додаткову фазу, однак їхній спектр лишається без змін. Стан фотонів, що розсіялись, залишається сепарабельним як і стан вхідних фотонів. Ситуація істотно змінюється, коли вмикається взаємодія між резонатором та кубітом ($g \neq 0$). Нелінійність системи резонатор-кубіт породжує ефективну фотон-фотонну взаємодію, що призводить до фотонної блокади. Цей ефект обговорювався у частині 3.5. Згідно роботи [133], фотон-фотонна взаємодія призводить до частотного заплутування (*frequency entanglement*). В системі, що розглядається, заплутування виникає внаслідок присутності «непружного» доданку $\phi_{\omega,\omega'}^{\text{inel}}$ у спектральному розподілі хвильового пакету, що розсіявся.

Частотне заплутування фотонів можна кількісно визначити використовуючи розклад Шмідта (*Schmidt decomposition*) для двофотонного спе-

ктрального розподілу розсіяного хвильового пакету [134]:

$$\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{out}} = \sum_{j \geq 1} \sqrt{\lambda_j} \varphi_{j,\omega} \tilde{\varphi}_{j,\omega'}. \quad (3.48)$$

Цей розклад представляє спектральний розподіл вихідного двофотонного хвильового пакету як зважену суму добутків однофотонних спектральних розподілів. Коефіцієнти розкладу задовольняють співвідношенню $\sum_j \lambda_j = 1$. Однофотонні спектральні розподіли мод розкладу Шмідта $\varphi_{j,\omega}$ та $\tilde{\varphi}_{j,\omega}$ утворюють повний набір ортонормованих функцій:

$$\int d\omega \varphi_{i,\omega}^* \tilde{\varphi}_{j,\omega} = \delta_{i,j}, \quad \sum_i \varphi_{i,\omega'}^* \tilde{\varphi}_{i,\omega} = \delta(\omega' - \omega). \quad (3.49)$$

Коефіцієнти розкладу та спектральні розподіли визначаються розв'язком задачі на власні значення/функції [135, 136]:

$$\int d\nu K_{\nu,\omega} \varphi_{j,\nu} = \lambda_j \varphi_{j,\omega}, \quad \int d\nu \tilde{K}_{\nu,\omega} \tilde{\varphi}_{j,\nu} = \lambda_j \tilde{\varphi}_{j,\omega}, \quad (3.50)$$

де інтегральні ядра $K_{\nu,\omega}$ та $\tilde{K}_{\nu,\omega}$ записуються як

$$K_{\nu,\omega} = \int d\nu' (\Phi_{\nu,\nu'}^{\text{out}})^* \Phi_{\omega,\nu'}, \quad \tilde{K}_{\nu,\omega} = \int d\nu' (\Phi_{\nu',\nu}^{\text{out}})^* \Phi_{\nu',\omega}. \quad (3.51)$$

Оскільки спектральні розподіли симетричні відносно перестановки аргументів (фотонних частот) $\Phi_{\nu,\nu'}^{\text{out}} \equiv \Phi_{\nu',\nu}^{\text{out}}$, то це дає співвідношення $K_{\nu,\omega} = \tilde{K}_{\nu,\omega}$, що, в свою чергу, дає $\varphi_{j,\omega} = \tilde{\varphi}_{j,\omega}$. Задачу на власні значення (3.50) розв'язується числовими методами. Для цього обчислюємо значення функції $K_{\nu,\omega}$ на рівномірній сітці 100×100 значень частот у діапазоні $\pm 25\gamma_0$ навколо центральної частоти вхідного хвильового пакету ω_0 .

Використовуючи розклад (3.48) та вираз (3.34) можна представити вихідний стан фотонів $|\psi_2^{\text{out}}\rangle$ як суперпозицію двофотонних сепарабельних

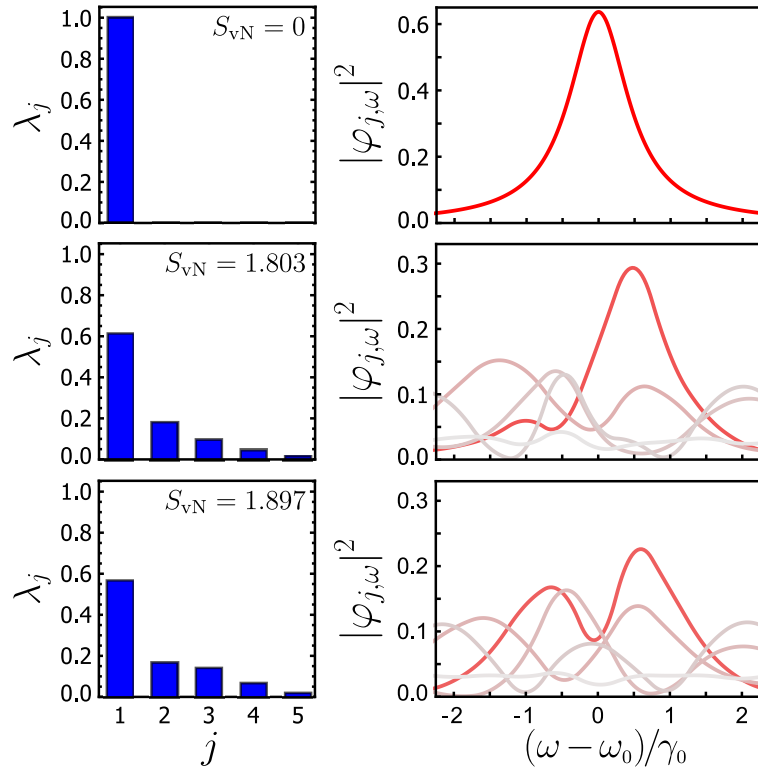


Рис. 3.8. Перші п'ять коефіцієнтів розкладу Шмідта та спектр мод розкладу $|\varphi_{j,\omega}|^2$ (насиченість лінії відповідає значенню коефіцієнта розкладу λ_j) для випадку $g = 0$ (верхній ряд), $g = 2\kappa$ (середній ряд), та $g = 10\kappa$ (нижній ряд). Решта параметрів збігаються з тими, що використовувались для обчислень на Рис. 3.2.

станів:

$$|\psi_2^{\text{out}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j \geq 1} \sqrt{\lambda_j} |\varphi_j\rangle |\varphi_j\rangle, \quad (3.52)$$

де $|\varphi_j\rangle = \int d\omega \varphi_{j,\omega} a_\omega^\dagger |\emptyset_w\rangle$.

Якщо усі коефіцієнти розкладу Шмідта нулі, окрім першого, це означає, що двофотонний спектральний розподіл факторизується і фотони не заплутані. У іншому разі, маємо справу з заплутаним станом фотонів. Як міру заплутаності використовуємо *ентропію заплутаності* (фон Неймана) S_{vN} . Для заплутаних станів $S_{\text{vN}} > 0$, тоді як нульова ентропія заплутаності $S_{\text{vN}} = 0$ вказує на те, що такий стан є сепарабельним. Ентропію заплута-

ності можна виразити через коефіцієнти розкладу Шмідта як [137]:

$$S_{\text{vN}} = - \sum_{j \geq 1} \lambda_j \log_2 \lambda_j. \quad (3.53)$$

З рівняння (3.38) випливає, що в системі без взаємодії між резонатором та кубітом ($g = 0$) спектральний розподіл фотонів, що розсіялись, факторизується та тільки перший коефіцієнт розкладу Шмідта ненульовий $\lambda_1 = 1$. Це означає, що вихідний стан фотонів не є частотно-заплутаним. З іншого боку, при увімкненій взаємодії резонатора з кубітом ($g > 0$) вихідні фотони є *частотно-заплутаними* (*frequency-entangled*) оскільки $\lambda_{j \geq 2} > 0$ та $S_{\text{vN}} > 0$ як продемонстровано на Рис. 3.8.

3.9 Висновки

В цьому розділі досліджено розсіяння хвильових пакетів у одно- та двофотонному фоківському стані на системі резонатор-кубіт. Для цього використано підхід хвильової функції. Отримано систему зв'язаних диференціальних рівнянь руху, що описують еволюцію амплітуд ймовірностей, які визначають стан системи у довільний момент часу. Підхід, використаний для виведення рівнянь руху амплітуд ймовірностей можна без модифікацій використати для опису взаємодії системи резонатор-кубіт з вхідними випромінювання у багатофонному ($N_{\text{ph}} \geq 3$) фоківському стані. Використовуючи точні розв'язки рівнянь руху досліджено еволюцію двофотонного спектру хвильового пакету в процесі його взаємодії з системою резонатор-кубіт. Окрім цього, досліджено часову динаміку населеності та ймовірностей знаходження певної кількості збуджень у системі резонатор-кубіт у довільний момент часу. Виявлено, що ймовірність знаходження двох збуджень у системі резонатор-кубіт при увімкненій взаємодії ($g \neq 0$) є набагато меншою порівняно з випадком резонатора від'єданого від кубіта

($g = 0$). Це є ознакою фотонної блокади, яка виникає через те, що система резонатор-кубіт є нелінійною на відміну від резонатора, який не містить кубіт, або з ним не взаємодіє.

У граничному випадку довгих часів, коли система досягає стаціонарного стану, отримано точні вирази для двофотонного спектрального розподілу розсіяного хвильового пакету. Цей результат узгоджується з результатом, отриманим з використанням матриці розсіювання (S матриці) системи резонатор-кубіт виведеної в роботах інших авторів [109, 111, 129]. Також проаналізовано розподіл спектральної густини (спектр) розсіяних фотонів. Отримані результати показують, що спектр вихідного випромінювання відрізняється від спектру вхідного випромінювання, коли центральна частота вхідного хвильового пакету близька до однієї з резонансних частот системи резонатор-кубіт.

Як вимір запутаності розсіяних фотонів використано розклад Шмідта та ентропію запутаності. Встановлено, що ці фотони утворюють пару частотно-заплутаних (*frequency-entangled*) фотонів або біфотон. Отже, система резонатор-хвилевід під'єднана до одновимірного хвилеводу може використовуватись як джерело біфотонів. Таке джерело можна створити у сучасних мікрохвильових надпровідних квантових електричних колах.

РОЗДІЛ 4

ОДНОФОТОННЕ ДИСПЕРСНЕ ЗЧИТУВАННЯ КУБІТА

4.1 Вступ

У цьому розділі розглядатиметься дисперсне зчитування (*dispersive readout*) стану кубіта в граничному випадку, коли вимірюючим сигналом є хвильовий пакетом у однофотонному стані. Дисперсне вимірювання [140, 142, 143] є одним з найбільш поширених методів вимірювання стану надпровідного кубіта [56]. При дисперсному вимірюванні кубіт нерезонансно взаємодіє з резонатором. Водночас (ефективна) частота резонатора зсувається та стає залежною від стану кубіта. Знак зсуву частоти резонатора визначається станом кубіта. Для визначення цього зсуву частоти зазвичай використовують гомодинне детектування. Резонатор вимірюють на одній зі зсунутих частот когерентним сигналом. Вихідний сигнал набуває фазового зсуву залежно від стану кубіта. Цей фазовий зсув міряють за допомогою гомодинного детектування після проходження декількох каскадів підсилювачів. Для досягнення квантової границі підсилення (*quantum-limited amplification*), використовують параметричні підсилювачі [144, 145], що потребує додаткових сигналів накачки. Це призводить до того, що система стає громіздкою.

Альтернативний підхід полягає у використанні фотодетектора [146, 147], який може інтегруватись на один чіп з кубітом. Розглянемо, яким чином можна визначити стан кубіта в схемі з фотодетектором. Нехай частота вимірюючого сигналу збігається з однією з ефективних (залежних від стану кубіта) частот резонатора. За такої умови, залежно від стану кубіта, цей сигнал буде або майже повністю проходити систему резонатор-кубіт,

або ж переважно відбиватись від неї. Отже, фотодетектор, під'єднаний до вихідного порта резонатора, буде спрацьовувати лише для певного стану кубіта. Сигнал від фотодетектора («клік») може в подальшому опрацьовуватись каскадом електроніки при кімнатній температурі [146]. На відміну від схеми з гомодинним детектування, в такій схемі нема потреби використовувати декілька каскадів підсилювачів та додаткові сигнали накачки, що істотно ускладнює систему. В останні роки продемонстровано декілька перспективних схем детекторів мікрохвильових фотонів [148, 149, 150].

У більшості реалізацій схем зчитування надпровідного кубіта використовується вимірюючий сигнал у когерентному стані. Стани вихідного випромінювання, що відрізняються для різних станів кубіта, можна також наближено вважати когерентними. Оскільки когерентні стани не є ортогональними, принципово неможливо повністю їх розрізнити – завжди існує ймовірність помилки, що впливає на результат вимірювання стану кубіта. Для подолання цього обмеження, в статтях [151, 152] пропонується стискати вихідний сигнал перед тим, як подавати його на гомодин. Однак, така схема потребує додаткових циркуляторів та сигналів накачки, що робить систему ще складнішою.

Для уникнення помилок, пов'язаних з неортогональністю станів вимірюючого сигналу, можна використати, наприклад, однофотонні стани в схемі з фотодетектором. Хвильовий пакет у однофотонному стані можна згенерувати шляхом розпаду збудженого кубіта в хвилевід [55]. Для детектування сигналу, який пройшов резонатор з кубітом, можна використати *on-off* фотодетектор, наприклад, джозефсонівський фотопомножувач [153, 150]. Цей тип фотодетектора здатний розрізняти тільки вакуумний стан, що є достатнім для вимірювання в схемі, що розглядається в цьому розділі.

Для опису динаміки системи та транспорту фотонів ми використовуємо рівняння Гайзенберга та підхід хвильової функції аналогічний тому, що ви-

користовувався у Розділі 3. Однак на відміну від Розділу 3, в якому нехтувались швидкоосцилюючі доданками в гамільтоніані взаємодії резонатора з кубітом, в цьому розділі внесок цих доданків враховується. Швидкоосцилюючі доданки в гамільтоніані взаємодії вважаються збуренням гамільтоніану, що призводить до появи зсуву Блоха-Зіґерта (*Bloch-Siegert shift*) в частоті резонатора. Цей зсув можна використати для збільшення контрасту зчитування.

4.2 Дисперсне зчитування: фізичний принцип

Перш ніж перейти до розгляду схеми вимірювання з фотодетектором та одиночним фотоном, пояснимо більше детально ідею дисперсного зчитування. Для цього, знову запишемо гамільтоніан Джейнса-Каммінґса $\hat{\mathcal{H}}_{\text{JC}}$, який описує дворівневий атом (кубіт), що взаємодіє з модою резонатора [139] (див. також Розділ 3.2):

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{JC}} = \hbar\omega_{\text{r}}a^\dagger a + \hbar\omega_{\text{q}}\frac{\sigma_z}{2} + \hbar g (a^\dagger\sigma_- + \sigma_+a), \quad (4.1)$$

де g – параметр зв'язку резонатора з кубітом. Оператор a ($a^\dagger$) знищує (породжує) фотон в резонаторі з частотою ω_{r} . Оператор σ_- (σ_+) – понижаючий (підвищуючий) оператор стану дворівневого атома (кубіта) з частотою переходу між рівнями ω_{q} . Для спрощення запису, в гамільтоніані (4.1) опускаємо внесок вакуумних коливань.

Розглянемо режим взаємодії кубіта з резонатором, при якому виконується критерій

$$\lambda \ll 1, \quad \lambda = \frac{g}{\omega_{\text{a}} - \omega_{\text{r}}}. \quad (4.2)$$

Такий режим називається *дисперсним зв'язком* (*dispersive coupling*) [140]. У цьому випадку гамільтоніан Джейнса-Каммінґса (4.1) наближено діагоналізується унітарним перетворенням Шріффера-Вольфа (*Schrieffer-Wolff*

transformation) [140]:

$$\hat{U}_D = e^{\lambda(a^\dagger \sigma_- - \sigma_+ a)}. \quad (4.3)$$

Застосувавши перетворення $\hat{U}_D$ до $\hat{\mathcal{H}}_{JC}$ та знехтувавши доданками другого та більш високих порядків по параметру λ , отримаємо

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{JC}^D &= \hat{U}_D^\dagger \hat{\mathcal{H}}_{JC} \hat{U}_D \\ &\approx \hbar(\omega_r + \chi\sigma_z) a^\dagger a + \hbar(\omega_q + \chi)\frac{\sigma_z}{2}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

З гамільтоніану (4.4) видно, що в новому базисі частота кубіта зсувається на величину $\chi = g\lambda$. Цей зсув (перенормування) частоти можна ототожнити з лембівським зсувом [140]. Важливою особливістю перетвореного гамільтоніану є те, що «вдягнена» («*dressed*») частота резонатора також зсувається, а величина зсуву $\chi\sigma_z$ залежить від стану кубіта. Цю властивість можна використати для вимірювання стану кубіта [140, 141, 142]. До того ж в перетвореному гамільтоніані (4.4) немає доданку, який описує обмін збудженнями між резонатором та кубітом, а отже, $\dot{\sigma}_z = O(\lambda^2)$, що свідчить про (майже) неруйнівний характер такого типу вимірювання.

4.3 Схема однофотонного зчитування з фотодетектором

Система зчитування схематично показана на Рис. 4.1. Однофотонний хвильовий пакет (імпульс) $|1_\xi\rangle$ надходить по хвилеводу 1 до резонатора з частотою ω_r та однаковою швидкістю витікання фотона до хвилеводів $\kappa/2$. Резонатор дисперсно взаємодіє з кубітом з частотою переходу ω_q між основним $|\downarrow\rangle$ та збудженим $|\uparrow\rangle$ станами. Для приготування кубіта у збудженому стані $|\uparrow\rangle$ використовується π -імпульс. До хвилеводу 2 під'єднаний *on-off* фотодетектор з квантовою ефективністю η . Однофотонний вхідний хвильовий пакет генерується в результаті спонтанного розпаду дворівневої системи з частотою переходу ω_p збудженої π -імпульсом.

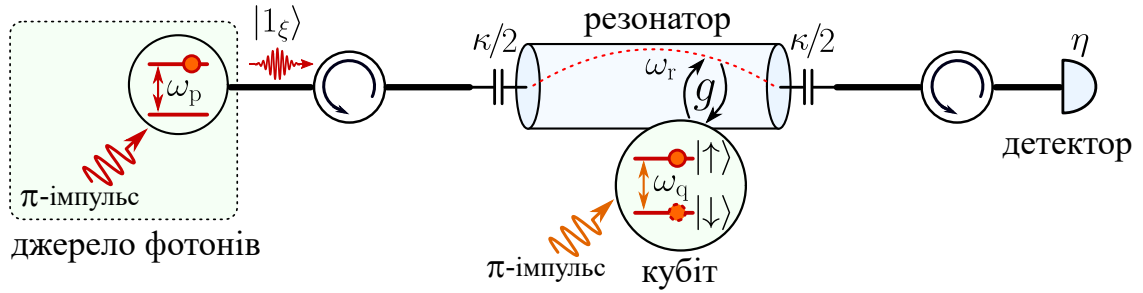


Рис. 4.1. Схема вимірювання, що розглядається.

Частота резонатора ω_r зсувається на величину χ у випадку кубіта у збудженому стані $|\uparrow\rangle$, та на величину $-\chi$ у разі, якщо кубіт знаходиться в основному стані $|\downarrow\rangle$. Вимірюючий хвильовий пакет (імпульс) подається на одній з цих (зсунутих) частот. Вважатимемо, що центральна частота вимірюючого імпульсу $\omega_p = \omega_r + \chi$. Якщо кубіт у збудженому стані, то з великою ймовірністю вхідний фотон пройде резонатор та буде задетектований. спрацювання («клік») фотодетектора означає, що кубіт перебуває у збудженому стані $|\uparrow\rangle$. Якщо ж детектор не спрацює впродовж періоду вимірювання від $t = 0$ до t_m , то робимо висновок, що кубіт знаходиться в основному стані $|\downarrow\rangle$. Час t_m називаємо часом вимірювання. Надалі вважаємо, що в момент $t = 0$ вхідний однофотонний імпульс не впливає ні на резонатор з кубітом, ні на фотодетектор. Імпульс досягає резонатора в момент часу $t = t_0$.

4.4 Гамільтоніан системи та рівняння Гайзенберга

Модельний гамільтоніан, який описує систему, що розглядається, має такий вигляд

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_q + \hat{\mathcal{H}}_r + \hat{\mathcal{H}}_{qr} + \sum_{j=1}^2 \hat{\mathcal{H}}_{rj} + \sum_{j=1}^2 \hat{\mathcal{H}}_j, \quad (4.5)$$

де перші три доданки описують, відповідно, кубіт, резонатор, та їхню взаємодію. Гамільтоніан кубіта $\hat{\mathcal{H}}_q$ записується як

$$\hat{\mathcal{H}}_q = \hbar\omega_q \frac{\sigma_z}{2}. \quad (4.6)$$

Гамільтоніан резонатора $\hat{\mathcal{H}}_r$ має такий вигляд

$$\hat{\mathcal{H}}_r = \hbar\omega_r a^\dagger a, \quad (4.7)$$

де a ($a^\dagger$) є оператором знищення (народження) збудження (фотона) в резонаторі. Взаємодія кубіта та резонатором описується гамільтоніаном

$$\hat{\mathcal{H}}_{qr} = \hbar g \sigma_x (a + a^\dagger), \quad (4.8)$$

де g – параметр зв'язку кубіта та резонатора. Разом гамільтоніани (4.6), (4.7), та (4.8) описують квантову модель Рабі [155]

$$\hat{\mathcal{H}}_R \equiv \hat{\mathcal{H}}_q + \hat{\mathcal{H}}_r + \hat{\mathcal{H}}_{qr}. \quad (4.9)$$

Гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}_j$, який описує поле у j -му хвилеводі, має такий вигляд

$$\hat{\mathcal{H}}_j = \hbar \int_0^\infty dk \omega_k b_{jk}^\dagger b_{jk}, \quad j \in \{1, 2\}, \quad (4.10)$$

де b_{jk} ($b_{jk}^\dagger$) – оператор знищення (народження) фотона з хвильовим вектором k та частотою ω_k у j -му хвилеводі. Ці оператори задовольняють комутаційним співвідношенням $[b_{jk}, b_{j'k'}] = 0$ та $[b_{jk}, b_{j'k'}^\dagger] = \delta(k - k')\delta_{jj'}$. Вважаємо, що обидва хвилеводи описуються однаковим лінійним дисперсійним співвідношенням

$$\omega_k = v_g k \quad (4.11)$$

де v_g – швидкість поширення фотонів у хвилеводі.

Гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}_{rj}$, який описує взаємодію резонатора та хвилеводами, має вигляд

$$\hat{\mathcal{H}}_{rj} = i\hbar \int_0^\infty dk f_{jk} (a - a^\dagger)(b_{jk} + b_{jk}^\dagger). \quad (4.12)$$

У подальшому розгляді вважаємо, що резонатор однаково з'єднується з обома хвилеводами ($f_{1k} = f_{2k}$) $\equiv f_k$.

Зауважимо, що вибір знаків у гамільтоніанах зв'язків резонатора з кубітом (4.8) та резонатора з хвилеводами (4.12) відповідає випадку різних типів зв'язків: наприклад, ємнісний тип зв'язку хвилеводів з резонатором та індуктивний зв'язок резонатора з кубітом, або ж навпаки. Якщо швидкоосцилюючими доданками нехтують, тобто роблять наближення обертової хвилі, то гамільтоніани, які описують системи з однаковими та різними типами зв'язків, є еквівалентними. У загальному ж випадку, коли швидкоосцилюючі доданки враховуються, ці гамільтоніани будуть відрізнятись, як показано в роботі [156]. Однак, основні міркування та загальні результати, наведені в цьому розділі, не змінюються від вибору тієї чи іншої комбінації типів зв'язків.

4.4.1 Перетворення модельного гамільтоніану

Ми розглядаємо випадок, коли частота кубіта сильно відстроєна від частоти резонатора. Якщо $\omega_q - \omega_r \sim \omega_q + \omega_r$, то наближення обертової хвилі вже не працює¹. Разом з тим, вважаємо, що частоти резонатора та кубіта величини одного порядку $\omega_q \sim \omega_r$, а також є малий параметр $\Lambda^2 \ll 1$, де Λ визначається як

$$\Lambda \equiv \frac{g}{\omega_q + \omega_r}. \quad (4.13)$$

¹Застосовність наближення обертової хвилі визначається критеріями (3.2) виписаними в Розділі 3.

Також вважаємо, що в резонаторі може знаходитись не більше двох фотонів: один фотон може надійти від вхідного однофотонного імпульсу, ще один фотон в резонаторі може виникнути внаслідок обміну збудженнями між резонатором та кубітом. У рамках цих припущень, доданки $\propto (a^\dagger \sigma_+ + a \sigma_-)$ в гамільтоніані $\hat{\mathcal{H}}_R$ можна вважати збуренням. У цьому випадку, гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}_R$ (наближено) діагоналізується унітарним перетворенням (Шріффера-Вольфа) такого вигляду [157]

$$U_{BS} = e^{-\Lambda(a^\dagger \sigma_+ - \sigma_- a)}. \quad (4.14)$$

Перетворення гамільтоніану Рабі $\hat{\mathcal{H}}_R$ породжує такий гамільтоніан

$$\hat{\mathcal{H}}_R \rightarrow U_{BS}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_R U_{BS} = H'_q + H'_{qr} + H'_r + O(\Lambda^2), \quad (4.15)$$

де гамільтоніани резонатора H'_r та кубіта H'_q у новому базисі мають такий

$$U_{BS}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_{res} U_{BS} = H'_r = \hbar(\omega_r + g\Lambda\sigma_z) a^\dagger a, \quad (4.16)$$

$$U_{BS}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_q U_{BS} = H'_q = \hbar(\omega_q + g\Lambda) \frac{\sigma_z}{2} \quad (4.17)$$

Зсув $g\Lambda\sigma_z$ у частоті резонатора відомий як *зсув Блоха-Зіґерта* [157]. Гамільтоніан взаємодії резонатора з кубітом H'_{qr} у новому базисі записується як

$$H'_{qr} = \hbar g(\sigma_+ a + a^\dagger \sigma_-), \quad (4.18)$$

Зауважимо, що у гамільтоніані (4.15) ми опустили доданки $\hbar g\Lambda\sigma_z a^2$ та їхні спряжені. Після формального інтегрування рівнянь руху для операторів $\sigma_\pm$ та $a^{(\dagger)}$, ці доданки дають внески порядку Λ^2 . Отже, треба знехтувати цими доданками, оскільки в гамільтоніані ми обмежуємось тільки доданками до першого порядку по параметру Λ . У цьому наближенні перетворення (4.14) ідентичне тому, що використовувалось у роботі [157].

Перетворимо решту доданків у повному гамільтоніані системи (4.5). Використовуючи рівняння (4.15)–(4.16) та перетворення змінної резонатора

$$a \rightarrow U_{\text{BS}}^\dagger a U_{\text{BS}} = a - \Lambda \sigma_+ + O(\Lambda^2), \quad (4.19)$$

отримуємо повний гамільтоніан системи у новому базисі

$$\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}}' = \hat{\mathcal{H}}_{\text{q}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\text{qr}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\text{r}} + \sum_{j=1,2} \left(\hat{\mathcal{H}}_{\text{rj}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\text{qj}} + \hat{\mathcal{H}}_j \right) + O(\Lambda^2). \quad (4.20)$$

Доданок

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{qj}} = \hbar \Lambda \int_0^\infty dk f_k \sigma_y \left(b_{jk} + b_{jk}^\dagger \right) \quad (4.21)$$

описує пряму взаємодію «вдягненого» кубіта з j -м хвилеводом. Зауважимо, що на відміну від гамільтоніану (4.4), гамільтоніан (4.20) дозволяє обмін збудженням між резонатором та кубітом. Оскільки резонатор зв'язаний з хвилеводами, то такий обмін збудженням призводить до релаксації кубіта через резонатор у хвилевід.

Якщо виконується критерій $\kappa, \kappa_q \ll \omega_{\text{r}}, \omega_{\text{q}}$ [158], то в гамільтоніані (4.21) можна знехтувати доданками $\propto (b_{jk}^\dagger a^\dagger + b_{jk} a)$ та $\propto (b_{jk}^\dagger \sigma_+ + b_{jk} \sigma_-)$, після чого $\hat{\mathcal{H}}_{\text{qj}}$ перепишеться як

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{qj}} \approx \hat{\mathcal{H}}_{\text{qj}}^{\text{RWA}} = i\hbar \Lambda \int_0^\infty dk f_k \left(b_{jk}^\dagger \sigma_- - \sigma_+ b_{jk} \right). \quad (4.22)$$

Параметр $\kappa = 4\pi f^2(\omega_{\text{r}})/v_g$ – швидкість швидкість витікання фотона з резонатора, а $\kappa_q = 4\pi f^2(\omega_{\text{q}})/v_g$ – швидкість витікання фотона з резонатора на частоті кубіта [157].

У подальшому, для опису динаміки системи, використовуватимемо та-

кий гамільтоніан

$$\hat{\mathcal{H}}' \rightarrow \hat{\mathcal{H}}'_{\text{RWA}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{q}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\text{qr}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\text{r}} + \sum_j \left(\hat{\mathcal{H}}_{\text{r}j} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{q}j}^{\text{RWA}} + \hat{\mathcal{H}}_j \right). \quad (4.23)$$

Можна показати, що $[\hat{\mathcal{H}}'_{\text{RWA}}, \hat{\mathcal{N}}_{\text{ex}}] = 0$, де $\hat{\mathcal{N}}_{\text{ex}} = a^\dagger a + \sigma_+ \sigma_- + \sum_j \int_0^\infty dk b_{j,k}^\dagger b_{j,k}$ – оператор повної кількості збуджень в системі. Отже, кількість збуджень в системі є сталою.

4.4.2 Рівняння руху операторів

Гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}'_{\text{RWA}}$ породжує таке рівняння Гайзенберга для змінних хвилюводу:

$$\dot{b}_{jk} = -i\omega_k b_{jk} + f_k(a + \Lambda\sigma_-). \quad (4.24)$$

Використовуючи дисперсійне співвідношення (4.11), формальний розв'язок рівняння (4.24) можна записати як

$$b_{jk}(t) = b_{jk}(0)e^{-iv_g kt} + f_k \int_0^t d\tau e^{-iv_g k(t-\tau)}(a + \Lambda\sigma_-)|_\tau. \quad (4.25)$$

Рівняння руху змінних резонатора та кубіта записуються як

$$\dot{a} = -i(\omega_{\text{r}} + g\Lambda\sigma_z)a - ig\sigma_- - \sum_{j=1}^2 \int_0^\infty dk f_k b_{j,k} \quad (4.26)$$

та

$$\dot{\sigma}_- = -i\omega_{\text{q}}\sigma_- + ig\sigma_z a - ig\Lambda(2a^\dagger a + 1)\sigma_- - \Lambda\sigma_z \sum_{j=1}^2 \int_0^\infty dk f_k b_{j,k}. \quad (4.27)$$

Використовуючи рівняння (4.25), отримаємо

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk f_k b_{j,k}(t) = B_j(t) + \int_0^\infty dk f_k^2 \int_0^t d\tau e^{-iv_g k(t-\tau)} a(\tau) \\ + \Lambda \int_0^\infty dk f_k^2 \int_0^t d\tau e^{-iv_g k(t-\tau)} \sigma_-(\tau), \end{aligned} \quad (4.28)$$

де оператор $B_j(t)$ визначається як

$$B_j(t) = \int_0^\infty dk f_k b_{j,k}(0) e^{-iv_g kt}. \quad (4.29)$$

Найбільший внесок в інтеграли в правій частині рівняння (4.28) дають хвильові вектори локалізовані поблизу значень $v_g k \approx \omega_r$ та $v_g k \approx \omega_q$. Таким чином, можна подовжити нижню границю інтегрування по k до $-\infty$. Використовуючи, що $\int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} = 2\pi\delta(x)$, отримаємо

$$\sum_{j=1}^2 \int_0^\infty dk f_k b_{j,k} \approx \sum_{j=1}^2 B_j + \frac{\kappa}{2} a + \Lambda \frac{\kappa_q}{2} \sigma_- \quad (4.30)$$

для $t > 0$. Із виразу (4.30) випливає, що оператор B_j задовольняє таким комутаційним співвідношенням

$$[B_j, b_{j,k}] = [B_j, a] = [B_j, \sigma_-] = 0. \quad (4.31)$$

Підстановка виразу (4.30) в (4.26) дає рівняння руху для оператора a

$$\dot{a} = -i(\bar{\omega}_r + g\Lambda\sigma_z) a - ig_q\sigma_- - \sum_{j=1}^2 B_j, \quad (4.32)$$

де $\bar{\omega}_r = \omega_r - i\kappa/2$ та $g_q = g - i\Lambda\kappa_q/2$.

Підстановка виразу (4.30) в рівняння (4.27) та врахування умови

$$\Lambda^2 \ll \lambda^2, \quad (4.33)$$

дає такий результат

$$\dot{\sigma}_- = -i[\omega_q + g\Lambda(2a^\dagger a + 1)]\sigma_- + ig_r\sigma_z a - \Lambda\sigma_z \sum_{j=1}^2 B_j, \quad (4.34)$$

де $g_r = g + i\Lambda\kappa/2$.

4.5 Контраст зчитування

Контраст зчитування (вимірювання) [146] визначається як

$$C = P_{\uparrow\uparrow} - P_{\uparrow\downarrow}, \quad (4.35)$$

де $P_{m|i}$ – ймовірність визначити кубіт у власному стані $|m\rangle$, в той час як, насправді, він знаходиться у стані $|i\rangle$.

Результат вимірювання в схемі, що розглядається, визначається сигналом від фотодетектора, під'єднаного до кінця другого хвилевода. Вважаємо, що у разі, якщо детектор спрацював («клікнув»), то кубіт знаходиться у стані $|\downarrow\rangle$. У разі, якщо детектор не спрацював, вважаємо, що кубіт знаходиться у стані $|\downarrow\rangle$. Формально перепишемо означення контрасту зчитування (4.35) як

$$C = P_{cl|\uparrow}[\xi(\omega)] - P_{cl|\downarrow}[\xi(\omega)], \quad (4.36)$$

де $P_{cl|q}$ – ймовірність спрацювання детектора, якщо кубіт приготований у власному стані $|q\rangle$ ($q = \uparrow, \downarrow$), а резонатор опромінюється хвильовим пакетом (імпульсом) зі спектральним розподілом $\xi(\omega)$. Вважаємо, що спе-

ктральний розподіл вхідного фотона $\xi(\omega)$ має лоренцівську форму

$$\xi(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t_p}} \frac{e^{i(\omega - \omega_p)t_0}}{\omega - \omega_p + i(2\tau_p)^{-1}}, \quad (4.37)$$

де ω_p – центральна частота вхідного хвильового пакету, якій відповідає хвильовий вектор $k_p = \omega_p/v_g$. У просторі хвильових векторів фотонів розподіл виражається як $\xi'(k) = \xi(\omega/v_g)/\sqrt{v_g}$. Спектральний розподіл (4.37) відповідає такому просторовому розподілу густини амплітуди ймовірності:

$$\begin{aligned} \varrho_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \xi'(k) \\ &= \frac{1}{\sqrt{v_g t_p}} \exp\left(ik_p x + \frac{x + v_g t_0}{2v_g \tau_p}\right) \theta(-x - v_g t_0). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Якщо не враховувати обмін збудженнями між кубітом та резонатором, тобто вважати, що кубіт не піддається парселлівській релаксації (*Purcell relaxation*), то ймовірність детектувати фотон визначається як

$$P_{cl} = \eta \langle \hat{\mathcal{N}}_{tr} \rangle, \quad (4.39)$$

де $\hat{\mathcal{N}}_{tr}$ – оператор кількості фотонів, що пройшли систему резонатор-кубіт та потрапили у другий хвилевід, η – квантова ефективність фотодетектора. Оператор $\hat{\mathcal{N}}_{tr}$ можна виразити як

$$\hat{\mathcal{N}}_{tr} = \int_0^{v_g t_m} dx \varrho(x, t_m) = v_g \int_0^{t_m} d\tau \hat{\varrho}_{tr}[v_g(t_m - \tau), t_m], \quad (4.40)$$

де $\hat{\varrho}_{tr}(x, t) = b_2^\dagger(x, t)b_2(x, t)$ – оператор розподілу просторової густини фотонів, що пройшли систему резонатор-кубіт. Нагадаємо, що параметр t_m – час, впродовж якого здійснюється вимірювання. Послугуючись міркуваннями, аналогічними тим, що використовувались для виведення співвідно-

шення (1.43a) [або (2.46)], та усереднюючи по початковому стану системи, отримуємо

$$\langle \hat{\mathcal{N}}_{\text{tr}} \rangle = \frac{\kappa}{2} \int_0^{t_m} d\tau \langle a^\dagger a \rangle_\tau. \quad (4.41)$$

Враховуючи вираз (4.39), приходимо до співвідношення

$$P_{\text{cl}} = \eta \frac{\kappa}{2} \int_0^{t_m} d\tau \langle a^\dagger a \rangle_\tau. \quad (4.42)$$

З практичної точки зору, цікавим є випадок великого дисперсного зсуву ($\chi t_p \gg 1$). В роботі [37] показано, що в такому режимі контраст зчитування максимізується при $\kappa \approx 2(\chi^2/\tau_p)^{1/3}$. За такої умови контраст добре апроксимується виразом²

$$C \approx \eta \left(1 - \frac{3}{2\kappa\tau_p} \right). \quad (4.43)$$

4.6 Вплив парселлівської релаксації на контраст зчитування

При врахуванні обміну збудженнями між резонатором та кубітом, рівняння (4.39) треба переписати у більш загальному вигляді, оскільки воно працює тільки у випадку, коли на детектор може прийти не більше одного фотона. Однак, якщо кубіт був приготований у збудженому стані, є ймовірність знайти два фотона у хвилеводі 2, який під'єднаний до фотодетектора. Додатковий фотон може виникнути внаслідок парселлівського розпаду кубіта. У загальному випадку багатифотонного хвильового пакету, який надходить до *on-off* фотодетектора, ймовірність його спрацювання

² Див. детальне виведення цього співвідношення в Розділі V та Додатку В статті [37].

визначається як

$$P_{\text{cl}}|_q = 1 - \left\langle : \exp(-\eta \hat{\mathcal{N}}_{\text{tr}}) : \right\rangle_q, \quad q = \uparrow, \downarrow. \quad (4.44)$$

Розклавши цей вираз у ряд Тейлора, отримаємо

$$P_{\text{cl}}|_q = \sum_{n \geq 1} (-1)^{n+1} \frac{\eta^n}{n!} \left\langle : \hat{\mathcal{N}}_{\text{tr}}^n : \right\rangle_q, \quad (4.45)$$

де $::$ означає нормальне впорядкування операторів. Усереднення проводиться по початковому стану системи $|\Psi_q\rangle$.

4.6.1 Кубіт приготований в основному стані

Коли кубіт приготований у основному стані, ми стикаємось із задачею з одним збудженням, оскільки вхідний імпульс містить лише один фотон, а кількість частинок в системі зберігається. У такому разі, доданки з $n \geq 2$ зникають у розкладі (4.45). Отже, рівняння (4.45) спрощується до такого вигляду

$$P_{\text{cl}}|_{\downarrow} = \eta \langle \Psi_{\downarrow} | \hat{\mathcal{N}}_{\text{tr}} | \Psi_{\downarrow} \rangle = \eta \int_0^{\infty} dk \langle \Psi_{\downarrow} | b_{2,k}^{\dagger} b_{2,k} | \Psi_{\downarrow} \rangle, \quad (4.46)$$

де $|\Psi_{\downarrow}\rangle = |\downarrow\rangle|0^{\text{r}}\rangle|1_{\xi}^{\text{I}}\rangle|0^{\text{II}}\rangle$ – початковий стан системи.

Для обчислення $\langle \Psi_{\downarrow} | b_{2,k}^{\dagger} b_{2,k} | \Psi_{\downarrow} \rangle$ використаємо представлення $b_{2,k}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}'t} b_{2,k}(0) e^{-i\hat{\mathcal{H}}'t}$. Отримаємо такий вираз

$$\langle \Psi_{\downarrow} | b_{2,k}^{\dagger}(t) b_{2,k}(t) | \Psi_{\downarrow} \rangle = \langle \psi_1(t) | b_{2,k}^{\dagger}(0) b_{2,k}(0) | \psi_1(t) \rangle, \quad (4.47)$$

де $|\psi_1(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}'t} |\Psi_{\downarrow}\rangle$ – стан системи в момент часу t , якщо початковий стан системи $|\psi_1(0)\rangle = |\Psi_{\downarrow}\rangle$. Оскільки кількість збуджень в системі є сталою, то в цьому випадку еволюція стану системи відбувається суто у тому підпросторі гільбертового простору станів системи, який охоплює стани з

одним збудженням. Залежний від часу стан системи з одним збудженням $|\psi_1(t)\rangle$ записується як [15]

$$|\psi_1(t)\rangle = \sum_{j=1}^2 \int_0^\infty dk Z_k^{(j)}(t) b_{j,k}^\dagger(0) |\emptyset\rangle + R_1(t) a^\dagger(0) |\emptyset\rangle + R_2(t) \sigma_+(0) |\emptyset\rangle, \quad (4.48)$$

де $|\emptyset\rangle \equiv |\downarrow\rangle |0^r\rangle |0^I\rangle |0^\Pi\rangle$ відповідає вакуумному стану системи. Підстановка виразу (4.48) в праву частину рівняння (4.47) дає

$$\langle \Psi_\downarrow | b_{2,k}^\dagger b_{2,k} | \Psi_\downarrow \rangle = |Z_k^{(2)}(t)|^2. \quad (4.49)$$

Із виразу хвильової функції системи (4.48) випливає співвідношення $Z_k^{(2)}(t) = \langle \emptyset | b_{2,k}(0) | \psi_1(t) \rangle$, яке можна переписати у такому вигляді $Z_k^{(2)}(t) = e^{-iE_0 t} \langle \emptyset | b_{2,k}(t) | \Psi_\downarrow \rangle$, де $E_0 = \langle \emptyset | \hat{\mathcal{H}}' | \emptyset \rangle$ – енергія вакуумного стану системи. Нарешті, отримаємо такий вираз

$$\langle \Psi_\downarrow | b_{2,k}^\dagger b_{2,k} | \Psi_\downarrow \rangle = |\langle \emptyset | b_{2,k} | \Psi_\downarrow \rangle|^2. \quad (4.50)$$

Використовуючи рівняння Гайзенберга (4.24) та дисперсійне співвідношення (4.11), отримаємо рівняння руху для матричного елемента $\langle \emptyset | b_{2,k} | \Psi_\downarrow \rangle$:

$$(\partial_t + i v_g k) \langle \emptyset | b_{2,k} | \Psi_\downarrow \rangle = f_k \langle \emptyset | a | \Psi_\downarrow \rangle + \Lambda f_k \langle \emptyset | \sigma_- | \Psi_\downarrow \rangle, \quad (4.51)$$

з початковою умовою $\langle \emptyset | b_{2,k} | \Psi_\downarrow \rangle = 0$ при $t = 0$.

Використовуючи рівняння (4.32) та (4.34), отримаємо рівняння руху для матричних елементів $\langle \emptyset | a | \Psi_\downarrow \rangle$ та $\langle \emptyset | \sigma_- | \Psi_\downarrow \rangle$. Ці рівняння мають такий вигляд

$$[\partial_t + i(\bar{\omega}_r - g\Lambda)] \langle \emptyset | a | \Psi_\downarrow \rangle = -i g_q \langle \emptyset | \sigma_- | \Psi_\downarrow \rangle - f_p \Xi(v_g t), \quad (4.52a)$$

$$[\partial_t + i(\omega_q + g\Lambda)] \langle \emptyset | \sigma_- | \Psi_\downarrow \rangle = -i g_r \langle \emptyset | a | \Psi_\downarrow \rangle - \Lambda f_p \Xi(v_g t). \quad (4.52b)$$

Ця пара диференціальних рівнянь має нульові початкові умови. Для того,

щоб вивести рівняння руху (4.52a) and (4.52b), використано співвідношення $\langle \emptyset | a^\dagger = 0$ та $\langle \emptyset | \sigma_z = -\langle \emptyset |$, а також $B_2(t) |\Psi_\downarrow\rangle = 0$, $B_1(t) |\Psi_\downarrow\rangle \approx f_p \Xi(v_g t) |\emptyset\rangle$, де $\Xi(v_g t) = \int dk e^{-ikv_g t} \xi'(k)$. В рівняннях (4.52) введено позначення $f_p \equiv f_{k_p}$.

Розв'язки рівнянь (4.51) та (4.52) записуються як

$$\begin{aligned} \langle \emptyset | b_{2,k} | \Psi_\downarrow \rangle = & i f_k f_p \int_0^t dt' \Xi(v_g t') \left[\frac{\omega_q - g\Lambda - v_g k}{(\mathcal{E}^+ - v_g k)(\mathcal{E}^- - v_g k)} e^{-iv_g k(t-t')} \right. \\ & \left. + \sum_{\mu=\pm} \mu \frac{\omega_q - g\Lambda - \mathcal{E}^\mu}{(\mathcal{E}^+ - \mathcal{E}^-)(\mathcal{E}^\mu - v_g k)} e^{-i\mathcal{E}^\mu(t-t')} \right], \end{aligned} \quad (4.53)$$

та

$$\langle \emptyset | a | \Psi_\downarrow \rangle = \frac{f_p}{\mathcal{E}^+ - \mathcal{E}^-} \int_0^t dt' \Xi(v_g t') \sum_{\mu=\pm} \mu (\omega_q - \mathcal{E}^\mu) e^{-i\mathcal{E}^\mu(t-t')}, \quad (4.54a)$$

$$\langle \emptyset | \sigma_- | \Psi_\downarrow \rangle = \frac{f_p}{\mathcal{E}^+ - \mathcal{E}^-} \int_0^t dt' \Xi(v_g t') \sum_{\mu=\pm} \mu [\Lambda(\omega_r - \mathcal{E}^\mu) - g] e^{-i\mathcal{E}^\mu(t-t')}, \quad (4.54b)$$

де $\mathcal{E}^\pm$ – однофотонні резонансні частоти системи резонатор-кубіт:

$$\mathcal{E}^\pm = \frac{\bar{\omega}_r + \omega_q}{2} \pm \sqrt{g_r g_q + \left(\frac{\bar{\omega}_r - \omega_q}{2} - g\Lambda \right)^2}$$

В рівняннях (4.54a) та (4.54b) ми опустили доданки $\propto \Lambda^2$ через умову (4.13).

4.6.2 Кубіт приготований у збудженому стані

Якщо кубіт був приготований у збудженому стані, треба описувати еволюцію стану системи з двома збудженнями. У цьому випадку ймовірність

спрацювання («кліка») фотодетектора (4.45) зводиться до такого виразу

$$P_{cl|\uparrow} = \eta \int_0^\infty dk \langle \Psi_\uparrow | b_{2,k}^\dagger b_{2,k} | \Psi_\uparrow \rangle - \frac{\eta^2}{2} \int_0^\infty dk \int_0^\infty dk' \langle \Psi_\uparrow | b_{2,k'}^\dagger b_{2,k}^\dagger b_{2,k} b_{2,k'} | \Psi_\uparrow \rangle, \quad (4.55)$$

де $|\Psi_\uparrow\rangle = |\varphi\rangle|1_\xi^I\rangle|0^\Pi\rangle$, $|\varphi\rangle \equiv U_{BS}|0^r\rangle|\uparrow\rangle \approx |\uparrow\rangle|0^r\rangle + \lambda|\downarrow\rangle|1^r\rangle$.

Для обчислення інтегрантів у правій частині (4.55), використаємо залежну від часу хвильову функцію системи з двома збудженнями $|\psi_2(t)\rangle = e^{-iH't}|\Psi_\uparrow\rangle$, яка записується у такому вигляді [15]:

$$\begin{aligned} |\psi_2(t)\rangle &= \sum_{j=1}^2 \sum_{j'=1}^2 \mathcal{C}_{j,j'} \int_0^\infty dk \int_0^\infty dk' \Phi_{k,k'}^{j,j'}(t) b_{jk}^\dagger(0) b_{j'k'}^\dagger(0) |0\rangle \\ &+ \sum_{j=1}^2 \int_0^\infty dk \left[X_k^j(t) a(0) + Y_k^j(t) \sigma_-(0) \right] b_{jk}^\dagger(0) |0\rangle \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}} Q_1(t) [a^\dagger(0)]^2 |0\rangle + Q_2(t) a^\dagger(0) \sigma_+(0) |0\rangle, \end{aligned} \quad (4.56)$$

де $\mathcal{C}_{j,j'} = 1/[(2 - \delta_{j,j'})\sqrt{1 + \delta_{j,j'}}]$ – константа нормування. Використовуючи хвильову функцію (4.56), отримаємо для першого інтегранда в (4.55) такий вираз

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\uparrow | b_{2,k}^\dagger b_{2,k} | \Psi_\uparrow \rangle|_t &= \langle \psi_2(t) | b_{2,k}^\dagger(0) b_{2,k}(0) | \psi_2(t) \rangle \\ &= 2 \int_0^\infty dk' \left| \Phi_{k,k'}^{(2,2)}(t) \right|^2 + \left| X_k^{(2)}(t) \right|^2 + \left| Y_k^{(2)}(t) \right|^2. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Для другого інтегранда, отримуємо

$$\langle \Psi_\uparrow | b_{2,k'}^\dagger b_{2,k}^\dagger b_{2,k} b_{2,k'} | \Psi_\uparrow \rangle|_t = 2 \left| \Phi_{k,k'}^{(2,2)}(t) \right|^2. \quad (4.58)$$

Використовуючи підхід, що застосовувався у Розділі 3 для виведення рівнянь руху для амплітуд ймовірностей, можна виразити амплітуди ймовірностей, що виникають в рівняннях (4.57) та (4.58), через відповідні матричні елементи у такому вигляді [15]:

$$\Phi_{k,k'}^{(2,2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \emptyset | b_{2,k} b_{2,k'} | \Psi_{\uparrow} \rangle, \quad X_k^{(2)} = \langle \emptyset | b_{2,k} a | \Psi_{\uparrow} \rangle, \quad Y_k^{(2)} = \langle \emptyset | b_{2,k} \sigma_- | \Psi_{\uparrow} \rangle. \quad (4.59)$$

Це представлення дає такий результат:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\uparrow} | b_{2,k}^{\dagger} b_{2,k} | \Psi_{\uparrow} \rangle &= \int_0^{\infty} dk' |\langle \emptyset | b_{2,k'} b_{2,k} | \Psi_{\uparrow} \rangle|^2 \\ &+ |\langle \emptyset | b_{2,k} a | \Psi_{\uparrow} \rangle|^2 + |\langle \emptyset | b_{2,k} \sigma_- | \Psi_{\uparrow} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (4.60)$$

та

$$\langle \Psi_{\uparrow} | b_{2,k'}^{\dagger} b_{2,k}^{\dagger} b_{2,k} b_{2,k'} | \Psi_{\uparrow} \rangle = |\langle \emptyset | b_{2,k} b_{2,k'} | \Psi_{\uparrow} \rangle|^2. \quad (4.61)$$

Використовуючи рівняння Гайзенберга (4.24), отримаємо рівняння, яке описує еволюцію матричного елемента $\langle \emptyset | b_{2,k} b_{2,k'} | \Psi_{\uparrow} \rangle$:

$$[\partial_t + i v_g(k + k')] \langle \emptyset | b_{2,k} b_{2,k'} | \Psi_{\uparrow} \rangle = \langle \emptyset | (f_{k'} b_{2,k} + f_k b_{2,k'})(a + \Lambda \sigma_-) | \Psi_{\uparrow} \rangle. \quad (4.62)$$

Використовуючи рівняння (4.24), (4.32) та (4.34) та комутаційне співвідношення (4.31), отримаємо рівняння руху для $\langle \emptyset | b_{2,k} a | \Psi_{\uparrow} \rangle$ та $\langle \emptyset | b_{2,k} \sigma_- | \Psi_{\uparrow} \rangle$:

$$\begin{aligned} [\partial_t + i(v_g k + \bar{\omega}_r - g\Lambda)] \langle \emptyset | b_{2,k} a | \Psi_{\uparrow} \rangle &= -i g_q \langle \emptyset | b_{2,k} \sigma_- | \Psi_{\uparrow} \rangle + f_k \langle \emptyset | a^2 | \Psi_{\uparrow} \rangle \\ &+ \Lambda f_k \langle \emptyset | \sigma_- a | \Psi_{\uparrow} \rangle - f_p \Xi(v_g t) \langle \emptyset | b_{2,k} | \Phi \rangle, \end{aligned} \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned} [\partial_t + i(v_g k + \omega_q + g\Lambda)] \langle \emptyset | b_{2,k} \sigma_- | \Psi_{\uparrow} \rangle &= -i g_r \langle \emptyset | b_{2,k} a | \Psi_{\uparrow} \rangle + f_k \langle \emptyset | \sigma_- a | \Psi_{\uparrow} \rangle \\ &- \Lambda f_p \Xi(v_g t) \langle \emptyset | b_{2,k} | \Phi \rangle, \end{aligned} \quad (4.64)$$

де $|\Phi\rangle = |\varphi\rangle|0^I\rangle|0^II\rangle$. Аналогічним чином отримаємо рівняння руху для матричних елементів $\langle\emptyset|a^2|\Psi_\uparrow\rangle$ та $\langle\emptyset|\sigma_-a|\Psi_\uparrow\rangle$:

$$[\partial_t + 2i(\bar{\omega}_r - g\Lambda)] \langle\emptyset|a^2|\Psi_\uparrow\rangle = -ig_q \langle\emptyset|\sigma_-a|\Psi_\uparrow\rangle - 2f_p \Xi(v_g t) \langle\emptyset|a|\Phi\rangle, \quad (4.65)$$

$$[\partial_t + i(\omega_q + \bar{\omega}_r)] \langle\emptyset|\sigma_-a|\Psi_\uparrow\rangle = -ig_r \langle\emptyset|a^2|\Psi_\uparrow\rangle - f_p \Xi(v_g t) \langle\emptyset|(\sigma_- + \Lambda a)|\Phi\rangle. \quad (4.66)$$

Рівняння руху (4.62)–(4.66) мають нульові початкові умови.

Рівняння руху для матричних елементів $\langle\emptyset|b_{2,k}|\Phi\rangle$, $\langle\emptyset|a|\Phi\rangle$, та $\langle\emptyset|\sigma_-|\Phi\rangle$ записуються як

$$(\partial_t + iv_g k) \langle\emptyset|b_{2,k}|\Phi\rangle = f_k \langle\emptyset|a|\Phi\rangle + \Lambda f_k \langle\emptyset|\sigma_-|\Phi\rangle, \quad (4.67a)$$

$$[\partial_t + i(\bar{\omega}_r - g\Lambda)] \langle\emptyset|a|\Phi\rangle = -ig_q \langle\emptyset|\sigma_-|\Phi\rangle, \quad (4.67b)$$

$$[\partial_t + i(\omega_q + g\Lambda)] \langle\emptyset|\sigma_-|\Phi\rangle = -ig_r \langle\emptyset|a|\Phi\rangle. \quad (4.67b)$$

Початкові умови (при $t = 0$) для цієї системи рівнянь такі: $\langle\emptyset|b_{2,k}|\Phi\rangle = 0$, $\langle\emptyset|a|\Phi\rangle = \lambda$, та $\langle\emptyset|\sigma_-|\Phi\rangle = 1$.

Нехтуючи доданками $\propto \lambda\Lambda$ через умови (4.13) та (4.33), знаходимо розв'язок рівнянь (4.67) у такому вигляді

$$\begin{aligned} \langle\emptyset|b_{2,k}|\Phi\rangle = & if_k \frac{g_q + \lambda(\omega_q - v_g k)}{(\mathcal{E}^+ - v_g k)(\mathcal{E}^- - v_g k)} e^{-iv_g k t} \\ & + if_k \sum_{\mu=\pm} \mu \frac{g_q - \lambda(\omega_q - \mathcal{E}^\mu)}{(\mathcal{E}^+ - \mathcal{E}^-)(\mathcal{E}^\mu - v_g k)} e^{-i\mathcal{E}^\mu t}, \end{aligned} \quad (4.68a)$$

$$\langle\emptyset|a|\Phi\rangle = \frac{1}{\mathcal{E}^+ - \mathcal{E}^-} \sum_{\mu=\pm} \mu [g_q - \lambda(\omega_q - \mathcal{E}^\mu)] e^{-i\mathcal{E}^\mu t}, \quad (4.68b)$$

$$\langle\emptyset|\sigma_-|\Phi\rangle = -\frac{1}{\mathcal{E}^+ - \mathcal{E}^-} \sum_{\mu=\pm} \mu [\bar{\omega}_r - g(\lambda + \Lambda) - \mathcal{E}^\mu] e^{-i\mathcal{E}^\mu t}. \quad (4.68b)$$

4.6.3 Динаміка населеності кубіта

Населеність верхнього рівня кубіта у момент часу t визначається як $P_q(t) = \langle \Psi_q | \sigma_+ \sigma_- | \Psi_q \rangle|_t$. Застосовуючи підхід, використаний при виведенні рівнянь (4.50) та (4.57), отримаємо

$$P_{\downarrow}(t) = |Z_2(t)|^2 = |\langle 0 | \sigma_- | \Psi_{\downarrow} \rangle|^2 \quad (4.69)$$

для випадку кубіта приготованого в основному стані, та

$$\begin{aligned} P_{\uparrow}(t) &= |Q_2(t)|^2 + \sum_{j=1}^2 \int_0^{\infty} dk |Y_k^{(j)}(t)|^2 \\ &= |\langle 0 | \sigma_- a | \Psi_{\uparrow} \rangle|^2 + \sum_{j=1}^2 \int_0^{\infty} dk |\langle 0 | b_{j,k} \sigma_- | \Psi_{\uparrow} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (4.70)$$

для випадку кубіт приготованого у збудженому стані.

З останнього доданку в другому рядку рівняння (4.70) видно, що для обчислення $P_{\uparrow}(t)$ треба визначити матричний елемент $\langle 0 | b_{1,k} \sigma_- | \Psi_{\uparrow} \rangle$. Рівняння руху для нього можна отримати зміною індексу хвилеводу з 1 на 2 в рівнянні (4.64). Рівняння, які описують еволюцію матричних елементів $\langle 0 | b_{1,k} a | \Psi_{\uparrow} \rangle$ та $\langle \emptyset | b_{1,k} | \Phi \rangle$, отримуються аналогічною заміною в рівняннях (4.63) та (4.68a), відповідно. Початковими умовами для цих рівнянь є $\langle 0 | b_{1,k} \sigma_- | \Psi_{\uparrow} \rangle|_{t=0} = \xi'(k)$ та $\langle 0 | b_{1,k} a | \Psi_{\uparrow} \rangle|_{t=0} = \lambda \xi'(k)$. Для матричного елемента $\langle \emptyset | b_{1,k} | \Phi \rangle$, маємо $\langle \emptyset | b_{1,k} | \Phi \rangle|_{t=0} = \langle \emptyset | b_{2,k} | \Phi \rangle|_{t=0} = 0$, що означає $\langle \emptyset | b_{1,k} | \Phi \rangle = \langle \emptyset | b_{2,k} | \Phi \rangle$.

4.7 Результати

Як впливає з рівняння (4.43), для збільшення контрасту треба зменшити величину κt_m . Для цього можна або збільшити довжину вхідного

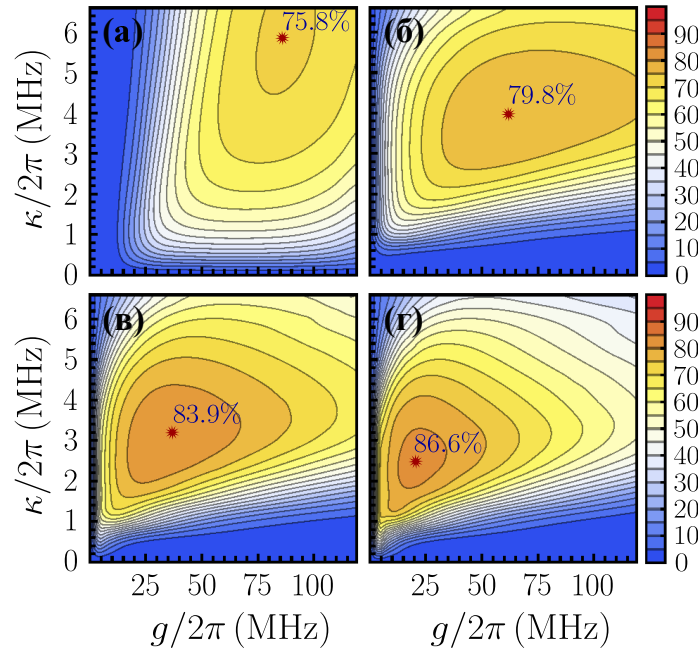


Рис. 4.2. Залежність контрасту зчитування від швидкості витікання з резонатора κ та параметру зв'язку резонатора з кубітом для різних довжин вхідних імпульсів: (а) $t_m = 1 \mu s$, (б) $t_m = 2 \mu s$, (в) $t_m = 5 \mu s$, та (г) $t_m = 10 \mu s$. Час вимірювання та тривалість вхідного імпульсу пов'язані як $t_m = 6\tau_p$. Частоти кубіта та резонатора $\omega_q = 5.0 \text{ GHz}$ та $\omega_r = 4.09 \text{ GHz}$, відповідно. Фотодетектор вважаємо ідеальним $\eta = 1$. Зірочкою позначено положення максимального контрасту $C_{\max}$.

імпульсу τ_p , або ж збільшити швидкість витікання фотона з резонатора κ . Використання довших імпульсів сповільнює вимірювання, що обмежує застосовність такої схеми. Тоді як збільшення κ призводить до зменшення часу життя кубіта через парселлівську релаксацію, що небажано.

Наведемо загальні міркування, які стосуються впливу парселлівської релаксації на ефективність зчитування у схемі, що розглядається. У процесі вимірювання, збуджений стан кубіт релаксує, через це, зсунута частота резонатора відсувається від центральної частоти вхідного імпульсу ω_r , що призводить до зменшення контрасту. Для зменшення цього ефекту та покращення контрасту, можна придушити парселлівську релаксацію кубіта, тобто збільшити час життя кубіта $T_p = 1/(\lambda^2\kappa)$. Для цього можна зменшити або κ або параметр $\lambda = g/(\omega_q - \omega_r)$. Зменшення λ можна досягти

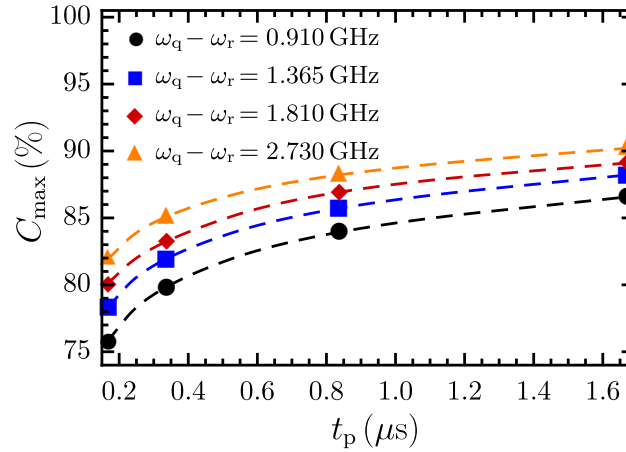


Рис. 4.3. Залежність максимального контрасту зчитування від тривалості вхідного імпульсу τ_p для різних значень $\omega_q - \omega_r$. Для задоволення умови (4.33) обрано співвідношення $\lambda/\Lambda = 10$. Решта параметрів така ж, як на Рис. 4.2.

або шляхом збільшення $\omega_q - \omega_r$, або ж послаблення зв'язку резонатора з кубітом, тобто зменшення g . Однак, у кожного з цих підходів є обмеження. Зменшення швидкості витікання фотона з резонатора κ збільшує похибку викликану немонохроматичністю вхідного сигналу. Послаблення зв'язку кубіта з резонатором g або збільшення $\omega_q - \omega_r$ збільшує парселлівський час життя кубіта T_R . Однак, це призводить до зменшення повного зсуву частоти резонатора $\chi = g(\lambda + \Lambda)$. З іншого боку, чим більший зсув частоти резонатора χ порівняно зі швидкістю витікання фотона з резонатора (шириною лінії резонатора) κ , тим краще можна розрізнити стани кубіта. Ці міркування наводять на висновок, що для заданого часу вимірювання t_m та величини $\omega_q - \omega_r$ має існувати комбінація значень швидкості витікання фотона з резонатора κ та сили зв'язку g , коли досягається максимальне значення контрасту.

Для того, щоб проілюструвати цей висновок, ми побудували залежності контрасту зчитування від параметру зв'язку кубіта з резонатором g та швидкості витікання фотона з резонатора κ для декількох значень часу вимірювання, який співвідноситься з довжиною вхідного сигналу як $t_m = 6t_p$, та фіксованого значення $\omega_q - \omega_r = 0.91$ GHz. Графіки цих за-

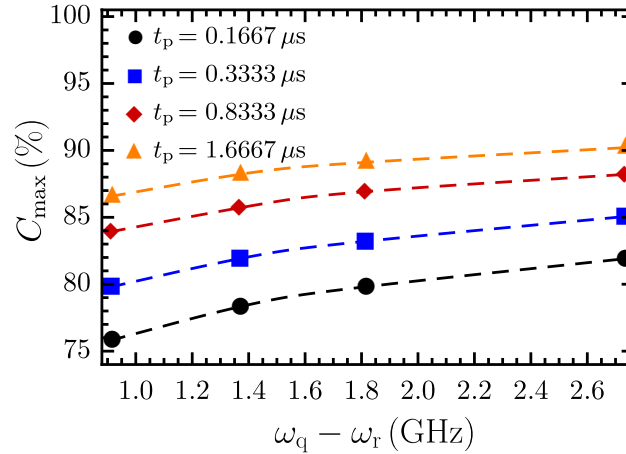


Рис. 4.4. Залежність максимального контрасту від $\omega_q - \omega_r$ для різних тривалостей вхідного імпульсу τ_p . Значення решти параметрів збігаються з тими, що використовувались для розрахунків на Рис. 4.3.

лежностей показані на Рис. 4.2. Для кожного значення t_m визначено величину максимального контрасту $C_{\max}$ та відповідні значення параметрів κ та g . Використовуючи описаний вище метод, визначимо залежність максимального контрасту зчитування $C_{\max}$ від довжини вхідного імпульсу t_p та величини $\omega_q - \omega_r$. Ці залежності продемонстровані на Рис. 4.3 та 4.4. Обчислення показують, що більший контраст досягається використанням довших вхідних імпульсів та більших значень $|\omega_q - \omega_r|$.

Підкреслимо важливу деталь. Для розрахунків контрасту зчитування частоти кубіта ω_q та резонатора ω_r підбирались так, щоб $\omega_q > \omega_r$. Таке співвідношення частот забезпечує однаковий знак дисперсного зсуву $g\lambda$ та зсуву Блоха-Зігера $g\Lambda$, що збільшує загальний зсув частоти резонатора $\chi = g(\lambda + \Lambda)$. Це збільшує контраст зчитування, оскільки завдяки більшому зсуву частоти резонатора можна краще розрізнити стани кубіта.

4.8 Висновки

У цьому розділі досліджено дисперсне зчитування стану кубіта в схемі з фотодетектором у граничному випадку зчитування однофотонним імпульсом. При використанні однофотонних імпульсів немає похибки, яка

виникає через неортогональність стану вимірюючого сигналу. Така похибка виникає, наприклад, при вимірюванні сигналом у когерентному стані, який зазвичай використовується в схемах дисперсного вимірювання. Окрім цього, схема зчитування з фотодетектором більш придатна для інтегрування на чіп, ніж традиційні схеми з гомодинним детектуванням. Нині вже продемонстровано низку перспективних реалізацій мікрохвильових циркуляторів на чіпах [162, 163, 164], створено ефективні джерела однофотонних імпульсів [55, 165] та запропоновано декілька схем детектування мікрохвильових фотонів [148, 149, 150, 153, 166].

У досліджуваній схемі досягнення високих контрастів зчитування потребує більших часів вимірювання порівняно з іншими підходами, оскільки для зчитування використовується лише один фотон. Оскільки вхідний фотон немонохроматичний, завжди є ймовірність небажаного відбиття або проходження, що призводить до зниження контрасту зчитування. Зменшення спектральної ширини вхідного хвильового пакету, зменшує похибки зчитування спричинені немонохроматичністю. Однак, це збільшує час зчитування, що вимагає довших часів когерентності кубіта. Збільшити ефективність однофотонного зчитування можна використовуючи парселлівський фільтр (*Purcell filter*) [142], який пригнічує релаксацію кубіта. Це дасть змогу або використовувати сильніший зв'язок кубіта з резонатором g , що призведе до збільшення дисперсного зсуву, або ж збільшити швидкість витікання з резонатора κ , що дасть змогу використовувати коротші імпульси та пришвидшить вимірювання.

РОЗДІЛ 5

КВАНТОВО-КЛАСИЧНИЙ ПІДХІД ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ
НЕАДІАБІТИЧНОЇ ЕЛЕКТРОННО-ЯДЕРНОЇ ДИНАМІКИ

5.1 Вступ

Точне та швидке моделювання динаміки зв'язаних електронно-ядерних систем є ключовим для розуміння фотофізичних та оптоелектронних процесів у складних молекулярних системах [26, 27]. Для моделювання молекул, які складаються більш ніж декількох атомів, можна використовувати методи неадіабітичної молекулярної динаміки, в яких повна енергія молекули та сили, що діють на ядра, обчислюються «на льоту» (*on-the-fly*) для всіх необхідних електронних станів [27]. Ці величини, обчислювані методами розрахунку електронної структури, таких як методи лінійного відгуку [167], використовуються у змішаних квантово-класичних [33, 34, 35, 168, 169, 170] або ж повністю квантових [] алгоритмах розрахунку молекулярної динаміки. Квантово-класичні підходи, однак, потерпають від так званої проблеми «надмірної когерентності» («*overcoherence*») через використання підходу середнього поля для представлення електронних чи електронно-ядерних станів [171, 33]. Повністю квантові підходи потребують дуже багато обчислювальних ресурсів для систем з багатьма частинками.

У низці робіт [172, 173, 174, 175] пропонуються алгоритми моделювання неадіабітичної молекулярної динаміки, в яких електронні стани розглядаються як строго визначені залежною від часу конфігурацією ядерної підсистеми. Показано, що визначення електронних станів тільки в адіабатичному представленні приводить до квантово-класичного поняття про стрибки імпульсу [172], яке використовується в *surface hopping* алгоритмах [176], а

також у формалізмі квантово-класичного рівняння Ліувілля [34]. В роботі [175] підхід стрибків імпульсу вдосконалено шляхом введення ефективного *momentum-jump* гамільтоніану. Використовуючи цей гамільтоніан, в роботі [175] запропоновано покращений алгоритм заснований на підході середнього поля (метод Еренфеста).

У цьому розділі використовуючи формалізм матриці густини продемонстровано подальший розвиток підходу з використанням *momentum-jump* гамільтоніану [175] для опису зв'язаної електронно-ядерної динаміки в молекулярних системах. Представлено детальне виведення рівнянь еволюції населеностей адіабатичних електронних рівнів. Реалізовано ефективний алгоритм, заснований на модифікації алгоритму *fewest switches surface hopping*, (*FSSH*), запропонованого для моделювання зв'язаної електронно-ядерної динаміки *J. C. Tully* в роботі [177]. Запропонований алгоритм працює і в квантовому немарківському режимі слабкої декогеренції і в класичному режимі сильної декогеренції. В режимі сильної декогеренції продемонстровано реалізацію детального балансу при скінченній температурі системи.

5.2 Ефективний молекулярний гамільтоніан

Молекулярний гамільтоніан можна представити у такому вигляді

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}(\mathbf{R}). \quad (5.1)$$

Перший доданок є кінетичною енергією ядер $\hat{\mathcal{T}} = \sum_{\alpha} \hat{p}_{\alpha}^2 / (2M_{\alpha})$, де $\hat{p}_{\alpha} = -i\nabla_{R_{\alpha}}$ – оператор імпульсу, R_{α} означає α компоненту N -вимірного вектора ядерних координат $\mathbf{R} = (R_1, R_2, \dots, R_{3N})$, де N – кількість атомів (ядер) у молекулі. Доданок $\hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}$ описує електронну підсистему молекули і включає кінетичну енергію та усі електрон-електронні та ядерно-ядерні взає-

модії, які параметрично залежать від положення ядер $\mathbf{R}$. У цьому розділі для зручності використовується атомну систему одиниць (систему одиниць Гартрі) [178], тобто $\hbar = k_B = \epsilon_0 = 1$. Оператори, які діють на підпростір електронних станів, позначаються символами з «дашком».

Молекулярний гамільтоніан (5.1) зазвичай представляють у базисі власних станів електронного гамільтоніану $\hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}(\mathbf{R})$: [179]

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle, \quad (5.2)$$

де $E_n(\mathbf{R})$ описує ізоенергетичну поверхню (*potential energy surface*), яка відповідає адіабатичному електронному стану $|n(\mathbf{R})\rangle$. У такому базисі молекулярний гамільтоніан, який виражається рівнянням (5.1), перетворюється на так званий «*velocity-gauge*» гамільтоніан [179]¹.

Однак, якщо працювати з адіабатичними власними станами $|n(\mathbf{R})\rangle$, які є функціями $3N$ -вимірного вектора ядерних координат $\mathbf{R}$, обчислення енергетичних поверхонь та векторів неадіабатичного зв'язку швидко стає надмірно витратною обчислювальною задачею через експоненційне зростання необхідних обчислювальних ресурсів при зростанні кількості ядерних ступеней вільності системи. Отже, для симуляції *ab-initio* неадіабатичної молекулярної динаміки більш прийнятними є так звані методи «на льоту» (*on-the-fly*). При використанні цих методів, енергетичні поверхні та вектори неадіабатичного зв'язку обчислюються для певного залежного від часу положення ядер $\bar{\mathbf{R}}_t$. Суть цих методів полягає у тому, що працюють з адіабатичними базисними станами $|n(t)\rangle$, які *залежать від часу*. Стан всієї системи $|\Psi(\mathbf{R}, t)\rangle$ можна представити як суперпозицію цих станів

$$|\Psi(\mathbf{R}, t)\rangle = \sum_n \psi_n(\mathbf{R}, t)|n(t)\rangle, \quad (5.3)$$

¹Вивід *velocity-gauge* гамільтоніану можна також знайти, наприклад, у Додатку А в статті [38]

де $\psi_n(\mathbf{R}, t)$ – ядерна хвильова функція. Використовуючи розклад (5.3) у залежному від часу рівнянні Шрьодінгера $i\partial_t|\Psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\Psi(t)\rangle$, отримаємо таке рівняння

$$i \sum_n [\partial_t \psi_n(\mathbf{R}, t)] |n(t)\rangle + i \sum_n \psi_n(\mathbf{R}, t) |\partial_t n(t)\rangle = \sum_{n'} \hat{\mathcal{H}} \psi_n(\mathbf{R}, t) |n(t)\rangle, \quad (5.4)$$

що дає

$$i\partial_t \psi_{n'}(\mathbf{R}, t) = \sum_n h_{n'n} \psi_n(\mathbf{R}, t), \quad (5.5)$$

де $h_{n'n} = \langle n'(t) | \hat{\mathcal{H}} | n(t) \rangle - i \langle n'(t) | \partial_t n(t) \rangle$. Цей результат приводить до *length-gauge* гамільтоніану [175].

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{lg}} = \hat{\mathcal{T}} + \sum_{n,n'} [i \langle n(t) | \partial_t n'(t) \rangle + U_{nn'}(t)] |n'(t)\rangle \langle n(t)|, \quad (5.6)$$

де $U_{nn'}(t) = \langle n(t) | \hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}(\mathbf{R}) | n'(t) \rangle$. Вважатимемо, що на систему не діє зовнішнє магнітне поле, а отже, електронний гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}$ дійсний і $U_{nn'}(t) = U_{n'n}(t)$.

Вважаємо, що хвильові функції ядер $\psi_n(\mathbf{R}, t)$ сильно локалізовані поблизу центру ядерного хвильового пакету $\bar{\mathbf{R}}_t(t)$. Розклад електронного гамільтоніану $\hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}$ в околицях точки $\bar{\mathbf{R}}_t$ дає

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}(\mathbf{R}) \approx \hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}(\bar{\mathbf{R}}_t) + \nabla_{\bar{\mathbf{R}}_t} \hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}(\bar{\mathbf{R}}_t) \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t), \quad (5.7)$$

де враховано доданки тільки до другого порядку. Доданки вищих порядків вважаються нехтовними у випадку сильно локалізованих ядерних станів.

Використовуючи розклади (5.7) та (5.2) разом з теоремою Геллмана-

Фейнмана [180], отримаємо для $U_{nn'}$ такий вираз

$$U_{nn'} = \delta_{nn'} [E_n(\bar{\mathbf{R}}_t) - \mathbf{F}_n(\bar{\mathbf{R}}_t) \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t)] + (1 - \delta_{nn'}) \Delta E_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t) \mathbf{A}_{nn'} \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t), \quad (5.8)$$

де величина $\mathbf{A}_{nn'}(\mathbf{R}) \equiv \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n'(\mathbf{R}) \rangle$ називається вектором неадіабатичного зв'язку, а $\mathbf{F}_n(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} E_n(\mathbf{r})$ є силою, яка діє на ядро на n -й енергетичній поверхні в точці $\mathbf{r}$. Для виведення виразу (5.8) використано співвідношення

$$\langle n(\bar{\mathbf{R}}_t) | \partial_t n'(\bar{\mathbf{R}}_t) \rangle = \partial_t \bar{\mathbf{R}}_t \cdot \langle n(\bar{\mathbf{R}}_t) | \nabla_{\bar{\mathbf{R}}_t} n'(\bar{\mathbf{R}}_t) \rangle \equiv \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{A}_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t), \quad (5.9)$$

де $\bar{\mathbf{v}} = d\bar{\mathbf{R}}_t/dt$ – швидкість центру ядерного хвильового пакету.

Підстановкою виразів (5.8) та (5.9) в гамільтоніан (5.6) отримаємо $\hat{\mathcal{H}}_{\text{lg}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}$, де діагональна частина гамільтоніану $\hat{\mathcal{H}}_0$ має такий вигляд

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{T}} + \sum_n [E_n(\bar{\mathbf{R}}_t) - \mathbf{F}_n(\bar{\mathbf{R}}_t) \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t)] |n\rangle \langle n|. \quad (5.10)$$

Недіагональна частина $\hat{\mathcal{V}}$ записується як

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{V}} &= \sum_{n,n'} [\bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{A}_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t) + \Delta E_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t) \mathbf{A}_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t) \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t)] |n'\rangle \langle n| \\ &\equiv i \sum_{n,n'} \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{A}_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t) [1 + i \Delta \mathbf{p}_{nn'} \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t)] |n'\rangle \langle n|, \end{aligned} \quad (5.11)$$

де $\Delta E_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}) = E_n(\bar{\mathbf{R}}) - E_{n'}(\bar{\mathbf{R}})$ – різниця енергій між n -ю та n' -ю поверхнями у точці $\bar{\mathbf{R}}$, $\Delta \mathbf{p}_{nn'}$ визначається як

$$\Delta \mathbf{p}_{nn'} = -\Delta E_{nn'} \mathbf{A}_{nn'} / (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}_{nn'}). \quad (5.12)$$

Надалі для скорочення запису використовуватимемо позначення $|n\rangle = |n(t)\rangle$.

Оскільки ядерні стани сильно локалізовані поблизу точки $\bar{\mathbf{R}}_t$, то виконується умова $\Delta \mathbf{p}_{nn'} \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t) \ll 1$. Отже, нижній рядок у виразі (5.11) можна апроксимувати як

$$\hat{\mathcal{V}} \approx i \sum_{n,n'} \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{A}_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t) e^{i\Delta \mathbf{p}_{nn'} \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t)} |n'\rangle \langle n|. \quad (5.13)$$

Опис взаємодії між електронними станами та ядерними ступенями вільності за допомогою гамільтоніану (5.13) більш зручний порівняно з гамільтоніаном у вигляді (5.11), як з точки зору фізичного змісту, так і з позиції використання в обчисленнях. Якщо вважати ядерну хвильову функцію гауссовою, що є широко використовуваним представленням, то дія гамільтоніану (5.13) на ядерний стан породжує новий стан, який також є гауссовим, однак має новий імпульс та амплітуду. Тоді як гамільтоніан (5.11) перетворює гауссову хвильову функцію на поліном Ерміта першого порядку. Якщо гамільтоніан (5.13) діє на гауссовий стан двічі, то хвильовий пакет зберігає форму, а змінюється лише його амплітуда. Подвійне ж застосування гамільтоніану (5.11) до гауссового стану породжує суперпозицію поліномів Ерміта першого та другого порядків. Така форма хвильової функції не має прямих класичних аналогів, на відміну від гауссового хвильового пакету, який відповідає напівкласичній частинці сильно локалізованій поблизу її середніх (класичних) координати та імпульсу. Отже, гамільтоніан взаємодії в рівнянні (5.13) залишає «класичність» ядра, що є корисною властивістю як для фізичної інтерпретації, так і для числового моделювання. Застосування гамільтоніану у вигляді (5.11) потребує розширеного базису поліномів Ерміта, який експоненційно зростає з кількістю ядерних ступенів вільності.

Використовуючи наближення (5.13) приходимо до *momentum-jump* га-

мільтоніану [175]:

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathcal{H}}_{\text{mj}} &\equiv \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}} \\
 &= \hat{\mathcal{T}} + \sum_n [E_n(\bar{\mathbf{R}}_t) - \mathbf{F}(\bar{\mathbf{R}}_t) \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t)] |n\rangle\langle n| \\
 &\quad + i \sum_{n,n'} \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{A}_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t) e^{i\Delta\mathbf{p}_{nn'} \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t)} |n'\rangle\langle n|.
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

Саме цей ефективний молекулярний гамільтоніан використовуватиметься у подальшому розгляді.

5.3 Рівняння еволюції населеностей адіабатичних станів

Виведемо рівняння еволюції населеностей електронних адіабатичних рівнів. З метою спрощення розгляду, вважатимемо, що в певній ділянці простору є перетин лише двох енергетичних поверхонь. Така ситуація є доволі типовою для більшості молекулярних систем.

Еволюція матриці густини $\hat{\rho}(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$, що описує ядерні стани, описується рівнянням фон Неймана $i\partial_t\hat{\rho} = [\hat{\mathcal{H}}_{\text{mj}}, \hat{\rho}]$. Введемо оператор густини $\hat{\rho}$ у представленні взаємодії $\hat{\rho}(t) = \hat{\mathcal{U}}(t, 0)\hat{\rho}(t)\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t, 0)$. Оператор $\hat{\mathcal{U}}(t, \tau)$ має вигляд $\hat{\mathcal{U}}(t, \tau) = \hat{T} \exp \left[-i \int_\tau^t dt' \hat{\mathcal{H}}_0(t') \right]$, де $\hat{T}$ – операція часового впорядкування, $\hat{\mathcal{H}}_0$ – діагональна частина гамільтоніану $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mj}}$ у підпросторі електронних станів $|n\rangle$,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{mj}} \equiv \sum_n H_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n \neq n'} V_{nn'} |n\rangle\langle n'|, \tag{5.15a}$$

$$H_n \equiv \hat{\mathcal{T}} + E_n(\bar{\mathbf{R}}_t) - \mathbf{F}_n(\bar{\mathbf{R}}_t) \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t), \tag{5.15б}$$

$$V_{nn'} \equiv i\bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{A}_{nn'}(\bar{\mathbf{R}}_t) e^{i\Delta\mathbf{p}_{nn'} \cdot (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t)}. \tag{5.15в}$$

Зауважимо, що в рівняннях (5.15) H_n та $V_{nn'}$ є залежними від часу операторами, які діють *виключно* на ядерні змінні.

Рівняння еволюції діагональних елементів матриці густини ($\varrho_{nn'} \equiv \langle n | \hat{\varrho} | n' \rangle$) записуються як

$$i\partial_t \varrho_{11}(t) = \mathcal{U}_1^\dagger(t, 0) V_{12}(t) \mathcal{U}_2(t, 0) \varrho_{21}(t) - \varrho_{12}(t) \mathcal{U}_2^\dagger(t, 0) V_{21}(t) \mathcal{U}_1(t, 0), \quad (5.16a)$$

$$i\partial_t \varrho_{22}(t) = \mathcal{U}_2^\dagger(t, 0) V_{21}(t) \mathcal{U}_1(t, 0) \varrho_{12}(t) - \varrho_{21}(t) \mathcal{U}_1^\dagger(t, 0) V_{12}(t) \mathcal{U}_2(t, 0), \quad (5.16b)$$

де ми визначили оператор еволюції $\mathcal{U}_n(t, \tau) = \hat{T} \exp \left[-i \int_\tau^t dt' H_n(t') \right]$, який діє тільки на ядерні ступені вільності.

Аналогічно, недіагональні елементи матриці густини описуються такими рівняннями руху

$$i\partial_t \varrho_{12}(t) = \mathcal{U}_1^\dagger(t, 0) V_{12}(t) \mathcal{U}_2(t, 0) \varrho_{22}(t) - \varrho_{11}(t) \mathcal{U}_1^\dagger(t, 0) V_{12}(t) \mathcal{U}_2(t, 0). \quad (5.17)$$

Рівняння еволюції для ϱ_{21} отримується ермітовим спряженням рівняння вище. Зауважимо також, що матричні елементи $\varrho_{nn'}$ все ще є операторами, які діють у підпросторі ядерних ступенів вільності.

Населеності адіабатичних електронних станів виражаються як

$$\mathcal{P}_n(t) = \text{Tr}[\rho_{nn}(t)] = \text{Tr}[\varrho_{nn}(t)], \quad (5.18)$$

де слід береться по всім ядерним ступеням вільності. Підстановкою формального розв'язку рівняння (5.17) для ϱ_{12} та ϱ_{21} , де вважаємо, що $\varrho_{12}(0) = \varrho_{21}(0) = 0$, в рівняння (5.16a), отримаємо такий результат

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}}_1(t) = & -2 \int_0^t d\tau \text{Re} \left\{ \text{Tr} [\mathcal{U}_1^\dagger(t, \tau) V_{12}(t) \mathcal{U}_2(t, \tau) V_{21}(\tau) \rho_{11}(\tau)] \right. \\ & \left. - \text{Tr} [V_{21}(\tau) \mathcal{U}_1^\dagger(t, \tau) V_{12}(\tau) \mathcal{U}_2(t, \tau) \rho_{22}(\tau)] \right\}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

де ми використали властивість циклічної перестановки операторів під зна-

ком сліду. Рівняння руху для $\mathcal{P}_2(t)$ виводиться аналогічним чином.

Використовуючи, що $\text{Tr}[O\rho_{nn}(t)] = \langle \Psi_n(t)|O|\Psi_n(t)\rangle$, де O означає деякий квантовий оператор, що діє на ядерні ступені вільності, а $|\Psi_n(t)\rangle$ – квантовий стан ядерної підсистеми, пов’язаний з електронним станом $|n\rangle$, рівняння (5.19) набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}}_1 = & 2d_{12}(t) \int_0^t d\tau d_{12}(\tau) \\ & \times \text{Re} \left\{ \langle \Psi_1(\tau) | \mathcal{U}_1^\dagger(t, \tau) e^{i\Delta\mathbf{p}_{12}(t) \cdot [\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t]} \mathcal{U}_2(t, \tau) e^{i\Delta\mathbf{p}_{21}(\tau) \cdot [\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_\tau]} | \Psi_1(\tau) \rangle \right. \\ & \left. - \langle \Psi_2(\tau) | e^{i\Delta\mathbf{p}_{21}(\tau) \cdot [\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_\tau]} \mathcal{U}_1^\dagger(t, \tau) e^{i\Delta\mathbf{p}_{12}(t) \cdot [\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}_t]} \mathcal{U}_2(t, \tau) | \Psi_2(\tau) \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

де $d_{12}(t) \equiv \bar{\mathbf{v}}(t) \cdot \mathbf{A}_{12}(\bar{\mathbf{R}}_t)$. Для виведення рівняння (5.20) використовувалися вираз (5.15) та властивість $\mathbf{A}_{nn'} = -\mathbf{A}_{n'n}$.

5.3.1 Гауссове наближення

Для спрощення теоретичного розгляду далі вивчатимемо одновимірний випадок. Представимо хвильову функцію ядерної підсистеми, пов’язану з адіабатичним електронним станом $|n\rangle$, як

$$|\Psi_n(t)\rangle = C_n(t) |g_n(\bar{\mathbf{R}}, \bar{\mathbf{p}}; t)\rangle, \quad (5.21)$$

де $|g_n(\bar{\mathbf{R}}, \bar{\mathbf{p}}; t)\rangle$ позначає нормований гауссовий стан, який у координатному представленні записується як

$$g_n(\bar{\mathbf{R}}, \bar{\mathbf{p}}; R, t) = \exp \left[i\alpha_{n,t} [R - \bar{R}_t]^2 + i\bar{p}_t [R - \bar{R}_t] + i\gamma_{n,t} \right]. \quad (5.22)$$

Гауссовий хвильовий пакет $g_n(\bar{\mathbf{R}}, \bar{\mathbf{p}}; R, t)$ локалізується поблизу координати $\bar{R}_t$ та поширюється вздовж n -ї поверхні з середнім імпульсом $\bar{p}_t$. Середній

імпульс $\bar{p}_t$ та середня координата $\bar{R}_t$ хвильового пакету описуються ньютонівськими рівняннями руху.

Комплексні параметри $\alpha_{n,t}$ та $\gamma_{n,t}$ еволюціонують згідно рівнянь Геллера [181]

$$\dot{\alpha}_{n,t} = -\frac{2}{M}\alpha_t^2 - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E_n(R)}{\partial R^2}\Big|_{R=\bar{R}_t}. \quad (5.23a)$$

$$\dot{\gamma}_{n,t} = \frac{i}{M}\alpha_{n,t} + \frac{\bar{p}_t^2}{2M} - E_n(\bar{R}_t). \quad (5.23b)$$

Ми нехтуємо другим доданком у правій частині рівняння (5.23a) через припущення про сильну локалізацію хвильового пакету, яке є центральним у виведенні *momentum-jump* гамільтоніану $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mj}}$. Розв'язок цього рівняння має такий вигляд

$$\alpha_{n,t} \equiv \alpha_t = \frac{\alpha_0}{2\alpha_0 M^{-1}t + 1}, \quad \alpha_0 = \frac{i}{2\sigma^2}, \quad (5.24)$$

що відповідає випадку вільного поширення хвильового пакету. Розв'язок рівняння (5.23b) має такий вигляд [181]:

$$\gamma_{n,t} = \gamma_0 + \frac{i}{2} \ln \left(\frac{2}{M} \alpha_0 t + 1 \right) + \mathcal{S}_n(t, 0), \quad (5.25)$$

де $\gamma_0 = i \ln(2\alpha_0/\pi)/4$. Змінна $\mathcal{S}_n(t, 0)$ визначається як

$$\mathcal{S}_n(t, 0) = \int_0^t du \left[\frac{\bar{p}^2(u)}{2M} - E_n(\bar{R}(u)) \right] \quad (5.26)$$

та відповідає класичній дії хвильового пакету протягом часу t .

Використовуючи гауссовий анзатц (5.21) у рівнянні руху (5.20) та враховуючи, що $\mathcal{P}_n(t) \equiv |C_n(t)|^2$, отримаємо систему рівнянь, які описують

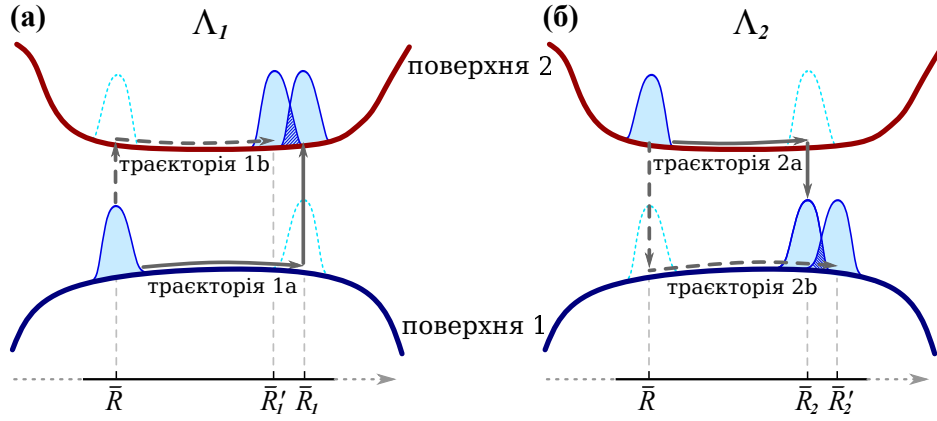


Рис. 5.1. Графічне представлення траєкторій, які дають внесок у корелятори (а) $\Lambda_1(t; \tau)$ та (б) $\Lambda_2(t; \tau)$.

еволюцію населеностей адіабатичних станів:

$$\dot{\mathcal{P}}_1(t) = \int_0^t d\tau \operatorname{Re} [Q_2(t; \tau) \mathcal{P}_2(\tau) - Q_1(t; \tau) \mathcal{P}_1(\tau)], \quad (5.27a)$$

$$\dot{\mathcal{P}}_2(t) = \int_0^t d\tau \operatorname{Re} [Q_1(t; \tau) \mathcal{P}_1(\tau) - Q_2(t; \tau) \mathcal{P}_2(\tau)], \quad (5.27b)$$

де $Q_1(t; \tau)$ та $Q_2(t; \tau)$ визначаються як

$$Q_1(t; \tau) = 2d_{12}(t)d_{12}(\tau)\Lambda_1(t; \tau), \quad (5.28a)$$

$$Q_2(t; \tau) = 2d_{12}(t)d_{12}(\tau)\Lambda_2(t; \tau). \quad (5.28b)$$

Функції $\Lambda_{1,2}(t; \tau)$ мають такий вигляд

$$\Lambda_1(t; \tau) = \langle g_1(\bar{R}, \bar{p}; \tau) | \overbrace{\mathcal{U}_1^\dagger(t, \tau) e^{i\Delta p_{12}(t)[R - \bar{R}_1(t)]}}^{\text{траєкторія 1a}} \overbrace{\mathcal{U}_2(t, \tau) e^{i\Delta p_{21}(\tau)[R - \bar{R}_\tau]}}^{\text{траєкторія 1б}} | g_1(\bar{R}, \bar{p}; \tau) \rangle, \quad (5.29a)$$

$$\Lambda_2(t; \tau) = \langle g_2(\bar{R}, \bar{p}; \tau) | \overbrace{e^{i\Delta p_{21}(\tau)[R - \bar{R}_\tau]} \mathcal{U}_1^\dagger(t, \tau)}^{\text{траєкторія 2б}} \overbrace{e^{i\Delta p_{12}(t)[R - \bar{R}'_2(t)]} \mathcal{U}_2(t, \tau)}^{\text{траєкторія 2a}} | g_2(\bar{R}, \bar{p}; \tau) \rangle, \quad (5.29b)$$

де $\bar{R}_1(\tau) \& \bar{R}'_2(\tau) \equiv \bar{R}_\tau$. Використовуюючи представлення (5.22), рівняння (5.29) набуває такого вигляду

$$\Lambda_1(t; \tau) = \langle g_2(\bar{R}_1, \bar{p}_1; t; \tau) | g_2(\bar{R}'_1, \bar{p}'_1; t; \tau) \rangle, \quad (5.30a)$$

$$\Lambda_2(t; \tau) = \langle g_1(\bar{R}_2, \bar{p}_2; t; \tau) | g_1(\bar{R}'_2, \bar{p}'_2; t; \tau) \rangle, \quad (5.30b)$$

що відповідає перекриттю пари гауссових хвильових пакетів. Для $\Lambda_1(t; \tau)$ ці хвильові пакети є результатом поширення гауссових хвильових пакетів (з імпульсом $\bar{p}$ та координатою $\bar{R}$), які в момент часу τ знаходяться на поверхні 1, по двом різним траєкторіям (1а та 1б). Схематичне представлення цих траєкторій показано на Рис. 5.1(a). Траєкторія 1а відповідає поширенню хвильового пакету вздовж поверхні 1 від точки $\bar{R}(\tau)$ до точки $\bar{R}_1(t)$ та стрибку на поверхню 2 в момент часу t . Через цей стрибок, імпульс в кінці цієї траєкторії змінюється на величину $\Delta p_{12}(t)$. Траєкторією 1б є стрибок з енергетичної поверхні 1 на поверхню 2 в момент часу τ та подальший рух поверхнею 2 від точки $\bar{R}(\tau)$ до точки $\bar{R}'_1(t)$ впродовж часового інтервалу $[\tau, t]$. Важливо зазначити, що після стрибка хвильовий пакет змінює імпульс на величину $\Delta p_{12}(\tau)$

Аналогічно, для $\Lambda_2(t; \tau)$ маємо справу з перекриттям хвильових пакетів утворених в результаті поширення гауссового хвильового пакету, який в момент τ знаходився на поверхні 2, по двом траєкторіям 2а та 2б, як показано на Рис. 5.1(б). Траєкторія 2а утворюється відрізком, який відповідає поширенню поверхнею 2 впродовж інтервалу $[\tau, t]$ від точки $\bar{R}(\tau)$ до $\bar{R}_2(t)$, та стрибком на поверхню 1 в момент часу t . Імпульс хвильового пакету змінюється на $\Delta p_{21}(t)$ в кінці траєкторії 2а. Траєкторія 2б відповідає стрибку з енергетичної поверхні 2 на поверхню 1 в момент часу τ та поширенню вздовж поверхні 1 від точки $\bar{R}(\tau)$ до точки $\bar{R}'_2(t)$.

Використовуючи анзатц (5.22) разом з рівняннями (5.24), (5.25) та (5.26)

в рівнянні (5.30), отримаємо такі вирази

$$\begin{aligned} \Lambda_1(t; \tau) = & \exp[-i\varphi_{12}(t; \tau)] \\ & \times \exp \left[-\frac{1}{4\sigma^2} \left(\bar{R}_1(t) - \bar{R}'_1(t) - (t - \tau) \frac{(\bar{P}_1(t) - \bar{P}'_1(t))}{M} \right)^2 \right. \\ & \left. - \frac{\sigma^2}{4} (\bar{P}_1(t) - \bar{P}'_1(t))^2 \right], \end{aligned} \quad (5.31a)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_2(t; \tau) = & \exp[-i\varphi_{21}(t; \tau)] \\ & \times \exp \left[-\frac{1}{4\sigma^2} \left(\bar{R}_2(t) - \bar{R}'_2(t) - (t - \tau) \frac{(\bar{P}_1(t) - \bar{P}'_1(t))}{M} \right)^2 \right. \\ & \left. - \frac{\sigma^2}{4} (\bar{P}_2(t) - \bar{P}'_2(t))^2 \right], \end{aligned} \quad (5.31b)$$

де $\bar{P}_1(t)$, $\bar{P}'_1(t)$, $\bar{P}_2(t)$ та $\bar{P}'_2(t)$ є імпульсами в кінцевих точках траєкторій 1а, 1б, 2а та 2б, відповідно.

Фази $\varphi_{12}(t; \tau)$ та $\varphi_{21}(t; \tau)$ в рівняннях (5.31) виражаються як

$$\begin{aligned} \varphi_{12}(t; \tau) = & \int_{\tau}^t du \left[\frac{\bar{p}_{1a}^2(u)}{2M} - E_1(\bar{R}_{1a}(u)) \right] - \int_{\tau}^t du \left[\frac{\bar{p}_{1b}^2(u)}{2M} - E_2(\bar{R}_{1b}(u)) \right] \\ & - \frac{1}{2} [\bar{P}_1(t) + \bar{P}'_1(t)] [\bar{R}_1(t) - \bar{R}'_1(t)], \end{aligned} \quad (5.32a)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{21}(t; \tau) = & \int_{\tau}^t du \left[\frac{\bar{p}_{2a}^2(u)}{2M} - E_2(\bar{R}_{2a}(u)) \right] - \int_{\tau}^t du \left[\frac{\bar{p}_{2b}^2(u)}{2M} - E_1(\bar{R}_{2b}(u)) \right] \\ & - \frac{1}{2} [\bar{P}_2(t) + \bar{P}'_2(t)] [\bar{R}_2(t) - \bar{R}'_2(t)], \end{aligned} \quad (5.32b)$$

Зауважимо декілька аспектів, які стосуються рівнянь (5.32). Середні значення координати та імпульсу хвильового пакету змінюються відповідно до класичних рівнянь руху з гамільтоніаном $\hat{H}_n$ у виразі (5.15). Цей

гамільтоніан параметрично залежить від координати $\bar{R}_n$, навколо якої розкладається електронний гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}_{\text{el}}(R)$ для виводу *momentum-jump* гамільтоніану (5.14). Зауважимо, що стани $|g(\bar{R}_1, \bar{p}_1; t)\rangle$ та $|g_2(\bar{R}_2, \bar{p}_2; t)\rangle$ є різними, а отже, точки $\bar{R}_1$ та $\bar{R}_2$ також відрізняються. Хоча вибір цих точок є довільним², найбільш зручним підходом буде обрати $\bar{R}_1$, яка збігається або з $\bar{R}_{1a}$, або ж із $\bar{R}_{1b}$. Ми обираємо $\bar{R}_1 = \bar{R}_{1a}$, аналогічно, також обираємо $\bar{R}_2 = \bar{R}_{2a}$. На перший погляд, може здатись, що потенційні енергії E_2 для траєкторій 1б та 2б мають обчислюватись у точках $\bar{R}_{1a}(u)$ та $\bar{R}_{2a}(u)$, а не $\bar{R}_{1b}(u)$ та $\bar{R}_{2b}(u)$. Однак, це не так. Ефективні гамільтоніани, наприклад, гамільтоніан (5.15), пов'язані з цими траєкторіями містять додаткові залежні від часу c -числові доданки $F_2(\bar{R}_{1a}(u))(\bar{R}_{1a}(u) - \bar{R}_{1b}(u))$ та $F_2(\bar{R}_{2a}(u))(\bar{R}_{2a}(u) - \bar{R}_{2b}(u))$, які виникають через те, що енергії та сили обчислюються в точках $\bar{R}_{1a}(u)$ та $\bar{R}_{2a}(u)$, відповідно. Ці доданки, комбінуючись із $E_2(\bar{R}_{1a}(u))$ та $E_2(\bar{R}_{2a}(u))$, призводять до зсуву останніх до $E_2(\bar{R}_{1b}(u))$ та $E_2(\bar{R}_{2b}(u))$, відповідно. Цей зсув враховується в рівняннях (5.32). Далі, використовуючи такі співвідношення³

$$\bar{R}_{1a}(\tau) = \bar{R}_{1b}(\tau), \quad \bar{R}_{1a}(t) = \bar{R}_1(t), \quad \bar{R}_{1b}(t) = \bar{R}'_1(t), \quad (5.33a)$$

$$\bar{p}_{1a}(t) + \Delta p_{12}(t) = \bar{P}_1(t), \quad \bar{p}_{1b}(t) = \bar{P}'_1(t), \quad (5.33b)$$

ми інтегруємо доданки з кінетичною енергією частинами. Доданки у граничних точках частково скорочують останній доданок в обох виразах в (5.32), що залишає в правій частині виразу для $\varphi_{12}(t; \tau)$ доданок такого виду $\Delta p_{12}(\bar{R}_1(t))[\bar{R}_1(t) - \bar{R}'_1(t)]/2$. Для $\varphi_{21}(t; \tau)$ вираз аналогічний, з тією різницею, що індекси 1 та 2 переставлені місцями. Для інтегралу, що

²Обмеження полягає лише в тому, щоб розклад (5.7) залишався досить точним.

³Співвідношення для координат та імпульсів для траєкторій 2а та 2б є аналогічними

залишився у виразі для $\varphi_{12}(t; \tau)$, маємо

$$\begin{aligned} & \int_{\tau}^t du (\dot{\bar{p}}_{1a}(u) + \dot{\bar{p}}_{1b}(u)) \frac{(\bar{R}_{1a}(u) - \bar{R}_{1b}(u))}{2} \\ &= \int_{\tau}^t du (F_1(\bar{R}_{1a}(u)) + F_2(\bar{R}_{2a}(u))) \frac{(\bar{R}_{1a}(u) - \bar{R}_{1b}(u))}{2}, \end{aligned}$$

де використано те, що середні координати та імпульси описуються ньютонівськими рівняннями руху. Поєднуючи останній вираз із інтегралами по потенційним енергіям у рівнянні (5.32), отримуємо такий результат

$$\varphi_{12}(t; \tau) = \int_{\tau}^t du \Delta E_{12}(R_{c1}(u)) - \frac{\Delta p_{12}(\bar{R}_1(t)) \Delta R_1(t)}{2}, \quad (5.34a)$$

$$\varphi_{21}(t; \tau) = \int_{\tau}^t du \Delta E_{21}(R_{c2}(u)) - \frac{\Delta p_{21}(\bar{R}_2(t)) \Delta R_2(t)}{2}, \quad (5.34b)$$

де введені такі позначення:

$$\begin{aligned} \Delta R_n(t) &= \bar{R}_n(t) - \bar{R}'_n(t), \\ R_{cn} &= (\bar{R}_{na} + \bar{R}_{nb})/2, \\ \Delta E_{nn'}(R) &= E_n(R) - E_{n'}(R), \quad n, n' \in \{1, 2\}. \end{aligned}$$

Для різниці імпульсів на кінцях траєкторій, ми використовуємо таке наближення

$$\bar{P}_n(t) - \bar{P}'_n(t) \approx 0, \quad (5.35)$$

яке добре виконується лише у випадку досить плоских енергетичних по-

верхонь. Отримуємо такий вираз для $\Lambda_{12}(t, \tau)$:

$$\Lambda_{12}(t, \tau) \approx \exp \left\{ -\frac{\Delta R_1^2(t)}{4\sigma^2} \right\} \exp [i\phi_{12}(t; \tau)] , \quad (5.36)$$

де ϕ_{12} описується рівнянням (5.34). Вираз для Λ_{21} аналогічний:

$$\Lambda_{21}(t, \tau) \approx \exp \left\{ -\frac{\Delta R_2^2(t)}{4\sigma^2} \right\} \exp [i\phi_{21}(t; \tau)] . \quad (5.37)$$

Надалі вважатимемо, що $R_{c2} = R_{c1} \equiv R_c$ та $\Delta R_2 = -\Delta R_1 \equiv \Delta R$. У напівкласичній границі та для відносно малих областей неадіабатичного зв'язку, траєкторії 1б та 2а (так само як і 1а та 2б), показані на Рис. 5.1, є близькими одна до одної, окрім кінцевих точок при τ та t . Це є наслідком *принципу Франка-Кондона* [182], згідно якого поблизу перетину рівнів координати та імпульси ядерних станів $\Psi_1(\tau)$ та $\Psi_2(\tau)$ (чи хвильових пакетів $|g_1\rangle$ та $|g_2\rangle$) мають бути однаковими. Отже, можна записати такі рівняння руху населеностей електронних рівнів у такому вигляді

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}}_1(t) = & -2d_{12}(t) \int_0^t d\tau d_{12}(\tau) \mathcal{D}(t; \tau) \\ & \times \{ \cos [\varphi_{12}(t; \tau)] \mathcal{P}_1(\tau) - \cos [\varphi_{21}(t; \tau)] \mathcal{P}_2(\tau) \} , \end{aligned} \quad (5.38a)$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}}_2(t) = & -2d_{12}(t) \int_0^t d\tau d_{12}(\tau) \mathcal{D}(t; \tau) \\ & \times \{ \cos [\varphi_{21}(t; \tau)] \mathcal{P}_2(\tau) - \cos [\varphi_{12}(t; \tau)] \mathcal{P}_1(\tau) \} , \end{aligned} \quad (5.38b)$$

де

$$\mathcal{D}(t; \tau) = \exp \left\{ -\frac{[R_r(t) - R_v(t, \tau)]^2}{4\sigma^2} \right\} , \quad (5.39)$$

$$\varphi_{nn'}(t; \tau) = \int_\tau^t du \Delta E_{nn'}(R_c(u)) - \frac{\Delta p_{12}(R_c(t)) [R_r(t) - R_v(t, \tau)]}{2} , \quad (5.40)$$

та $R_c(t) = (R_r(t) + R_v(t, \tau))/2$. З цього моменту, індекси r та v означають «реальну» 1а (2б) та «віртуальну» 1б (2а) траєкторії, відповідно. Зазначимо також, що в рівнянні (5.40) Δp_{12} обчислюється в середній точці R_c , що є в межах точності ефективного гамільтоніану (5.14). Гауссова функція $\mathcal{D}(t; \tau)$ в рівняннях (5.38а) та (5.38б) описує ефективне пригнічення неадіабатичного зв'язку через зменшення перекриття хвильових пакетів.

Підкреслимо, що траєкторія $R_v(t)$ складається з двох відрізків. Перший відрізок $R_v(0, \tau)$ є частиною траєкторії, де віртуальний та реальний хвильові пакети збігаються, тобто $R_v(0, \tau) = R_r(\tau)$, при $\tau < t$. На другому відрізку траєкторії $R_v(\tau, t)$, після стрибка на іншу енергетичну поверхню, хвильовий пакет поширюється новою поверхнею до моменту часу t , тобто $R_v(t) = R_r(\tau) + R_v(\tau, t)$. У загальному випадку, точне обчислення траєкторії $R_v(t, \tau)$ є задачею, яка вимагає суттєвих обчислювальних ресурсів.

У граничному випадку *сильної декогеренції*, коли перша експонента в рівнянні (5.36) швидко спадає при $\tau \neq t$, можна скористатись такою оцінкою

$$R_r(t) - R_v(t, \tau) \approx \frac{\Delta p_{12}(R_c(t))}{M} (t - \tau). \quad (5.41)$$

Ця оцінка буде використана для виводу рівнянь на швидкості переходів.

Для випадку квантової *когерентної* динаміки скористаємось іншим наближенням

$$R_r(t) - R_v(t, \tau) \approx R_r(t) - R_v(t, 0). \quad (5.42)$$

Це наближення означає, що віртуальний хвильовий пакет створюється при $t = 0$, тобто в той момент, коли реальний хвильовий пакет досягає області, в якій неадіабатичний зв'язок між рівнями є досить сильним. Рівняння (5.42) добре працює, коли розміри цієї області та відстань між рівнями у цій області є малими, а імпульс реального хвильового пакету є таким, що імпульси реального та віртуального пакетів не сильно відрізняються. У підрозділі 5.6 ми опишемо *surface-hopping* алгоритм для моделювання

неадіабатичної динаміки в молекулярних системах, який ґрунтується на цьому припущенні, тобто виразі (5.42).

5.4 Детальний баланс

Якщо число ядерних ступенів вільності зв'язаних з переходом досить велике, можна очікувати, що експонента у виразах (5.38a)-(5.38б) достатньо велика при малих $t - \tau$. Отже, можна застосувати оцінку (5.41), що дає

$$\mathcal{D}(t; \tau) \simeq \exp \left[-\frac{\Delta \mathbf{p}_{12}^2 (t - \tau)^2}{4M^2 \sigma^2} \right] \equiv \exp \left[-\frac{(t - \tau)^2}{\tau_{\text{dec}}^2} \right], \quad (5.43)$$

де $\tau_{\text{dec}}(t) \equiv 2M\sigma(t)/|\Delta \mathbf{p}_{12}(t)|$. Параметр τ_{dec} – це час, за який стани ядер стають майже ортогональними.

Коли час декогеренції τ_{dec} достатньо малий, можна замінити τ на t у рівняннях (5.38a) та (5.38б) для населеностей $\mathcal{P}_1(\tau)$ та $\mathcal{P}_2(\tau)$. Після такої заміни ці рівняння стають звичайними диференціальними (кінетичними) рівняннями

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}}_1(t) &\approx \Gamma_{21}(t)\mathcal{P}_2(t) - \Gamma_{12}(t)\mathcal{P}_1(t), \\ \dot{\mathcal{P}}_2(t) &\approx \Gamma_{12}(t)\mathcal{P}_1(t) - \Gamma_{21}(t)\mathcal{P}_2(t). \end{aligned} \quad (5.44)$$

Швидкості переходів $\Gamma_{12}(t)$ та $\Gamma_{21}(t)$ задаються як

$$\Gamma_{nn'}(t) = 2d_{12}^2(t) \int_{-\infty}^t d\tau \cos [\mathcal{E}_{nn'}(t)(t - \tau)] \exp \left[-\frac{(t - \tau)^2}{\tau_{\text{dec}}^2} \right], \quad (5.45)$$

де нижня границя інтегрування подовжена до $-\infty$, що є виправданим наближенням у випадку сильної декогеренції, тобто коли $t \gg \tau_{\text{dec}}$. В рівнянні (5.45) $\mathcal{E}_{nn'}(t)$ записується як $\mathcal{E}_{nn'}(t) = \Delta E_{nn'}(t) - \Delta \mathbf{p}_{12}^2(t)/(2M)$. Обчислення

гауссового інтегралу в (5.45) дає такий результат

$$\Gamma_{nn'}(t) \approx \sqrt{\pi} \tau_{\text{dec}} d_{12}^2(t) \exp \left[-\frac{1}{4} \mathcal{E}_{nn'}^2(t) \tau_{\text{dec}}^2 \right]. \quad (5.46)$$

Обчислимо відношення швидкостей переходів з нижнього рівня на верхній та навпаки Γ_{12}/Γ_{21} . З рівняння (5.46) випливає такий результат

$$\frac{\Gamma_{12}(t)}{\Gamma_{21}(t)} = \exp \left[-\frac{\Delta \mathbf{p}_{12}^2(t)}{2M} \Delta E_{12}(t) \tau_{\text{dec}}^2(t) \right] = \exp \left[-2M\sigma^2 \Delta E_{12}(t) \right]. \quad (5.47)$$

Рівняння (5.47), по суті, є умовою детального балансу. Для того, щоб це побачити, згадаємо, що величина $\sigma\sqrt{2} = 1/\sqrt{\langle p_\alpha^2 \rangle - \langle p_\alpha \rangle^2}$. Якщо ядра знаходяться у локальній рівновазі, то середнє значення імпульсу дорівнює нулю, а отже, можна записати $1/(2\sigma^2) = \langle p_\alpha^2 \rangle = MT$, де T – температура ядер. Остання рівність виникає завдяки умові рівнорозподілу. Отже, приходимо до виразу $\Gamma_{12}^{\text{eq}}/\Gamma_{21}^{\text{eq}} = \exp(-\Delta E_{12}/T)$, що є звичайною умовою детального балансу. Зазначимо, що детальний баланс виникає як наслідок фазового зсуву $\Delta p_{12} \Delta R/2$ в рівнянні (5.40).

5.5 Динаміка ядер

Середнє значення оператора координати ядра змінюється з часом як

$$\partial_t \langle \hat{R}(t) \rangle = -i \langle [\hat{R}(t), \hat{\mathcal{H}}_{\text{mj}}] \rangle = \frac{\langle \hat{p}(t) \rangle}{M}. \quad (5.48)$$

Рівняння руху оператора імпульсу ядра записується як

$$\partial_t \hat{p}(t) = \sum_{n=1}^2 F_n(R(t)) |n\rangle \langle n| + i \Delta p_{12}(\bar{R}_t) \left[\hat{V}_{12}(t) - \hat{V}_{21}(t) \right]. \quad (5.49)$$

Усереднення цього рівняння по ядерному стану (5.21) дає таке рівняння

$$\partial_t \langle \hat{p}(t) \rangle = \sum_{n=1}^2 F_n(R(t)) \mathcal{P}_n(t) + i\Delta p_{12}(\bar{R}_t) \dot{\mathcal{P}}_1(t). \quad (5.50)$$

Рівняння (5.50) можна інтерпретувати як «усереднене» рівняння руху так званої *surface hopping* динаміки [177], де ядра, що рухаються вздовж однієї енергетичної поверхні можуть миттєво та випадково перестрибнути на іншу поверхню з ймовірністю, яка визначається рівняннями (5.38a) та (5.386). Щоб це продемонструвати, введемо випадкову дискретну змінну Σ , яка може приймати значення 0 або 1. Перемикання між цими величинами може відбуватись у випадкові моменти часу $t_1, t_2, \dots$. Також вважаємо, що частота перемикання змінної $\Sigma(t)$ визначається рівняннями (5.38a) та (5.386), а отже, населеності адіабатичних рівнів $\mathcal{P}_1(t)$ та $\mathcal{P}_2(t) = 1 - \mathcal{P}_1(t)$ відповідають ймовірностям того, що Σ дорівнює 1 чи 0, відповідно. Таким чином, маємо співвідношення $\langle \Sigma(t) \rangle = \mathcal{P}_1(t)$. Можна виписати *стохастичне* рівняння руху для імпульсів ядер у вигляді:

$$\partial_t \hat{p}(t) = F_1(R(t))\Sigma(t) + F_2(R(t))[1 - \Sigma(t)] + i\Delta p_{12}(t)\dot{\Sigma}(t). \quad (5.51)$$

Перші два доданки в правій частині (5.51) описують сили, що діють на ядра залежно від стану електронів. Третій доданок описує стрибки поверхні. Оскільки $\Sigma(t)$ в рівнянні (5.51) змінюється стрибкоподібно, то імпульс ядра змінюється переривчасто на величину $\pm \Delta p_{12}(t)$ в довільні моменти часу $t_1, t_2, \dots$, що відповідає стрибкам між енергетичними поверхнями. Зауважимо, що величина Δp_{12} є такою, що при стрибку енергія ядра приблизно зберігається. Після усереднення рівняння (5.51) перетворюється на (5.50). Отже, стохастичні стрибки, що описуються рівнянням (5.51), у середньому відповідають еволюції середнього значення імпульсу ядра (5.50). Варто підкреслити, що такий підхід працює лише у адіабатичному базисі.

У довільному (наприклад, діабатичному) базисі останній доданок в рівнянні руху (5.50) буде іншим, а отже, опис рівняння (5.51) в термінах стрибків поверхні стане некоректним.

5.6 Алгоритм

У попередньому розділі ми вивели рівняння руху ймовірностей заповнення електронних рівнів та ядерних координат. Рівняння руху ймовірностей заповнення електронних рівнів істотно спрощуються, коли працює марківське наближення. У такому випадку, ці рівняння стають рівняннями на швидкості переходів (*rate equations*). Границі застосовності марківської динаміки обмежені випадком сильної декогеренції, тобто коли багато ступенів вільності зв'язані з електронними переходами і час декогеренції τ_{dec} є малим. Такий режим не реалізується, наприклад, у молекулах лише з декількома атомами. В таких молекулах ефекти декогеренції помірні, а отже, необхідно розв'язувати загальні рівняння (5.38a) (5.386). У випадку вузької області неадіабатичного зв'язку, можна скористатись наближенням (5.42), що істотно спрощує обчислення.

Оскільки в реалістичних ситуаціях зазвичай мають справу з більше ніж двома енергетичними поверхнями, підкреслимо, що застосовність описаного нижче чисельного підходу не обмежується випадком лише двох поверхонь. Досить часто в молекулах неадіабатична динаміка обмежена досить вузькими та добре розділеними областями перетинів електронних рівнів. Рівняння руху (5.38a) та (5.386) добре описують динаміку якраз в таких областях. Після проходження області, де електронні рівні перетинаються і мають враховуватись неадіабатичні ефекти, ядра можуть описуватись наближенням Борна-Оппенгаймера до тих пір, поки вони не ввійдуть у іншу (або ж ту саму) область перетину електронних рівнів.

Для моделювання ядерної динаміки, яка описується рівняннями руху

(5.38a), (5.38б) та (5.49), (5.51), ми використовуємо модифікований алгоритм *FSSH* [177]. Кроки алгоритму такі:

1. Ядерний хвильовий пакет (який ми називаємо «реальним») розміщується на енергетичній поверхні n_0 у точці з координатою R_0 за межами області неадіабатичного зв'язку. Цей пакет починає рухатись у напрямку цієї області. Траєкторія хвильового пакету визначається ньютонівськими рівняннями руху:

$$\dot{R}_r(t) = \frac{p_r(t)}{M}, \quad (5.52a)$$

$$\dot{p}_r(t) = F_n(R_r(t)), \quad n \in \{1, 2\}. \quad (5.52б)$$

2. Коли хвильовий пакет досягає регіону неадіабатичного зв'язку в деякій точці $\tilde{r}$, породжується «віртуальний» хвильовий пакет на іншій енергетичній поверхні n'_0 . «Віртуальний» пакет має імпульс $p_r(t) + \Delta p_{n_0 n'_0}(\tilde{r})$. Як критерій породження ще одного пакету, використовується умова

$$\mathcal{M} > \zeta, \quad \mathcal{M} = \left| \frac{\bar{v} A_{12}(\tilde{r})}{\Delta E_{12}(\tilde{r})} \right|, \quad (5.53)$$

де $\mathcal{M}$ – параметр Мессі (*Massey parameter*) [177]. Залежно від задачі значення ζ потрапляє в межі $10^{-2} - 10^{-4}$.

3. Після створення «віртуального» хвильового пакету, він поширюється відповідно до ньютонівських рівнянь руху (5.52a) та (5.52б), однак, індекс r у рівняннях замінено на v .
4. На кожному часовому кроці, робиться спроба стрибку «реального» пакету на іншу енергетичну поверхню перевіркою виконання умови

$$\frac{\dot{\mathcal{P}}_n(t)}{\mathcal{P}_n(t)} > \xi, \quad (5.54)$$

де $\xi \in [0, 1]$ – випадкове число. Для розрахунку населеностей адіабатичних рівнів $\mathcal{P}_n(t)$, використовуються рівняння (5.38a) та (5.38б).

- (а) Якщо умова (5.54) не виконується – повертаємось до кроку 3 та продовжуємо рух хвильового пакету по тій самій енергетичній поверхні використовуючи ньютонівські рівняння руху (5.52a) та (5.52б).
- (б) Якщо умова (5.54) виконалась і стрибки «реального» та «віртуального» пакетів дозволені законом збереження енергії, здійснюється *миттєві* стрибки обох хвильових пакетів з їхніх поточних поверхонь на протилежні ($1 \rightleftharpoons 2$). Імпульси пакетів після стрибків задаються як $p_w(t) \stackrel{n \rightarrow n'}{=} p_w(t) - \Delta p_{nn'}(t)$, де $w \in \{r, v\}$ – індекси, що відповідають «реальному» та «віртуальному» хвильовим пакетам. Після стрибків, положення хвильових пакетів не змінюється. Далі повертаємось до кроку 3 та продовжуємо рухати хвильові пакети новими енергетичними поверхнями згідно класичних рівнянь руху (5.52a) та (5.52б) до моменту, коли умова (5.54) знову виконається.

5. Коли обидва хвильових пакета виходять з області неадіабатичного зв'язку, тобто, коли $\mathcal{M} < \zeta$, то «віртуальний» пакет знищується, а «реальний» хвильовий пакет продовжує рух згідно рівнянь (5.52a) та (5.52б) до тих пір, поки він 1) знову не ввійде в область неадіабатичного зв'язку, або 2) вийде за межі просторової чи часової області, в якій проводяться обчислення. У першому випадку, повертаємось до кроку 2 та заново встановлюємо початкові ймовірності заповнення електронних станів, тобто $\mathcal{P}_n = 1$ для «реального» хвильового пакету. У другому випадку, вважаємо траєкторію завершеною.

Подібно до оригінального алгоритму Tully [177], для обчислення ймовірностей розсіяння, запускається багато траєкторій. Після чого, рахується кількість траєкторій «реального» хвильового пакету, які відповідають пев-

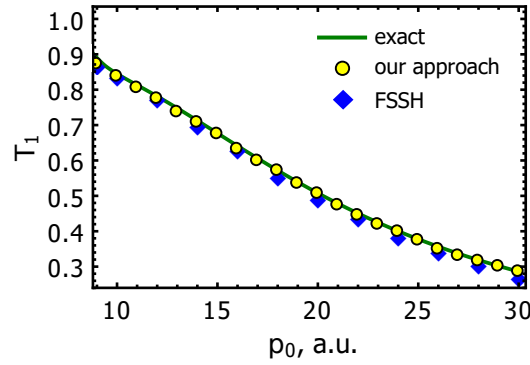


Рис. 5.2. Залежність ймовірності проходження ядерного хвильового пакету на нижній енергетичній поверхні від початкового імпульсу p_0 для задачі з одним перетином поверхонь (*single avoided crossing, SAC*).

ному сценарію розсіяння, наприклад розсіянню назад чи вперед на певній енергетичній поверхні. Оскільки всі траєкторії вважаються незалежними, то розділивши цю кількість на повну кількість симульованих траєкторій N_{trj} отримаємо відповідну ймовірність розсіяння.

Ключовою відмінністю запропонованого алгоритму, від підходу *FSSH* в роботі [177], є спосіб обчислення населеностей адіабатичних станів. Для цього використовуються рівняння еволюції населеностей (5.38a) та (5.38б), в яких враховуються ефекти декогеренції та зсуву фази. На відміну від оригінального *FSSH* алгоритму, в якому використовується один хвильовий пакет, у запропонованому підході для розв'язання рівнянь еволюції населеностей пропагується пара хвильових пакетів («реальний» та «віртуальний») на різних енергетичних поверхнях.

5.7 Результати

Ми тестуємо ефективність нашого алгоритму на наборі задач запропонованих *J. C. Tully* в статті [177]. Цей набір задач включає три задачі з одним ядерним ступенем вільності та двома зв'язаними енергетичними поверхнями. Ці модельні задачі широко використовуються для перевірки ефективності нових методів моделювання неадіабатичної молекулярної ди-

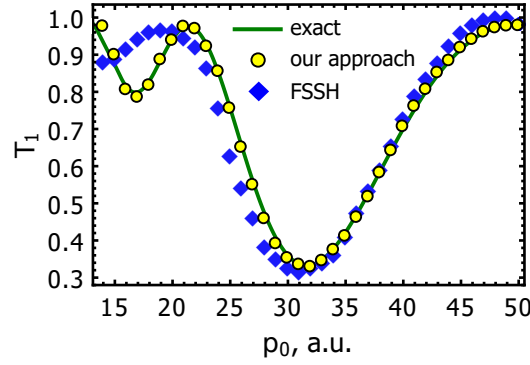


Рис. 5.3. Ймовірність проходження хвильового пакету на нижній поверхні як функція початкового імпульсу ядра p_0 для задачі з подвійним перетином поверхонь (*double avoided crossing, DAC*).

наміки. Детальний опис цих задач представлено у Додатку Г. Ми порівнюємо результати отримані використовуючи представлений підхід з результатами числового розв’язання залежного від часу рівняння Шрьодінгера та стандартного методу *FSSH*. Для всіх трьох задач, ядерні хвильові пакети в початковий момент часу знаходяться на нижній енергетичній поверхні. Їхній стан задається хвильовою функцією

$$|g_1(R_0, p_0; R, 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\sigma_0^2}} \exp\left[ip_0 R - \frac{(R - R_0)^2}{2\sigma_0^2}\right] |1\rangle, \quad (5.55)$$

де початкове положення хвильового пакету $R_0 < 0$ знаходиться поза регіоном неадіабатичного зв’язку, параметр $p_0 > 0$ означає початковий імпульс ядра. Початкова ширина хвильового пакету береться $\sigma_0 = 20/p_0$, як і в роботі [177]. Для всіх задач, маса ядра обирається близькою до маси протона (ядра водню), $M = 2000$ а.о. Для обчислення ймовірностей розсіяння, симулюється $N_{\text{trj}} = 2500$ незалежних траєкторій для кожного значення початкового імпульсу ядра p_0 як для запропонованого підходу, так і для методу *FSSH*. В подальшому, всі величини приведені в атомних одиницях.

Варто підкреслити, що через множник $\mathcal{D}(t; \tau)$ в рівняннях (5.38а) та (5.38б), кількість обчислювальних операцій $\propto N_{\text{st}}^2$, де N_{st} – кількість кроків по часу, необхідних для завершення траєкторії. Це обмеження долається

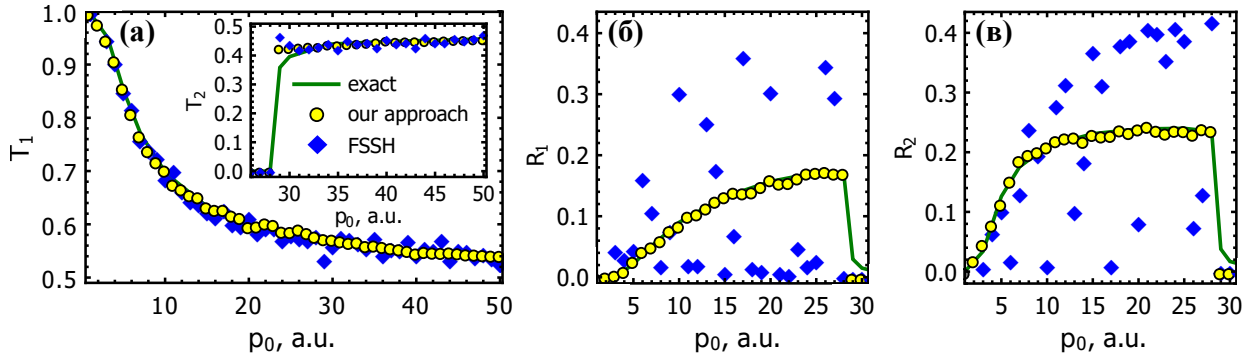


Рис. 5.4. Залежність ймовірності розсіювання від початкового імпульсу ядра p_0 для задачі з протяжною областю з відбиттям (*extended coupling with reflection, ECR*): (а) ймовірність проходження по нижній поверхні, на вставці показана ймовірність проходження на верхній поверхні; (б) ймовірність відбиття на нижній поверхні; (в) ймовірність відбиття на верхній поверхні.

використанням розкладу (Шмідта) функції $\mathcal{D}(t; \tau)$, що задається рівнянням (5.39), в ряд представлений сумою добутків пар функцій залежних тільки від t та τ . Таке представлення дає можливість апроксимувати рівняння еволюції населеностей адіабатичних електронних рівнів (5.38a) та (5.38б) системою зв'язаних звичайних диференціальних рівнянь першого порядку. Деталі цього підходу наведені в Додатку В. Завдяки цьому, кількість операцій $\propto N_{\text{nt}} N_{\text{st}}$, де N_{nt} – кількість доданків, яка береться в розкладі. Для обчислень ми використовуємо $N_{\text{nt}} = 6$.

Першою задачею, яку ми розглядаємо є задача з одним перетином поверхні (*single avoided crossing, SAC*). Для цієї задачі в умові (5.53) обрано значення $\zeta = 10^{-4}$. Рисунок 5.2 показує залежність ймовірності проходження хвильового пакету на нижній енергетичній поверхні T_1 від початкового імпульсу ядра отриману чисельним розв'язанням рівняння Шрьодінгера, стандартним методом *FSSH*, та методом, що розглядається. Обчислення показують, що для цієї задачі і стандартний підхід *FSSH* і новий метод показують добре узгодження з результатами розв'язку рівняння Шрьодінгера.

Особливість другої модельної задачі з подвійним перетином поверхонь (*double avoided crossing, DAC*) полягає у виникненні інтерференції між дво-

ма шляхами нижньою та верхньою енергетичними поверхнями. Ця інтерференція призводить до виникнення осциляцій Штюкельберга (*Stueckelberg oscillations*) [183] ймовірності розсіяння. Ці осциляції продемонстровані на Рис. 5.3. Стандартний метод *FSSH* досить добре працює для великих значень початкового імпульсу $p_0 > 30$. Однак, при зменшенні початкового імпульсу p_0 , результати *FSSH* стають зсунутими по фазі відносно точних результатів⁴. Запропонований підхід відтворює точні результати кількісно при $p_0 > 20$ та якісно при $p_0 < 20$. Це показує, що запропонований підхід коректно описує інтерференційні ефекти, оскільки оперує двома хвильовими пакетами, а не одним, як у стандартному підході *FSSH*. Зазначимо, що рівняння руху (5.38a) та (5.38б) враховують різні положення реального та віртуального хвильових пакетів. Це, зокрема, призводить до виникнення додаткового зсуву фаз в рівнянні (5.40). Для цієї задачі оптимальним значенням ζ в умові (5.53) є $\zeta = 10^{-2}$.

Третьою задачею, яка використовується для тестування нового підходу, є задача з протяжною областю неадіабатичного зв'язку (*extended coupling with reflection, ECR*). Ця модельна система відмінна тим, що при початкових значеннях ядерного імпульсу $p_0 < 28$ стандартний алгоритм *FSSH* не здатен відтворити точні результати ні кількісно, ні якісно. Рисунки 5.4(б) та 5.4(в) демонструють цю розбіжність результатів. Таке відхилення виникає через те, що в звичайному підході *FSSH* [177] не враховується декогеренція [184, 185, 186, 187, 188, 189, 190, 191]. Варто зазначити, що в рівняннях еволюції адіабатичних станів (5.38a) та (5.38б) не враховується сценарій, при якому один з хвильових пакетів поширюється вздовж верхньої енергетичної поверхні та відбивається від потенційного бар'єру та змінює напрям руху. Таку ситуацію ми описуємо послуговуючись додатковою процедурою «породження» (*spawning*) нового віртуального хвильового па-

⁴Під «точним розв'язком» розуміємо результати числового розв'язання залежного від часу рівняння Шрьодінгера

кету. Суть цієї процедури така – коли хвильові пакети полишають область неадіабатичного зв’язку, що визначається умовою $\mathcal{M} < \zeta$ (де $\zeta = 10^{-3}$ для цієї задачі), віртуальний хвильовий пакет знищується і ймовірності встановлюються таким, як описано в кроці 5 алгоритму. Реальний хвильовий пакет або ж залишає обчислювальну область, якщо він перебуває на нижній поверхні, або ж повертається назад до області зв’язку, якщо він знаходиться на верхній поверхні. В останньому випадку симуляція продовжується з кроку 2. Як продемонстровано на Рис. 5.4, запропонований метод добре відтворює точні результати.

5.8 Висновки

У цьому розділі, ми представили формалізм для опису ефектів декогеренції, пов’язаних з квантовими флуктуаціями координат та імпульсів ядер. Показано, що врахування суперпозицій ядерних хвильових функцій, що відповідають класичним ядерним траєкторіям вздовж різних енергетичних поверхонь, дає детальний баланс в населеностях електронних рівнів. Використовуючи розроблений формалізм, ми також відповідним чином модифікували швидкий та простий для реалізації алгоритм *FSSH* для врахування ефектів декогеренції. Запропонований алгоритм потребує більше обчислювальних ресурсів, ніж стандартний алгоритм, оскільки потребує розв’язку більшої кількості диференціальних рівнянь. Однак трохи програючи у швидкості, новий алгоритм дає істотно кращі результати в модельних задачах з інтерференцією та декількома перетинами енергетичних поверхонь, таких як задачі з подвійним перетином та протяжним регіоном зв’язку.

ВИСНОВКИ

Досліджувалась взаємодія фотонних хвильових пакетів з квантовими випромінювачами в одновимірному хвилеводі, а саме: з дворівневим атомом (кубітом) та з резонатором, під'єднаним до кубіта. Також в роботі запропоновано новий підхід до опису неадіабатичної електронно-ядерної динаміки молекулярних систем.

Основні результати роботи такі:

1. Показано, що статистика світла, яке відбилось від дворівневого атома (кубіта) при його збудженні хвильовим пакетом у когерентному стані, залежить від середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі та від параметра зв'язку між атомом та модою хвилеводу. Зроблено висновок, що кубіт можна використовувати як джерело світла із заданою (регульованою) статистикою.
2. Продемонстровано, що після розсіяння однофотонного хвильового пакета на кубіті, фотонна функція розподілу у фазовому (x, p) —просторі, яка є позитивною у початковий момент часу, може набувати від'ємних значень у деяких областях фазового простору. Показано, що коли вхідний хвильовий пакет знаходиться у двофотонному стані, статистика фотонів, відбитих кубітом, завжди субпуассонівська, тоді як статистика фотонів, що пройшли, може бути як суб- так і суперпуассонівською в залежності від відстані між однофотонними компонентами вхідного імпульсу та сили взаємодії кубіта з полем хвилеводу.
3. Для опису процесу розсіяння фоківських станів на системі резонатор-кубіт у хіральному (однонаправленому) хвилеводі отримані точні аналітичні вирази амплітуд ймовірностей, які описують еволюцію повного

квантового стану системи хвилевід-резонатор-атом у випадку одно- та двофотонного вхідного хвильового пакету. Визначено, що ймовірність знаходження двох збуджень у системі резонатор-атом істотно зменшується у порівнянні з випадком резонатора, від'єданого від кубіта, що є проявом фотонної блокади. Показано, що в процесі взаємодії з системою резонатор-кубіт спектр двофотонного хвильового пакета модифікується у випадку, коли між кубітом та резонатором є взаємодія. В граничному випадку резонатора, від'єданого від кубіта, спектр вихідного двофотонного хвильового пакету ідентичний спектру вхідного. Використовуючи розклад Шмідта та ентропію фон Неймана, продемонстровано, що пара фотонів, яка розсіялась на системі резонатор-атом, знаходиться в частотно-заплутаному (*frequency-entangled*) стані.

4. Продemonстровано фундаментальні обмеження на метод дисперсного зчитування кубіта вимірюючим сигналом в однофотонному стані. Вони пов'язані з тим, що зміна швидкості «витікання» фотона з резонатора та величина дисперсного зсуву частоти резонатора протилежним чином впливають на швидкість вимірювання та парселівський час життя кубіта. Показано, що існує така комбінація значень цих параметрів, при якій контраст зчитування є максимальним для заданої тривалості вимірюючого однофотонного імпульсу. Показано, що при певних значеннях частот резонатора та кубіта зсув Блоха-Зігерта (в частоті резонатора) збільшує контраст зчитування.
5. Побудовано новий формалізм для опису корельованої електронно-ядерної динаміки в молекулярних системах, в якому послідовно враховані ефекти декогеренції. На основі цього підходу запропоновано та реалізовано алгоритм для моделювання неадіабатичної молекулярної динаміки. На прикладі тестових задач Таллі продемонстровано ефективність запропонованого алгоритму.

Додаток А

Виведення розв'язків рівнянь руху амплітуд ймовірностей

А.1 Однофотонна задача

Перетворення Лапласа $\bar{x}(s) = \mathcal{L}_s\{x(t)\} = \int_0^\infty dt e^{-st} x(t)$ перетворює систему звичайних диференціальних рівнянь (3.13), які описують амплітуди ймовірностей у однофотонній задачі, на систему алгебраїчних рівнянь виду

$$(is - \tilde{\omega}_c) \bar{A}^g(s) = g\bar{A}^e(s) + f\bar{\Xi}(s), \quad (\text{A.1a})$$

$$(is - \omega_a) \bar{A}^e(s) = g\bar{A}^g(s), \quad (\text{A.1б})$$

$$(is - \omega) \bar{B}_\omega(s) = \xi_\omega + f\bar{A}^g(s). \quad (\text{A.1в})$$

Застосування оберненого перетворення Лапласа $y(t) = \mathcal{L}_t^{-1}\{\bar{y}(s)\}$ до розв'язків цієї системи рівнянь дає

$$A^g(t) = -if \frac{1}{\mathcal{R}_1} \int_0^t d\tau \Xi(\tau) \sum_{\mu=\pm} \mu (\mathcal{E}_1^\mu - \omega_a) e^{-i\mathcal{E}_1^\mu(t-\tau)}, \quad (\text{A.2})$$

$$A^e(t) = -ifg \frac{1}{\mathcal{R}_1} \int_0^t d\tau \Xi(\tau) \sum_{\mu=\pm} \mu e^{-i\mathcal{E}_1^\mu(t-\tau)}, \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} B_\omega(t) = & \xi_\omega e^{-i\omega t} - if^2 \frac{\omega - \omega_a}{(\omega - \mathcal{E}_1^+)(\omega - \mathcal{E}_1^-)} \int_0^t d\tau \Xi(\tau) e^{-i\omega(t-\tau)} \\ & + if^2 \frac{1}{\mathcal{R}_1} \sum_{\mu=\pm} \mu \frac{\mathcal{E}_1^\mu - \omega_a}{(\omega - \mathcal{E}_1^\mu)} \int_0^t d\tau \Xi(\tau) e^{-i\mathcal{E}_1^\mu(t-\tau)}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Взявши граничний випадок довгих часів (3.14) у рівняннях (??) та проінтегрувавши по τ отримаємо такий результат

$$A_{\text{lt}}^g = A_{\text{lt}}^e = 0, \quad B_{\omega, \text{lt}} = e^{-i\omega t} \left[1 - i\kappa \frac{\omega - \omega_a}{(\omega - \mathcal{E}_1^+)(\omega - \mathcal{E}_1^-)} \right] \xi(\omega). \quad (\text{A.5})$$

Послугуючись співвідношенням $(\omega - \mathcal{E}_1^+)(\omega - \mathcal{E}_1^-) = (\omega - \omega_a)(\omega - \tilde{\omega}_c) - g^2$ у виразі для $B_{\omega, \text{lt}}$ отримаємо такий результат

$$B_{\omega, \text{lt}} = e^{-i\omega t} \frac{(\omega - \mathcal{E}_1^+)^*(\omega - \mathcal{E}_1^-)^*}{(\omega - \mathcal{E}_1^+)(\omega - \mathcal{E}_1^-)} \xi(\omega), \quad (\text{A.6})$$

що одразу приводить до рівняння (3.15). В подальшому ми використовуємо індекс «lt» для означення того, що амплітуди ймовірностей беруться у границі довгих часів еволюції системи (3.14).

А.2 Двофотонна задача

Рівняння руху (3.25), які описують еволюцію амплітуд ймовірностей у двофотонній задачі, після перетворення Лапласа набувають такої форми

$$[is - (\omega + \omega')] \bar{\Phi}_{\omega, \omega'}(s) = \xi_\omega \xi_{\omega'} + \frac{f}{\sqrt{2}} [\bar{X}_\omega^g(s) + \bar{X}_{\omega'}^g(s)], \quad (\text{A.7a})$$

$$[is - (\tilde{\omega}_c + \omega)] \bar{X}_\omega^g(s) = g\bar{X}_\omega^e(s) + \sqrt{2}f\bar{Z}^g(s) + \sqrt{2}f\bar{A}_\omega(s) * \bar{\Xi}(s), \quad (\text{A.7б})$$

$$[is - (\omega + \omega_a)] \bar{X}_\omega^e(s) = g\bar{X}_\omega^g(s) + f\bar{Z}^e(s), \quad (\text{A.7в})$$

$$(is - 2\tilde{\omega}_c) \bar{Z}^g(s) = g\sqrt{2}\bar{Z}^e(s) + 2f\bar{B}^g(s) * \bar{\Xi}(s), \quad (\text{A.7г})$$

$$[is - (\tilde{\omega}_c + \omega_a)] \bar{Z}^e(s) = g\sqrt{2}\bar{Z}^g(s) + \sqrt{2}f\bar{B}^e(s) * \bar{\Xi}(s). \quad (\text{A.7д})$$

Для виводу цих рівнянь ми використали теорему про згортку

$$\mathcal{L}_s\{y_1(t)y_2(t)\} = \bar{y}_1(s) * \bar{y}_2(s),$$

де $*$ означає оператор згортки. Розв'язуючи систему рівнянь (A.7) та застосовуючи до розв'язків обернене перетворення Лапласа отримуємо шукані вирази для амплітуд ймовірностей. Ці громіздкі математичні операції виконувались з використанням системи МАТНЕМАТІСА [138]. Розв'язок для $\bar{\Phi}_{\omega,\omega'}(t)$ має такий вигляд

$$\Phi_{\omega,\omega'}(t) = \xi_{\omega}\xi_{\omega'}e^{-i(\omega+\omega')t} - if^2 [\Upsilon_{\omega,\omega'}(t) + \Upsilon_{\omega',\omega}(t)], \quad (\text{A.8})$$

де функція $\Upsilon_{\omega,\omega'}(t)$ задається як

$$\begin{aligned} \Upsilon_{\omega,\omega'}(t) = & \sum_{\mu=\pm} \mu \frac{1}{\mathcal{R}_2(\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^{\mu})} \int d\tau e^{-i\mathcal{E}_2^{\mu}(t-\tau)} \Xi(\tau) \\ & \times \left[fg \frac{2(\omega + \mathcal{E}_1^+ + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu}) - \mathcal{E}_2^{\mu}}{(\omega + \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_2^{\mu})(\omega + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu})} A^e(\tau) \right. \\ & \quad \left. + 2f \frac{(\omega + \omega_a - \mathcal{E}_2^{\mu})(\mathcal{E}_1^+ + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu}) + g^2}{(\omega + \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_2^{\mu})(\omega + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu})} A^g(\tau) \right] \\ & - \sum_{\mu=\pm} \mu \frac{1}{\mathcal{R}_1(\omega' - \mathcal{E}_1^{\mu})} \int d\tau e^{-i(\omega+\mathcal{E}_1^{\mu})(t-\tau)} \Xi(\tau) \\ & \times \left[(\mathcal{E}_1^{\mu} - \omega_a) B_{\omega}(\tau) + fg \frac{(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu}) + 2\mathcal{E}_1^{\bar{\mu}}}{(\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^+) (\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^-)} A^e(\tau) \right. \\ & \quad \left. + 2f \frac{(\mathcal{E}_1^{\mu} - \omega_a)(\omega + \mathcal{E}_1^{\bar{\mu}}) + g^2}{(\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^+) (\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^-)} A^g(\tau) \right] \\ & + \frac{1}{(\omega' - \mathcal{E}_1^+) (\omega' - \mathcal{E}_1^-)} \int_0^t d\tau e^{-i(\omega+\omega')(t-\tau)} \Xi(\tau) \\ & \times \left[(\omega' - \omega_a) B_{\omega}(\tau) + fg \frac{(\omega + \omega') + 2(\omega' - \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_1^-)}{(\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^+) (\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^-)} A^e(\tau) \right. \\ & \quad \left. + 2f \frac{(\omega' - \omega_a)(\omega' - \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_1^-) + g^2}{(\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^+) (\omega + \omega' - \mathcal{E}_2^-)} A^g(\tau) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Позначення $\bar{\mu}$ показує знак протилежний знаку μ . Решта розв'язків рівнянь для амплітуд ймовірностей мають такий вигляд

$$\begin{aligned}
X_{\omega}^g(t) = & i \frac{\sqrt{2}f}{\mathcal{R}_2} \sum_{\mu=\pm} \mu \int d\tau e^{-i\mathcal{E}_2^{\mu}(t-\tau)} \Xi(\tau) \\
& \times \left[fg \frac{2(\omega + \mathcal{E}_1^+ + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu}) - \mathcal{E}_2^{\mu}}{(\omega + \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_2^{\mu})(\omega + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu})} A^e(\tau) \right. \\
& \quad \left. + 2f \frac{(\omega + \omega_a - \mathcal{E}_2^{\mu})(\mathcal{E}_1^+ + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu}) + g^2}{(\omega + \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_2^{\mu})(\omega + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu})} A^g(\tau) \right] \\
& - i \frac{\sqrt{2}f}{\mathcal{R}_1} \sum_{\mu=\pm} \mu \int d\tau e^{-i(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu})(t-\tau)} \Xi(\tau) \\
& \times \left[(\mathcal{E}_1^{\mu} - \omega_a) B_{\omega}(\tau) + fg \frac{(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu}) + 2\mathcal{E}_1^{\bar{\mu}}}{(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - \mathcal{E}_2^+)(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - \mathcal{E}_2^-)} A^e(\tau) \right. \\
& \quad \left. + 2f \frac{(\mathcal{E}_1^{\mu} - \omega_a)(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu}) + g^2}{(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - \mathcal{E}_2^+)(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - \mathcal{E}_2^-)} A^g(\tau) \right], \tag{A.10a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
X_{\omega}^e(t) = & i \frac{\sqrt{2}f}{\mathcal{R}_2} \sum_{\mu=\pm} \mu \int d\tau e^{-i\mathcal{E}_2^{\mu}(t-\tau)} \Xi(\tau) \\
& \times \left[f \frac{(\omega + \omega_a - \mathcal{E}_2^{\mu})(2\tilde{\omega}_c - \mathcal{E}_2^{\mu}) + 2g^2}{(\omega + \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_2^{\mu})(\omega + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu})} A^e(\tau) \right. \\
& \quad \left. + 2fg \frac{\omega - \tilde{\omega}_c - \mu\mathcal{R}_2}{(\omega + \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_2^{\mu})(\omega + \mathcal{E}_1^- - \mathcal{E}_2^{\mu})} A^g(\tau) \right] \tag{A.10б} \\
& - i \frac{\sqrt{2}f}{\mathcal{R}_1} \sum_{\mu=\pm} \mu \int d\tau e^{-i(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu})(t-\tau)} \Xi(\tau)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[gB_{\omega}(\tau) + f \frac{(\mathcal{E}_1^{\mu} - \omega_a)(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - 2\tilde{\omega}_c) + 2g^2}{(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - \mathcal{E}_2^+)(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - \mathcal{E}_2^-)} A^e(\tau) \right. \\
& \quad \left. + 2fg \frac{\omega - \tilde{\omega}_c + \mu\mathcal{R}_1}{(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - \mathcal{E}_2^+)(\omega + \mathcal{E}_1^{\mu} - \mathcal{E}_2^-)} A^g(\tau) \right], \\
Z^g(t) = & -i \frac{2f}{\mathcal{R}_2} \sum_{\mu=\pm} \mu \int_0^t d\tau e^{-i\mathcal{E}_2^{\mu}(t-\tau)} \Xi(\tau) [gA^e(\tau) + (\mathcal{E}_2^{\mu} - \mathcal{E}_1^+ - \mathcal{E}_1^-)A^g(\tau)], \tag{A.10B}
\end{aligned}$$

$$Z^e(t) = -i \frac{\sqrt{2}f}{\mathcal{R}_2} \sum_{\mu=\pm} \mu \int_0^t d\tau e^{-i\mathcal{E}_2^\mu(t-\tau)} \Xi(\tau) [(\mathcal{E}_2^\mu - 2\tilde{\omega}_c)A^e(\tau) + 2gA^g(\tau)]. \quad (\text{A.10}\Gamma)$$

У довгочасовій границі (3.14) усі доданки $\propto \exp(-i\mathcal{E}_j^\pm t)$ (де $j = 1, 2$) прямують до нуля, оскільки $\text{Im}\{\mathcal{E}_j^\pm\} < 0$. Це означає, що усі двочастинкові амплітуди ймовірностей, окрім $\Phi_{\omega,\omega'}(t)$, обертаються у нуль на часах, що задовольняють критерію (3.14). У виразі (A.9) ненульовим залишається тільки останній доданок. Використовуючи рівняння (3.26) та (3.27), інтегруючи по τ у (A.9), та після низки громіздких перетворень отримаємо такий вираз

$$\Phi_{\omega,\omega',\text{lt}} = e^{-i(\omega+\omega')t} \Phi_{\omega,\omega'}^{\text{out}}, \quad (\text{A.11})$$

де $\Phi_{\omega,\omega'}^{\text{out}}$ задається рівнянням (3.35).

Додаток Б

Деякі деталі числового розв’язку рівнянь руху та обчислення контрасту

Ми розв’язуємо систему диференціальних рівнянь (4.62)–(4.66) аналітично використовуючи перетворення Лапласа. Для цієї рутинної операції, ми використовуємо функції `LaplaceTransform` та `InverseLaplaceTransform` системи МАТНЕМАТІСА. Отримані вирази вкрай громіздкі, тому ми їх не наводимо. Знаходження аналітичних розв’язків для частини рівнянь рівнянь руху дає змогу пришвидшити обчислення та зменшити час, необхідний для отримання залежностей контрасту зчитування від параметрів системи, які будуть наведені нижче. Інтегрування по хвильовим векторам в рівняннях (4.46), (4.55) та (4.70) проводиться за допомогою числових методів. Для цього ми використовуємо вбудовану функцію `NIntegrate` системи МАТНЕМАТІСА.

Коротко обговоримо як зміниться обчислювальне навантаження при збільшенні кількості фотонів у вхідному імпульсі. Для визначення стану системи у випадку N -фотонного вхідного хвильового пакету, необхідно розв’язати систему із $(N + 1)^2$ та $(N + 2)^2$ диференціальних рівнянь, які описують еволюцію амплітуд ймовірностей у випадку кубіта приготованого в основному та збудженому стані, відповідно. Аналітичний розв’язок стає вкрай складним вже для $N \geq 2$. Більш того, для обчислення ймовірностей спрацювання детектора [див. рівняння (4.45)] необхідно обчислювати $(N + 1)$ -кратні інтеграли по хвильовим векторам. Отже, при збільшенні кількості фотонів у вхідному імпульсі, задача визначення контрасту швидко стає «вимогливою» з точки зору обчислювальних ресурсів.

Додаток В
Розклад множника $\mathcal{D}(t; \tau)$

Формально перепишемо функцію $\mathcal{D}(t; \tau)$, яка задається рівнянням (5.39), у такому вигляді

$$\mathcal{D}(t; \tau) = \exp \left\{ \kappa \alpha^2 [\eta^2(t) + \eta^2(\tau)] \right\} W(t; \tau) \quad (\text{B.1})$$

де $\lambda = (\sqrt{5} - 1)/2$, $\kappa = \lambda - 1/2$, а $W(t; \tau)$ має вигляд

$$\begin{aligned} W(t; \tau) = \exp \left\{ -\alpha^2 \frac{1 + \lambda^2}{2(1 - \lambda^2)} [\eta^2(t) + \eta^2(\tau)] \right\} \\ \times \exp \left[2\alpha^2 \frac{\lambda}{1 - \lambda^2} \eta(t) \eta(\tau) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Для функції $W(t; \tau)$ існує розклад Шмідта в аналітичному вигляді [192]

$$W(t; \tau) = \sqrt{1 - \lambda^2} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j \Theta_j(\alpha \eta(t)) \Theta_j(\alpha \eta(\tau)), \quad (\text{B.3})$$

де $\Theta_j(x)$ має такий вигляд

$$\Theta_j(x) = \sqrt{\frac{1}{2^j j!}} H_j(x) e^{-x^2/2}, \quad (\text{B.4})$$

а $H_j(x)$ означає поліном Ерміта j -th порядку. Об'єднуючи розклад (B.2) та вираз (B.1) та підставляючи результат у рівняння руху (5.38a) та (5.38б),

отримаємо такі рівняння

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}}_1(t) \approx 2d_{12}(t) \sum_{j=0}^{N_{\text{nt}}-1} Y_j(t) \\ \times \operatorname{Re} \left\{ e^{i\mathcal{E}_{21}(t)} Z_{21}^{(j)}(t) - e^{i\mathcal{E}_{12}(t)} Z_{12}^{(j)}(t) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}}_2(t) \approx 2d_{12}(t) \sum_{j=0}^{N_{\text{nt}}-1} Y_j(t) \\ \times \operatorname{Re} \left\{ e^{i\mathcal{E}_{12}(t)} Z_{12}^{(j)}(t) - e^{i\mathcal{E}_{21}(t)} Z_{21}^{(j)}(t) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Параметр N_{nt} означає максимальну кількість доданків, яка береться в розкладі для забезпечення сходимості. Функція $Y^{(j)}(t)$ має вигляд

$$Y^{(j)}(t) = \frac{\lambda^j \sqrt{1-\lambda^2}}{2^j j!} \exp [(\lambda-1)\eta^2(t)] H_j(\eta(t)), \quad (\text{B.7})$$

де $\eta(t)$ записується як

$$\eta(t, \tau) = \frac{R_x(t) - R_v(t, \tau)}{2\sigma}. \quad (\text{B.8})$$

Функція $Z_{nn'}^{(j)}(t)$ (де $n, n' \in \{1, 2\}$ та $n \neq n'$) задовольняє такому рівнянню руху

$$\dot{Z}_{nn'}^{(j)}(t) = d_{12}(t) Y^{(j)}(t) \mathcal{P}_n(t) e^{i\mathcal{E}_{nn'}(t)}. \quad (\text{B.9})$$

Початковою умовою для цього рівняння є $Z_{nn'}^{(j)}(0) = 0$.

Додаток Г
Тестові задачі Таллі

Для задачі з двома станами та одним ядерним ступенем вільності, молекулярний гамільтоніан у діабатичному представленні набуває вигляду

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\partial_R^2}{2M} \hat{\mathbf{I}} + \begin{pmatrix} H_{11}^{\text{el}}(R) & H_{12}^{\text{el}}(R) \\ H_{21}^{\text{el}}(R) & H_{22}^{\text{el}}(R) \end{pmatrix}, \quad (\text{Г.1})$$

де $\hat{\mathbf{I}}$ – одинична матриця 2×2 . Матриця H^{el} визначає пару зв'язаних енергетичних поверхонь у діабатичному представленні.

Для задачі з одним перетином (*single avoided crossing*), елементи матриці H^{el} є такими

$$\begin{aligned} H_{11}^{\text{el}}(R) &= 0.01 \text{sgn}(R) \left(1 - e^{-1.6|R|}\right), \\ H_{22}^{\text{el}}(R) &= -H_{11}^{\text{el}}(R), \\ H_{12}^{\text{el}}(R) &= H_{21}^{\text{el}}(R) = 0.005e^{-R^2}. \end{aligned} \quad (\text{Г.2})$$

Відповідні адіабатичні поверхні та вектори неадіабатичного зв'язку показані на Рис. Г.1(а). Для задачі з двома перетинами (*double avoided crossing*), матриця H^{el} задається як

$$\begin{aligned} H_{11}^{\text{el}}(R) &= 0, \\ H_{22}^{\text{el}}(R) &= 0.05 - 0.1e^{-0.28R^2}, \\ H_{12}^{\text{el}}(R) &= H_{21}^{\text{el}}(R) = 0.015e^{-0.06R^2}. \end{aligned} \quad (\text{Г.3})$$

Рисунок Г.1(б) ілюструє відповідні адіабатичні поверхні та вектори неадіабатичного зв'язку.

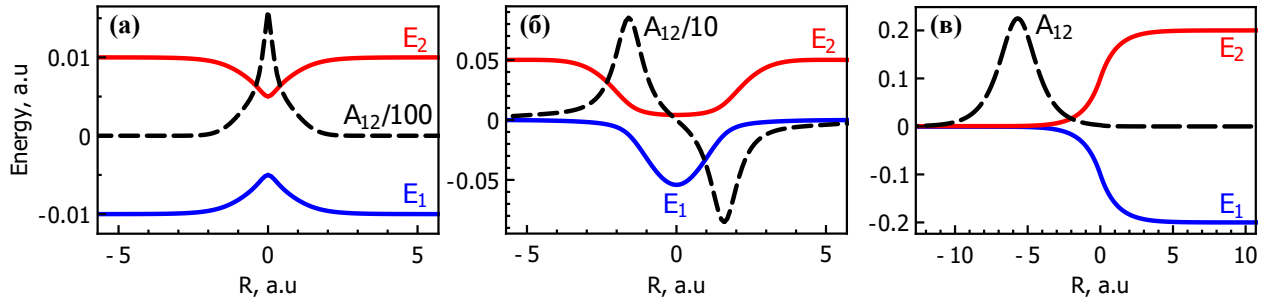


Рис. Г.1. Набір задач Таллі: (а) один перетин поверхонь (*single avoided crossing*), (б) подвійний перетин поверхонь (*double avoided crossing*), та (в) протяжна область зв'язку з відбиттям (*extended coupling with reflection*). Суцільні лінії відповідають адіабатичним енергетичним поверхням. Чорні штрихові лінії показують неадіабатичні зв'язки.

Задача з протяжною областю зв'язку з відбиттям (*extended coupling with reflection*) задається такими діабатичними поверхнями

$$\begin{aligned} H_{11}^{\text{el}}(R) &= 6 \times 10^{-4}, \\ H_{22}^{\text{el}}(R) &= -H_{11}^{\text{el}}(R) \end{aligned} \quad (\text{Г.4})$$

та неадіабатичними зв'язками

$$H_{12}^{\text{el}}(R) = \begin{cases} 0.1e^{0.9R}, & R < 0, \\ 0.1(2 - e^{-0.9R}), & R \geq 0. \end{cases} \quad (\text{Г.5})$$

Відповідні енергетичні поверхні та неадіабатичні зв'язки продемонстровані на Рис. Г.1(в).

Список використаних джерел

1. T. E. Northup and R. Blatt, Quantum information transfer using photons, [Nat. Photon. **8**, 356 \(2014\)](#).
2. Purcell, E. M. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies, *Phys. Rev.* **69**, 681–681 (1946).
3. D. Roy, C. M. Wilson, and O. Firstenberg, Strongly interacting photons in one-dimensional continuum, [Rev. Mod. Phys. **89**, 021001 \(2017\)](#).
4. A. A. Houck, D. I. Schuster, J. M. Gambetta, J. A. Schreier, B. R. Johnson, J. M. Chow, L. Frunzio, J. Majer, M. H. Devoret, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Generating single microwave photons in a circuit, [Nature **449**, 328 \(2007\)](#).
5. M. Hofheinz, E. M. Weig, M. Ansmann, R. C. Bialczak, E. Lucero, M. Neeley, A. D. O’Connell, H. Wang, J. M. Martinis, and A. N. Cleland, Generation of Fock states in a superconducting quantum circuit, [Nature **454**, 310 \(2008\)](#).
6. P. Forn-Díaz, C. W. Warren, C. W. S. Chang, A. M. Vadiraj, and C. M. Wilson, On-Demand Microwave Generator of Shaped Single Photons, [Phys. Rev. Appl. **8**, 054015 \(2017\)](#).
7. W. Pfaff, C. J. Axline, L. D. Burkhardt, U. Vool, P. Reinhold, L. Frunzio, L. Jiang, M. H. Devoret, and R. J. Schoelkopf, Controlled release of multi-photon quantum states from a microwave cavity memory, [Nat. Phys. **13**, 882-887 \(2017\)](#).
8. J. Claudon, J. Bleuse, N. S. Malik, M. Bazin, P. Jaffrennou, N. Gregersen, C. Sauvan, P. Lalanne, and J.-M. Gérard, A highly efficient single-photon source based on a quantum dot in a photonic nanowire, [Nat. Phot. **4**, 174-177 \(2010\)](#).

9. H. Snijders, J. A. Frey, J. Norman, V. P. Post, A. C. Gossard, J. E. Bowers, M. P. van Exter, W. Löffler, and D. Bouwmeester, Fiber-Coupled Cavity-QED Source of Identical Single Photons, [Phys. Rev. Appl. **9**, 031002 \(2018\)](#).
10. L. Hanschke, K. A. Fischer, S. Appel, D. Lukin, J. Wierzbowski, S. Sun, R. Trivedi, J. Vučković, J. J. Finley, and K. Müller, Quantum dot single-photon sources with ultra-low multi-photon probability, [npj Quant. Info., **4**, 43 \(2018\)](#).
11. H. Zheng, D. J. Gauthier, and H. U. Baranger, Waveguide-QED-Based Photonic Quantum Computation, [Phys. Rev. Lett. **111**, 090502 \(2013\)](#).
12. V. Paulisch, H. J. Kimble, and A. González-Tudela, Universal quantum computation in waveguide QED using decoherence free subspaces, [New J. Phys. **18**, 043041 \(2016\)](#).
13. H. Pichler, S. Choi, P. Zoller, and M. D. Lukin, Universal photonic quantum computation via time-delayed feedback, [Proc. Natl. Acad. Sci. **114**, 11362-11367 \(2017\)](#).
14. H. F. Hofmann, K. Kojima, S. Takeuchi, and K. Sasaki, Entanglement and four-wave mixing effects in the dissipation-free nonlinear interaction of two photons at a single atom, [Phys. Rev. A **68**, 043813 \(2003\)](#).
15. E. V. Stolyarov, Few-photon Fock-state wave packet interacting with a cavity-atom system in a waveguide: Exact quantum state dynamics, [Phys. Rev. A **99**, 023857 \(2019\)](#).
16. H. Zheng, D. J. Gauthier, H. U. Baranger, Waveguide QED: Many-Body Bound State Effects on Coherent and Fock State Scattering from a Two-Level System, [Phys. Rev. A **82**, 063816 \(2010\)](#).
17. H. Zheng, D. J. Gauthier, H. U. Baranger, Strongly correlated photons generated by coupling a three- or four-level system to a waveguide, [Phys. Rev. A **85**, 043832 \(2012\)](#).

18. S. Mahmoodian, G. Calajó, D. E. Chang, K. Hammerer, and A. S. Sørensen, Dynamics of Many-Body Photon Bound States in Chiral Waveguide QED, [Phys. Rev. X **10**, 031011 \(2020\)](#).
19. Ş. E. Kocabaş, E. Rephaeli, and S. Fan, Resonance fluorescence in a waveguide geometry, [Phys. Rev. A **85**, 023817 \(2012\)](#).
20. O. O. Chumak and E. V. Stolyarov, Phase-space distribution functions for photon propagation in waveguides coupled to a qubit, [Phys. Rev. A **88**, 013855 \(2013\)](#).
21. O. O. Chumak and E. V. Stolyarov, Photon distribution function for propagation of two-photon pulses in waveguide-qubit systems, [Phys. Rev. A **90**, 063832 \(2014\)](#).
22. M. Pletyukhov and V. Gritsev, Quantum theory of light scattering in a one-dimensional channel: Interaction effect on photon statistics and entanglement entropy, [Phys. Rev. A **94**, 063841 \(2015\)](#).
23. A. González-Tudela, V. Paulisch, H. J. Kimble, and J. I. Cirac, Efficient Multiphoton Generation in Waveguide Quantum Electrodynamics, [Phys. Rev. Lett. **118**, 213601 \(2017\)](#).
24. V. Paulisch, A. González-Tudela, H. J. Kimble, and J. I. Cirac, Heralded multiphoton states with coherent spin interactions in waveguide QED, [New J. Phys. **19**, 043004 \(2017\)](#).
25. V. Paulisch, H. J. Kimble, J. I. Cirac, and A. González-Tudela, Generation of single- and two-mode multiphoton states in waveguide QED, [Phys. Rev. A **97**, 053831 \(2018\)](#).
26. T. R. Nelson, S. Fernandez-Alberti, A. E. Roitberg, and S. Tretiak, Non-adiabatic excited-state molecular dynamics: Photophysics in Organic Conjugated Materials, [Acc. Chem. Res **47**, 1155-1164 \(2014\)](#).
27. T. R. Nelson, A. J. White, J. A. Bjorgaard, A. E. Sifain, Y. Zhang, B. Nebgen, S. Fernandez-Alberti, D. Mozyrsky, A. E. Roitberg, and S. Tretiak, Non-adiabatic excited-state molecular dynamics: Theory and appli-

- cations for modeling photophysics in extended molecular materials, [Chem. Rev. **120**, 2215–2287 \(2020\)](#).
28. W. Domcke, D. R. Yarkony, Role of Conical Intersections in Molecular Spectroscopy and Photoinduced Chemical Dynamics, [Annu. Rev. Phys. Chem. **63**, 325–352 \(2012\)](#).
 29. A. V. Akimov, A. J. Neukirch, O. V. Prezhdo, Theoretical insights into photoinduced charge transfer and catalysis at oxide interfaces [Chem. Rev. **113**, 4496–4565 \(2013\)](#).
 30. M. Born and R. Oppenheimer, Zur quantentheorie der molekeln, [Ann. Phys. **389**, 457–484 \(1927\)](#).
 31. G. D. Scholes, G. R. Fleming, A. Olaya-Castro, and R. van Grondelle, Lessons from nature about solar light harvesting, [Nat. Chem **3**, 763–774 \(2011\)](#).
 32. T. Yonehara, K. Hanasaki, and K. Takatsuka, Fundamental Approaches to Nonadiabaticity: Toward a Chemical Theory beyond the Born-Oppenheimer Paradigm, [Chem. Rev. **112**, 499–542 \(2012\)](#)
 33. R. Crespo-Otero and M. Barbatti, Recent advances and perspectives on nonadiabatic mixed quantum–classical dynamics, [Chem. Rev. **118**, 7026–7068 \(2018\)](#).
 34. R. Kapral, Progress in the theory of mixed quantum-classical dynamics, [Annu. Rev. Phys. Chem. **57**, 129–157 \(2006\)](#).
 35. E. Brunk, and U. Rothlisberger, Mixed Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Molecular Dynamics Simulations of Biological Systems in Ground and Electronically Excited States, [Chem. Rev. **115**, 6217–6263 \(2015\)](#).
 36. E. Runge, E. K. U. Gross, Density-functional theory for time-dependent systems, [Phys. Rev. Lett. **52**, 997 \(1984\)](#).
 37. A. M. Sokolov and E. V. Stolyarov, Single-photon limit of dispersive readout of a qubit with a photodetector, [Phys. Rev. A **101**, 042306 \(2020\)](#).

38. E. V. Stolyarov, A. J. White, and D. Mozyrsky, Mixed quantum–classical approach to model non-adiabatic electron–nuclear dynamics: Detailed balance and improved surface hopping method, [J. Chem. Phys. **153**, 074116 \(2020\)](#).
39. J.-T. Shen and S. Fan, Coherent single photon transport in a one-dimensional waveguide coupled with superconducting quantum bits, [Phys. Rev. Lett. **95**, 213001 \(2005\)](#).
40. C.-H. Yan, L.-F. Wei, W.-Z. Jia, and J.-T. Shen, Controlling resonant photonic transport along optical waveguides by two-level atoms, [Phys. Rev. A **84**, 045801 \(2011\)](#).
41. D. Roy, Few-photon optical diode, [Phys. Rev. B **81**, 155117 \(2010\)](#).
42. P. Bermel, A. Rodriguez, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, Single-photon all-optical switching using waveguide-cavity quantum electrodynamics, [Phys. Rev. A **74**, 043818 \(2006\)](#).
43. K. Xia and J. Twamley, All-optical switching and router via the direct quantum control of coupling between cavity modes, [Phys. Rev. X **3**, 031013 \(2013\)](#).
44. L. Zhou, L.-P. Yang, Y. Li, and C. P. Sun, Quantum routing of single photons with a cyclic three-level system, [Phys. Rev. Lett. **111**, 103604 \(2013\)](#).
45. W.-B. Yan and H. Fan, Single-photon quantum router with multiple output ports, [Sci. Rep. **4**, 4820 \(2014\)](#).
46. M. Ahumada, P. A. Orellana, F. Domínguez-Adame, and A. V. Malyshev, Tunable single-photon quantum router, [Phys. Rev. A **99**, 033827 \(2019\)](#).
47. Xiu Guab, A. F. Kockum, A. Miranowicz, Yu-xi Liu, and F. Nori, Microwave photonics with superconducting quantum circuits, [Phys. Rep. **718-719**, 1 \(2017\)](#).
48. P. Lodahl, S. Mahmoodian, and S. Stobbe, Interfacing single photons and single quantum dots with photonic nanostructures, [Rev. Mod. Phys. **87**,](#)

- 347 (2015).
49. K. P. Nayak, M. Sadgrove, R. Yalla, Fam Le Kien, and K Hakuta, Nanofiber quantum photonics, *J. Opt.* **20**, 073001 (2018).
 50. E. Vetsch, D. Reitz, G. Sagué, R. Schmidt, S. T. Dawkins, and A. Rauschenbeutel, Optical Interface Created by Laser-Cooled Atoms Trapped in the Evanescent Field Surrounding an Optical Nanofiber, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 203603 (2010).
 51. S. T. Dawkins, R. Mitsch, D. Reitz, E. Vetsch, and A. Rauschenbeutel, Dispersive Optical Interface Based on Nanofiber-Trapped Atoms, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 243601 (2011).
 52. M. Arcari, I. Söllner, A. Javadi, S. Lindskov Hansen, S. Mahmoodian, J. Liu, H. Thyrrestrup, E. H. Lee, J. D. Song, S. Stobbe, and P. Lodahl, Near-Unity Coupling Efficiency of a Quantum Emitter to a Photonic Crystal Waveguide, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 093603 (2014).
 53. A. Laucht, S. Putz, T. Günthner, N. Hauke, R. Saive, S. Frédérick, M. Bichler, M.-C. Amann, A. W. Holleitner, M. Kaniber, and J. J. Finley, A waveguide-coupled on-chip single-photon source, *Phys. Rev. X* **2**, 011014, (2012).
 54. I.-C. Hoi, T. Palomaki, J. Lindkvist, G. Johansson, Per Delsing, and C. M. Wilson, Generation of nonclassical microwave states using an artificial atom in 1D open space, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 263601 (2012).
 55. Z. H. Peng, S. E. de Graaf, J. S. Tsai, and O. V. Astafiev, Tuneable on-demand single-photon source in the microwave range, *Nat. Commun.* **7**, 12588 (2016).
 56. J. Clarke and F. K. Wilhelm, Superconducting quantum bits, *Nature* **453**, 1031-1042 (2008).
 57. T. Yamamoto, M. Neeley, E. Lucero, R. C. Bialczak, J. Kelly, M. Lenander, Matteo Mariantoni, A. D. O'Connell, D. Sank, H. Wang, M. Weides, J. Wenner, Y. Yin, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, Quantum process

- tomography of two-qubit controlled-Z and controlled-NOT gates using superconducting phase qubits, [Phys. Rev. B **82**, 184515 \(2010\)](#).
58. L. DiCarlo, J. M. Chow, J. M. Gambetta, Lev S. Bishop, B. R. Johnson, D. I. Schuster, J. Majer, A. Blais, L. Frunzio, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Demonstration of two-qubit algorithms with a superconducting quantum processor, [Nature **460**, 240–244\(2009\)](#).
 59. A. Dewes, R. Lauro, F. R. Ong, V. Schmitt, P. Milman, P. Bertet, D. Vion, and D. Esteve, Quantum speeding-up of computation demonstrated in a superconducting two-qubit processor, [Phys. Rev. B **85**, 140503\(R\) \(2012\)](#).
 60. A. D. Córcoles, E. Magesan, S. J. Srinivasan, A. W. Cross, M. Steffen, J. M. Gambetta, and J. M. Chow, Demonstration of a Quantum Error Detection Code Using a Square Lattice of Four Superconducting Qubits, [Nat. Commun. **6**, 6979 \(2015\)](#).
 61. D. Ristè, S. Poletto, M.-Z. Huang, A. Bruno, V. Vesterinen, O.-P. Saira, and L. DiCarlo, Detecting Bit-Flip Errors in a Logical Qubit Using Stabilizer Measurements, [Nat. Commun. **6**, 6983 \(2015\)](#).
 62. C. K. Andersen, A. Remm, S. Lazar, S. Krinner, N. Lacroix, G. J. Norris, M. Gabureac, C. Eichler, and A. Wallraff, Repeated quantum error detection in a surface code, [Nat. Phys. **16**, 875 \(2020\)](#).
 63. F. Arute, *et al.*, Quantum supremacy using a programmable superconducting processor, [Nature **574**, 505-510 \(2019\)](#).
 64. S. Krinner, S. Storz, P. Kurpiers, P. Magnard, J. Heinsoo, R. Keller, J. Lutolf, C. Eichler, and A. Wallraff, Engineering cryogenic setups for 100-qubit scale superconducting circuit systems, [EPJ Quantum Technol. **6**, 2 \(2019\)](#).
 65. S. Schmidt and J. Houck, Circuit QED lattices: Towards quantum simulation with superconducting circuits, [Ann. Phys. **525**, 395 \(2013\)](#).

66. Y. Salathé, M. Mondal, M. Oppliger, J. Heinsoo, P. Kurpiers, A. Potočník, A. Mezzacapo, U. Las Heras, L. Lamata, E. Solano, S. Filipp, and A. Wallraff, Digital Quantum Simulation of Spin Models with Circuit Quantum Electrodynamics, [Phys. Rev. X **5**, 021027 \(2015\)](#).
67. J. M. Kreula, L. García-Álvarez, L. Lamata, S. R. Clark, E. Solano, and D. Jaksch, Few-Qubit Quantum-Classical Simulation of Strongly Correlated Lattice Fermions, [EPJ Quantum Techno. **3**, 11 \(2016\)](#).
68. D. Marcos, P. Widmer, E. Rico, M. Hafezi, P. Rabl, U. J. Wiese, and P. Zoller, Two-dimensional lattice gauge theories with superconducting quantum circuits, [Ann. Phys. \(Amsterdam\) **351**, 634 \(2014\)](#).
69. A. Mezzacapo, E. Rico, C. Sabín, I. L. Egusquiza, L. Lamata, and E. Solano, Non-Abelian SU(2) Lattice Gauge Theories in Superconducting Circuits, [Phys. Rev. Lett. **115**, 240502 \(2015\)](#).
70. J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Molding the Flow of Light* (Princeton University Press, 2008).
71. P. Lodahl, S. Mahmoodian, and S. Stobbe, Interfacing single photons and single quantum dots with photonic nanostructures, [Rev. Mod. Phys. **87**, 347 \(2015\)](#).
72. D. Englund, B. Shields, K. Rivoire, F. Hatami, J. Vučković, H. Park, and M. D. Lukin, Deterministic Coupling of a Single Nitrogen Vacancy Center to a Photonic Crystal Cavity, [Nano Lett. **10**, 3922-3926 \(2010\)](#).
73. M. Radulaski, M. Widmann, M. Niethammer, J. L. Zhang, S.-Y. Lee, T. Rendler, K. G. Lagoudakis, N. T. Son, E. Janzen, T. Ohshima, J. Wrachtrup, and J. Vučković, Scalable Quantum Photonics with Single Color Centers in Silicon Carbide, [Nano Lett. **17**, 1782 \(2017\)](#).
74. T. Baba, Slow light in photonic crystals, [Nature Photon. **2**, 465–473 \(2008\)](#).
75. T. Nieddu, V. Gokhroo, and S. Nic Chormaic, Optical nanofibres and neutral atoms, [J. Opt. **18**, 053001 \(2016\)](#).

76. E. Vetsch, D. Reitz, G. Sagué, R. Schmidt, S. T. Dawkins, and A. Rauschenbeutel, Optical Interface Created by Laser-Cooled Atoms Trapped in the Evanescent Field Surrounding an Optical Nanofiber, [Phys. Rev. Lett. **104**, 203603 \(2010\)](#).
77. D. Reitz, C. Sayrin, R. Mitsch, P. Schneeweiss, and A. Rauschenbeutel, Coherence Properties of Nanofiber-Trapped Cesium Atoms, [Phys. Rev. Lett. **110**, 243603 \(2013\)](#).
78. J. Lee, J. A. Grover, J. E. Hoffman, L. A. Orozco, and S. L. Rolston, Inhomogeneous broadening of optical transitions of ^{87}Rb atoms in an optical nanofiber trap, [J. Phys. B **48**, 165004 \(2015\)](#).
79. C. Sayrin, C. Clausen, B. Albrecht, P. Schneeweiss, and A. Rauschenbeutel, Storage of fiber-guided light in a nanofiber-trapped ensemble of cold atoms, [Optica **2**, 353-356 \(2015\)](#).
80. S. Fan, S. E. Kocabaş, and J.-T. Shen, Input-output formalism for few-photon transport in one-dimensional nanophotonic waveguides coupled to a qubit, [Phys. Rev. A **82**, 063821 \(2010\)](#).
81. M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
82. J.-T. Shen and S. Fan, Theory of single-photon transport in a single-mode waveguide. I. Coupling to a cavity containing a two-level atom, [Phys. Rev. A **79**, 023837 \(2009\)](#).
83. T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*, Oxford University Press, New York, 2003.
84. C. W. Gardiner and M. J. Collett, Input and output in damped quantum systems: Quantum stochastic differential equations and the master equation, [Phys. Rev. A **31**, 3761 \(1985\)](#).
85. K. J. Blow, R. Loudon, S. D. Phoenix, and T. J. Shepherd, Continuum fields in quantum optics, [Phys. Rev. A **42**, 4102 \(1990\)](#).

86. P. Rohde, W. Mauerer, and C. Silberhorn, Spectral structure and decompositions of optical states, and their applications, [New J. Phys. **9**, 91 \(2007\)](#).
87. P. Domokos, P. Horak, and H. Ritsch, Quantum description of light-pulse scattering on a single atom in waveguides, [Phys. Rev. A, **65**, 033832, \(2002\)](#).
88. Z. Liao, X. Zeng, H. Nha, and M. S. Zubairy, Photon transport in a one-dimensional nanophotonic waveguide QED system, [Phys. Scr. **91**, 063004 \(2016\)](#).
89. J.-T. Shen and S. Fan, Coherent photon transport from spontaneous emission in one-dimensional waveguides, [Opt. Lett. **30**, 2001 \(2005\)](#).
90. D. Roy, Correlated few-photon transport in one-dimensional waveguides: Linear and nonlinear dispersions, [Phys. Rev. A **83**, 043823 \(2011\)](#).
91. J.-F. Huang, T. Shi, C. P. Sun, and F. Nori, Controlling single-photon transport in waveguides with finite cross section, [Phys. Rev. A **88**, 013836 \(2013\)](#).
92. Y. Chen, M. Wubs, J. Mørk, and A. F. Koenderink, Coherent single-photon absorption by single emitters coupled to one-dimensional nanophotonic waveguides, [New J. Phys. **13**, 103010 \(2011\)](#).
93. J.-T. Shen and S. Fan, Strongly Correlated Two-Photon Transport in a One-Dimensional Waveguide Coupled to a Two-Level System, [Phys. Rev. Lett. **98**, 153003 \(2007\)](#).
94. J.-T. Shen and S. Fan, Strongly correlated multiparticle transport in one dimension through a quantum impurity, [Phys. Rev. A **76**, 062709 \(2007\)](#).
95. T. Shi, D. Chang and J. I. Cirac, Multiphoton-scattering theory and generalized master equations, [Phys. Rev. A **92**, 053834 \(2015\)](#).
96. Y. Shen and J.-T. Shen, Photonic-Fock-state scattering in a waveguide-QED system and their correlation functions, [Phys. Rev. A **92**, 033803 \(2015\)](#).

97. M. Pletyukhov and V. Gritsev, Scattering of massless particles in one-dimensional chiral channel, [New J. Phys. **14**, 095028 \(2012\)](#).
98. M. P. Schneider, T. Sproll, C. Stawiarski, P. Schmitteckert, and K. Busch, Green's-function formalism for waveguide QED applications, [Phys. Rev. A **93**, 013828 \(2016\)](#).
99. Ş. E. Kocabaş, Effects of modal dispersion on few-photon-qubit scattering in one-dimensional waveguides, [Phys. Rev. A. **93**, 033829 \(2016\)](#).
100. T. F. See, C. Nok, and D. Angelakis, Diagrammatic approach to multi-photon scattering, [Phys. Rev. A **95**, 053845 \(2017\)](#).
101. D. L. Hurst and P. Kok, Analytic few-photon scattering in waveguide QED, [Phys. Rev. A **97**, 043850 \(2018\)](#).
102. A. Roulet, H. N. Le, and V. Scarani, Two photons on an atomic beam splitter: Nonlinear scattering and induced correlations, [Phys. Rev. A **93**, 033838 \(2016\)](#).
103. B. Q. Baragiola, R. L. Cook, A. M. Brańczyk, and J. Combes, N -photon wave packets interacting with an arbitrary quantum system, [Phys. Rev. A **86**, 013811 \(2012\)](#).
104. A. Nysteen, P. T. Kristensen, D. P. S. McCutcheon, P. Kaer, and J. Mørk, Scattering of two photons on a quantum emitter in a one-dimensional waveguide: exact dynamics and induced correlations, [New J. Phys. **17**, 023030 \(2015\)](#).
105. W. Konyk and J. Gea-Banacloche, Quantum multimode treatment of light scattering by an atom in a waveguide, [Phys. Rev. A **93**, 063807 \(2016\)](#).
106. W. Konyk and J. Gea-Banacloche, One- and two-photon scattering by two atoms in a waveguide, [Phys. Rev. **96**, 063826 \(2017\)](#).
107. O. Chumak and N. Sushkova, Operator of photon density in the phase space, [Ukr. J. Phys. **51**, 30-34 \(2012\)](#).
108. A. A. Tarasenko and A. A. Chumak, Nonequilibrium fluctuations of electrons and phonons in semiconductors, *Sov. Phys. JETP* **46**, 327 (1977).

109. T. Shi, S. Fan and C. P. Sun, Two-photon transport in a waveguide coupled to a cavity in a two-level system, [Phys. Rev. A **84**, 063803 \(2011\)](#).
110. T. Shi and S. Fan, Two-photon transport through a waveguide coupling to a whispering-gallery resonator containing an atom and photon-blockade effect, [Phys. Rev. A **87**, 063818 \(2013\)](#).
111. E. Rephaeli and S. Fan, Few-Photon Single-Atom Cavity QED With Input-Output Formalism in Fock Space, [IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. **18**, 1754 \(2012\)](#).
112. S. Xu and S. Fan, Input-output formalism for few-photon transport: A systematic treatment beyond two photons, [Phys. Rev. A **91**, 043845 \(2015\)](#).
113. T. Caneva, M. T. Manzoni, T. Shi, J. S. Douglas, J. I. Cirac, and D. E. Chang, Quantum dynamics of propagating photons with strong interactions: a generalized input-output formalism, [New J. Phys. **17**, 113001 \(2015\)](#).
114. R. Trivedi, K. Fischer, S. Xu, S. Fan, and J. Vuckovic, Few-photon scattering and emission from low-dimensional quantum systems, [Phys. Rev. B **98**, 144112 \(2018\)](#).
115. K. Kojima, H. F. Hofmann, S. Takeuchi, and K. Sasaki, Nonlinear interaction of two photons with a one-dimensional atom: Spatiotemporal quantum coherence in the emitted field, [Phys. Rev. A **68**, 013803 \(2003\)](#).
116. Z. Liao, H. Nha, and M. S. Zubairy, Dynamical theory of single-photon transport in a one-dimensional waveguide, [Phys. Rev. A **94**, 053842 \(2016\)](#).
117. Y. Wang, Y. Zhang, Q. Zhang, B. Zou, and Udo Schwingenschlogl, Dynamics of single photon transport in a one-dimensional waveguide two-point coupled with a Jaynes-Cummings system, [Sci. Rep. **6**, 33867 \(2016\)](#).
118. Q. Hu, B. Zou, and Y. Zhang, Transmission and correlation of a two-photon pulse in a one-dimensional waveguide coupled with quantum emi-

- tters, [Phys. Rev. A **97**, 033847 \(2018\)](#).
119. Y.-L. L. Fang, F. Ciccarello, and H. U. Baranger, Non-Markovian dynamics of a qubit due to single-photon scattering in a waveguide, [New J. Phys. **20**, 043035 \(2018\)](#).
 120. G. Calajó, Y.-L. L. Fang, H. U. Baranger, and F. Ciccarello, Exciting a bound state in the continuum through multi-photon scattering plus delayed quantum feedback, [Phys. Rev. Lett. **122**, 073601 \(2019\)](#).
 121. A. Roulet and V. Scarani, Solving the scattering of N photons on a two-level atom without computation, [New J. Phys. **18**, 093035 \(2016\)](#).
 122. K. M. Birnbaum, A. Boca, R. Miller, A. D. Boozer, T. E. Northup, and H. J. Kimble, Photon blockade in an optical cavity with one trapped atom, [Nature **436**, 87-90 \(2005\)](#).
 123. K. Hennessy, A. Badolato, M. Winger, D. Gerace, M. Atatüre, S. Gulde, S. Fält, E. L. Hu, and A. Imamoglu, Quantum nature of a strongly coupled single quantum dot-cavity system, [Nature **445**, 896-899 \(2007\)](#)
 124. C. Hamsen, K. N. Tolazzi, T. Wilk, and G. Rempe, Two-Photon Blockade in an Atom-Driven Cavity QED System, [Phys. Rev. Lett. **118**, 133604 \(2017\)](#).
 125. T. G. Tiecke, J. D. Thompson, N. P. de Leon, L. R. Liu, V. Vuletić, and M. D. Lukin, Nanophotonic quantum phase switch with a single atom, [Nature **508**, 241-244 \(2014\)](#).
 126. C. Sánchez Muñoz, E. del Valle, A. González Tudela, K. Müller, S. Lichtmannecker, M. Kaniber, C. Tejedor, J. J. Finley, and F. P. Laussy, Emitters of N -photon bundles, [Nat. Photon. **8**, 550 \(2014\)](#).
 127. B. Dayan, A. S. Parkins, T. Aoki, E. P. Ostby, K. J. Vahala, and H. J. Kimble, A Photon Turnstile Dynamically Regulated by One Atom, [Science **319**, 1062 \(2008\)](#).
 128. S. Schmidt and J. Houck, Circuit QED lattices: Towards quantum simulation with superconducting circuits, [Ann. Phys. **525**, 395-412 \(2013\)](#).

129. D. Oehri, M. Pletyukhov, V. Gritsev, G. Blatter, and S. Schmidt, Tunable, nonlinear Hong-Ou-Mandel interferometer, [Phys. Rev. A **91**, 033816 \(2015\)](#).
130. G. P. Berman and A. A. Chumak, Influence of external fields and environment on the dynamics of a phase-qubit-resonator system, [Phys. Rev. A **83**, 042322 \(2011\)](#).
131. P. Forn-Díaz, L. Lamata, E. Rico, J. Kono, E. Solano, Ultrastrong coupling regimes of light-matter interaction, [arxiv:1804.09275](#).
132. A. F. Kockum, A. Miranowicz, S. De Liberato, S. Savasta, and F. Nori, Ultrastrong coupling between light and matter, [Nat. Phys. Rev. **1**, 19 \(2019\)](#).
133. S. Xu, E. Rephaeli, and S. Fan, Analytic Properties of Two-Photon Scattering Matrix in Integrated Quantum Systems Determined by the Cluster Decomposition Principle, [Phys. Rev. Lett. **111**, 223602 \(2013\)](#).
134. M. V. Fedorov and N. I. Miklin, Schmidt modes and entanglement, [Cont. Phys. **55**, 94 \(2014\)](#).
135. S. Parker, S. Bose, and M. B. Plenio, Entanglement quantification and purification in continuous-variable systems, [Phys. Rev. A **61**, 032305 \(2000\)](#).
136. C. K. Law, I. A. Walmsley, and J. H. Eberly, Continuous Frequency Entanglement: Effective Finite Hilbert Space and Entropy Control, [Phys. Rev. Lett. **84**, 5304 \(2000\)](#).
137. C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu, and B. Schumacher, Concentrating partial entanglement by local operations, [Phys. Rev. A **53**, 2046 \(1996\)](#).
138. M. Trott, *Mathematica Guidebook for Symbolics* (Springer, Berlin, 2006).
139. E. T. Jaynes and F. W. Cummings, Comparison of quantum and semi-classical radiation theories with application to the beam maser, [Proc. IEEE **51**, 89 \(1963\)](#).

140. A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation, [*Phys. Rev. A* **69**, 062320 \(2004\)](#).
141. F. Mallet, F. R. Ong, A. Palacios-Laloy, F. Nguyen, P. Bertet, D. Vion, and D. Esteve, Single-shot qubit readout in circuit quantum electrodynamics, [*Nature Phys.* **5**, 791–795 \(2009\)](#).
142. T. Walter, P. Kurpiers, S. Gasparinetti, P. Magnard, A. Potočník, Y. Salathé, M. Pechal, M. Mondal, M. Oppliger, C. Eichler, and A. Wallraff, Rapid High-Fidelity Single-Shot Dispersive Readout of Superconducting Qubits, [*Phys. Rev. Appl.* **7**, 054020 \(2017\)](#).
143. T. Peronnin, D. Marković, Q. Ficheux, and B. Huard, Sequential Dispersive Measurement of a Superconducting Qubit, [*Phys. Rev. Lett.* **124**, 180502 \(2020\)](#).
144. A. Roy and M. Devoret, Quantum-limited parametric amplification with Josephson circuits in the regime of pump depletion, [*Phys. Rev. B* **98**, 045405 \(2018\)](#).
145. T.-C. Chien, O. Lanes, C. Liu, X. Cao, P. Lu, S. Motz, G. Liu, D. Pekker, and M. Hatridge, Multiparametric amplification and qubit measurement with a Kerr-free Josephson ring modulator, [*Phys. Rev. A* **101**, 042336 \(2020\)](#).
146. L. C. G. Govia, E. J. Pritchett, C. Xu, B. L. T. Plourde, M. G. Vavilov, F. K. Wilhelm, and R. McDermott, [*Phys. Rev. A* **90**, 062307 \(2014\)](#).
147. A. Sokolov, Optimal conditions for high-fidelity dispersive readout of a qubit with a photon-number-resolving detector, [*Phys. Rev. A* **93** 032323 \(2016\)](#).
148. K. Inomata, Z. Lin, K. Koshino, W. D. Oliver, J.-S. Tsai, T. Yamamoto, and Y. Nakamura, Single microwave-photon detector using an artificial Λ -type three-level system, [*Nat. Commun.* **7**, 12303 \(2016\)](#).

149. J.-C. Besse, S. Gasparinetti, M. C. Collodo, T. Walter, P. Kurpiers, M. Pechal, C. Eichler, and A. Wallraff, [Phys. Rev. X **8**, 021003 \(2018\)](#).
150. A. Opremcak, I. V. Pechenezhskiy, C. Howington, B. G. Christensen, M. A. Beck, E. Leonard, J. Suttle, C. Wilen, K. N. Nesterov, G. J. Ribeill, T. Thorbeck, F. Schlenker, M. G. Vavilov, B. L. T. Plourde, and R. McDermott, Measurement of a superconducting qubit with a microwave photon counter, [Science **361**, 1239 \(2018\)](#).
151. S. Barzanjeh, D. P. DiVincenzo, and B. M. Terhal, Dispersive qubit measurement by interferometry with parametric amplifiers, [Phys. Rev. B **90**, 134515 \(2014\)](#).
152. N. Didier, A. Kamal, W. D. Oliver, A. Blais, and A. A. Clerk, Heisenberg-Limited Qubit Read-Out with Two-Mode Squeezed Light, [Phys. Rev. Lett. **115**, 093604 \(2015\)](#).
153. Y.-F. Chen, D. Hover, S. Sendelbach, L. Maurer, S. T. Merkel, E. J. Pritchett, F. K. Wilhelm, and R. McDermott, Microwave Photon Counter Based on Josephson Junctions, [Phys. Rev. Lett. **107**, 217401 \(2011\)](#).
154. J. Gambetta, W. A. Braff, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Protocols for optimal readout of qubits using a continuous quantum nondemolition measurement, [Phys. Rev. A **76**, 012325 \(2007\)](#).
155. Q. Xie, H. Zhong, M. T. Batchelor, C. Lee, The quantum Rabi model: solution and dynamics, [J. Phys. A **50**, 113001 \(2017\)](#).
156. M. Bamba and T. Ogawa, Recipe for the Hamiltonian of system-environment coupling applicable to the ultrastrong-light-matter-interaction regime, [Phys. Rev. A **89**, 023817 \(2014\)](#).
157. F. Beaudoin, J. M. Gambetta, and A. Blais, Dissipation and ultrastrong coupling in circuit QED [Phys. Rev. A **84**, 043832 \(2011\)](#).
158. P. Forn-Díaz, J. J. García-Ripoll, B. Peropadre, J.-L. Orgiazzi, M. A. Yurtalan, R. Belyansky, C. M. Wilson, and A. Lupascu, Ultrastrong

- coupling of a single artificial atom to an electromagnetic continuum in the nonperturbative regime [Nat. Phys. **13**, 39 \(2016\)](#).
159. J. E. Johnson, E. M. Hoskinson, C. Macklin, D. H. Slichter, I. Siddiqi, and J. Clarke, Dispersive readout of a flux qubit at the single-photon level, [Phys. Rev. B **84**, 220503\(R\) \(2011\)](#).
 160. B. Fan, G. Johansson, J. Combes, G. J. Milburn, and T. M. Stace, Nonabsorbing high-efficiency counter for itinerant microwave photons, [Phys. Rev. B **90**, 035132 \(2014\)](#).
 161. G. P. Berman, A. A. Chumak, and V. I. Tsifrinovich, Dynamics of a Phase Qubit-Resonator System: Requirements for Fast Nondemolition Readout of a Phase Qubit, [J. Low Temp. Phys. **170**, 172 \(2013\)](#).
 162. B. J. Chapman, E. I. Rosenthal, J. Kerckhoff, B. A. Moores, L. R. Vale, J. A. B. Mates, G. C. Hilton, K. Lalumière, A. Blais, and K. W. Lehnert, Widely Tunable On-Chip Microwave Circulator for Superconducting Quantum Circuits, [Phys. Rev. X **7**, 041043 \(2017\)](#).
 163. A. C. Mahoney, J. I. Colless, S. J. Pauka, J. M. Hornibrook, J. D. Watson, G. C. Gardner, M. J. Manfra, A. C. Doherty, and D. J. Reilly, On-Chip Microwave Quantum Hall Circulator, [Phys. Rev. X **7**, 011007 \(2017\)](#).
 164. N. R. Bernier, L. D. Tóth, A. Koottandavida, M. A. Ioannou, D. Malz, A. Nunnenkamp, A. K. Feofanov, and T. J. Kippenberg, Nonreciprocal reconfigurable microwave optomechanical circuit, [Nat. Commun. **8**, 604 \(2017\)](#).
 165. P. Forn-Díaz, C. W. Warren, C. W. S. Chang, A. M. Vadiraj, and C. M. Wilson, On-Demand Microwave Generator of Shaped Single Photons, [Phys. Rev. Appl. **8**, 054015 \(2017\)](#).
 166. G. Oelsner and E. Il'ichev, Switching Dynamics of an Underdamped Josephson Junction Coupled to a Microwave Cavity, [J. Low Temp. Phys. **192**, 169 \(2018\)](#).

167. P. Geerlings, S. Fias, Z. Boisdenghien, and F. De Proft, Conceptual DFT: chemistry from the linear response function, [Chem. Soc. Rev.](#) **43**, 4989 (2014).
168. F. A. Bornemann, P. Nettesheim, and C. Schütte, Quantum-classical molecular dynamics as an approximation to full quantum dynamics, [J. Chem. Phys.](#) **105**, 1074 (1996).
169. J. C. Tully, Mixed quantum–classical dynamics, [Faraday Discuss.](#) **110**, 407–419 (1998).
170. C.-C. Wan and J. Schofield, Mixed quantum-classical molecular dynamics: Aspects of the multithreads algorithm, [J. Chem. Phys.](#) **113**, 7047 (2000).
171. J. E. Subotnik, A. Jain, B. Landry, A. Petit, W. Ouyang, and N. Bellonzi, Understanding the surface hopping view of electronic transitions and decoherence, [Annu. Rev. Phys. Chem.](#) **67**, 387–417 (2016).
172. A. White, S. Tretiak, and D. Mozyrsky, Coupled wave-packets for non-adiabatic molecular dynamics: A generalization of Gaussian wave-packet dynamics to multiple potential energy surfaces, [Chem. Sci.](#) **7**, 4905–4911 (2016).
173. A. Mandal, S. S. Yamijala, and P. Huo, Quasi-diabatic representation for nonadiabatic dynamics propagation, [J. Chem. Theory Comput.](#) **14**, 1828–1840 (2018).
174. L. Joubert-Doriol and A. F. Izmaylov, Variational nonadiabatic dynamics in the moving crude adiabatic representation: Further merging of nuclear dynamics and electronic structure, [J. Chem. Phys.](#) **148**, 114102 (2018).
175. R. Baskov, A. J. White, and D. Mozyrsky, Improved Ehrenfest approach to model correlated electron–nuclear dynamics, [J. Phys. Chem. Lett.](#) **10**, 433–440 (2019).
176. M. Barbatti, Nonadiabatic dynamics with trajectory surface hopping method, [WIREs Comput. Mol. Sci.](#) **1**, 620–633 (2011)

177. J. C. Tully, Molecular dynamics with electronic transitions, *J. Chem. Phys.* **93**, 1061–1071 (1990).
178. H. Shull and G. G. Hall, Atomic units, *Nature* **184**, 4698 (1959).
179. M. Baer, *Beyond Born-Oppenheimer: Electronic Nonadiabatic Coupling Terms and Conical Intersections* (Wiley-Interscience, 2006).
180. I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, 7th ed. (Pearson, 2014).
181. E. J. Heller, Time-dependent approach to semiclassical dynamics, *J. Chem. Phys.* **62**, 1544–1555 (1975).
182. P. Atkins and R. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 4th ed. (Oxford University Press, 2005).
183. E. C. G. Stueckelberg, Theory of inelastic collisions between atoms, *Helv. Phys. Acta* **5**, 369–423 (1932).
184. B. J. Schwartz, E. R. Bittner, O. V. Prezhdo, and P. J. Rossky, Quantum decoherence and the isotope effect in condensed phase nonadiabatic molecular dynamics simulations, *J. Chem. Phys.* **104**, 5942–5955 (1996).
185. H. M. Jaeger, S. Fischer, and O. V. Prezhdo, Decoherence-induced surface hopping, *J. Chem. Phys.* **137**, 22A545 (2012).
186. J. E. Subotnik, Augmented Ehrenfest dynamics yields a rate for surface hopping, *J. Chem. Phys.* **132**, 134112 (2010).
187. J. E. Subotnik and N. Shenvi, A new approach to decoherence and momentum rescaling in the surface hopping algorithm, *J. Chem. Phys.* **134**, 024105 (2011).
188. N. Shenvi, J. E. Subotnik, and W. Yang, Simultaneous-trajectory surface hopping: A parameter-free algorithm for implementing decoherence in nonadiabatic dynamics, *J. Chem. Phys.* **134**, 144102 (2011).
189. N. Shenvi and W. Yang, Achieving partial decoherence in surface hopping through phase correction, *J. Chem. Phys.* **137**, 22A528 (2012).
190. J. E. Subotnik, W. Ouyang, and B. R. Landry, Can we derive Tully’s surface-hopping algorithm from the semiclassical quantum Liouville

equation? Almost, but only with decoherence, [J. Chem. Phys. **139**, 214107 \(2013\)](#).

191. A. V. Akimov, R. Long, and O. V. Prezhdo, Coherence penalty functional: A simple method for adding decoherence in Ehrenfest dynamics, [J. Chem. Phys. **140**, 194107 \(2014\)](#).
192. A. B. U'Ren, K. Banaszek, and I. A. Walmsley, Photon engineering for quantum information processing, *Quantum Info Comput.* **3**, 480–502 (2003).

Публікації здобувача за темою дисертації

Список публікацій. Результати дисертаційної роботи представлені у 9 роботах опублікованих у провідних журналах [1–5], та як тези міжнародних конференцій [6–10]:

1. O. O. Chumak, E. V. Stolyarov, Phase-space distribution functions for photon propagation in waveguides coupled to a qubit, [Phys. Rev. A **88**, 013855 \(2013\)](#).
2. O. O. Chumak, E. V. Stolyarov, Photon distribution function for propagation of two-photon pulses in waveguide-qubit systems, [Phys. Rev. A **90**, 063832 \(2014\)](#).
3. E. V. Stolyarov, Few-photon Fock-state wave packet interacting with a cavity-atom system in a waveguide: Exact quantum state dynamics, [Phys. Rev. A **99**, 023857 \(2019\)](#).
4. A. M. Sokolov, E. V. Stolyarov, Single-photon limit of dispersive readout of a qubit with a photodetector, [Phys. Rev. A **101**, 042306 \(2020\)](#).
5. E. V. Stolyarov, A. J. White, and D. Mozyrsky, Mixed quantum–classical approach to model non-adiabatic electron–nuclear dynamics: Detailed balance and improved surface hopping method, [J. Chem. Phys. **153**, 074116 \(2020\)](#).
6. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Operator of photon phase-space density for optical pulse propagation in nonlinear optical fibers, International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics ICYS LTP2012 (14–18 May 2012, Kharkiv, Ukraine), Conference programme and Abstracts book, p. 112.

7. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Evolution of single-photon pulses in one-dimensional optical waveguide coupled to a single quantum impurity, 13-th International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO2012 (25–28 October 2012, Kyiv, Ukraine), Book of abstracts, p. 118.
8. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Evolution of single-photon pulses in one-dimensional photonic-crystal waveguide with quantum impurity, IV Young Scientists Conference Modern Problems of Theoretical Physics (23–26 October 2012, Kyiv, Ukraine), Program & Abstracts Book, p. 91.
9. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, The effect of quantum impurity on propagation of single-photon pulses through one-dimensional optical waveguide, XIII Kharkiv Young Scientists Conference on Radiophysics, Electronics, Photonics and Biophysics (4–7 Decemeber 2012, Kharkiv, Ukraine), Conference Proceedings CD-ROM.
10. E. V. Stolyarov, O. O. Chumak, Phase-space evolution of coherent-state optical pulses in a one-dimensional waveguide coupled to a qubit, IV International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics ICYS LTP2013 (3–7 June 2013, Kharkiv, Ukraine), Abstracts book, p. 69.

Апробація результатів дисертації. Матеріали роботи були представлені на наукових семінарах відділу теоретичної фізики Інституту фізики НАН України, 39-й Підсумковій науковій конференції Інституту фізики НАН України (2014 р.), та міжнародних конференціях:

- International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics (ICYS LTP2012), 14–18 May 2012, Kharkiv, Ukraine;
- 13-th International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science (SPO2012), 25–28 October 2012, Kyiv, Ukraine);

- 3-rd Young Scientists Conference Modern Problems of Theoretical Physics, 23–26 October 2012, Kyiv, Ukraine;
- 13-th Kharkiv Young Scientists Conference on Radiophysics, Electronics, Photonics and Biophysics, 4–7 Decemeber 2012, Kharkiv, Ukraine;
- 3-rd International Conference for Young Scientists Low Temperature Physics (ICYS LTP2013), 3–7 June 2013, Kharkiv, Ukraine;
- International School & Conference on Nanoscience and Quantum Transport (nanoQT-2016), 8–14 October 2016, Kyiv, Ukraine.
- APS March Meeting 2020, 2–6 March 2020, Denver, USA.

Подяки

Насамперед, хочу висловити глибоку вдячність своїй сім'ї за підтримку та віру в мене, без якої ця робота навряд чи була би завершена. Щиро дякую моєму науковому керівнику Олександру Олександровичу Чумаку за терпіння, цінні поради та всебічне сприяння моєму професійному зростанню. Також дякую всім співробітникам відділу теоретичної фізики, а особливо Андрію Соколову, Сергію Лук'янцю, Андрію Семенову, Олександру Ключніченку, та Роману Баськову, за плідні дискусії на різноманітні наукові теми. Особливу подяку висловлюю Дімі Мозирському за запрошення до *Los Alamos National Laboratory*. Робота в *LANL* стала для мене цінним професійним та життєвим досвідом.