

НЕРАВНОВЕСНАЯ КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА НИЗКОРАЗМЕРНОЙ СПИНОВОЙ СИСТЕМЫ

Л. А. Сюракшина¹, В. Ю. Юшанхай

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Динамика в режиме квантового «закаливания» одномерной спиновой ($s = 1/2$) XXZ-модели исследована с помощью программных средств Qiskit и LindbladMPO на классическом компьютере. Количественное описание временного поведения локальных намагниченностей и спиновых корреляционных функций предлагается рассматривать как стандарт для сравнительного анализа с аналогичными результатами, ранее полученными на существующих шумящих среднemasштабных квантовых (NISQ) компьютерах. Квантовое «закаливание» спиновой системы создается в начальный момент времени, $t = 0$, быстрым (неадиабатическим) изменением параметра спинового гамильтониана. Последующая, при $t > 0$, временная эволюция редуцированной матрицы плотности $\rho(t)$ прослежена в случае изолированной системы из решений квантового уравнения Лиувилля и его обобщения в форме уравнения Линдблада для открытой системы, взаимодействующей с окружением. В открытой системе процессы диссипации вызваны влиянием на нее флуктуирующих полей окружения.

The dynamics in the quantum “quenching” regime of the one-dimensional spin ($s = 1/2$) XXZ model is investigated on a classical computer using the Qiskit and LindbladMPO software. Quantitative description of the time behavior of local magnetizations and spin correlation functions is proposed to be considered as a standard for comparative analysis with similar results previously obtained on existing noisy intermediate-scale quantum (NISQ) computers. Quantum “quenching” of the spin system is created at the initial time, $t = 0$, by an abrupt (nonadiabatic) change of a parameter in the spin Hamiltonian. The subsequent, at $t > 0$, time evolution of the reduced density matrix $\rho(t)$ of the system is traced from solutions of the quantum Liouville equation, in the case of an isolated system, and its generalization in the form of the Lindblad equation, for an open system interacting with the environment. In the case of an open quantum system, dissipation processes are caused by the influence of fluctuating environmental fields on the spin system.

PACS: 75.10.Pq; 05.10.–a; 03.65.Yz

ВВЕДЕНИЕ

В ряду задач, перспективных для решения с применением квантовых компьютеров, рассматривается неравновесная динамика многочастичных систем. К настоящему времени созданные с этой целью квантовые алгоритмы можно протестировать только на шумящих среднemasштабных квантовых (NISQ) вычислительных устройствах [1]. Обсуждению первых работ в этой области исследований посвящен обзор [2], где

¹E-mail: siuraksh@jinr.ru

представлены результаты применения NISQ-компьютера с небольшим числом сверхпроводящих кубитов для моделирования динамики одномерной спиновой ($s = 1/2$) XXZ-модели в режиме квантового «закаливания». Значение полученных результатов при этом ограничено быстрым накоплением ошибок вследствие относительно малого времени когерентности, характерного для NISQ-устройств. Возникает задача отделить регулярное поведение, обусловленное внутренней динамикой изучаемой спиновой системы на больших временах эволюции, от эффектов шума.

Ввиду этой перспективы в данной работе выполнено численное исследование неравновесной динамики в режиме квантового «закаливания» для одномерной спиновой XXZ-модели

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1} \{ \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + g \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \}. \quad (1)$$

Положительное значение обменной константы J отвечает антиферромагнитному (АФМ) взаимодействию. Параметр изинговской анизотропии g меняется в широких пределах $g \geq 0$. Исследование выполнено на классическом компьютере с использованием программных продуктов, часть из которых, представленных на платформах Qiskit [3] и LindbladMPO [4], вдохновлена квантовыми алгоритмами. Полученные результаты предлагается рассматривать как единую основу для выявления как фундаментальных черт, так и особенностей неравновесной динамики в небольшой квантовой системе с целью их количественного сравнения с результатами а) упомянутых выше тестовых вычислений на квантовом компьютере и б) аналогового тестирования спиновой динамики с помощью ультрахолодных атомов в оптических решетках.

1. МЕТОД РАСЧЕТА

В режиме «закаливания» первоначально ($t < 0$) спиновая система, или p -кубитный регистр квантового компьютера, готовится в основном состоянии $|\psi_0\rangle$ изинговского гамильтониана $\mathcal{H}_0 = g \sum_{i=1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$ с АФМ неелевским упорядочением вдоль оси легкого намагничивания Z . В момент $t = 0$ включаются «поперечные» взаимодействия в (1), генерирующие перевороты спиновых пар на соседних узлах, так что при $t > 0$ временная эволюция системы регулируется полным гамильтонианом (1).

На квантовом вычислительном устройстве эволюция состояния спиновой системы реализуется посредством квантовой схемы, кодирующей унитарное преобразование $U(t) = \exp(-i\mathcal{H}t)$ как упорядоченную совокупность последовательно выполняемых логических операций (гейтов) над текущим состоянием кубитов. В нашем случае описание эволюции системы основано на временной зависимости матрицы плотности $\hat{\rho}$, которое, в отсутствие взаимодействий с окружением, представлено решением квантового уравнения Лиувилля $\partial\hat{\rho}/\partial t = -i[\mathcal{H}, \hat{\rho}]$.

Эффекты шума в квантовом компьютере в нашем подходе учтены добавлением в правую часть уравнения Лиувилля оператора $D[\rho(t)]$ диссипации, вызванной влиянием на спины стохастических полей окружения. Решение уравнения Линдблада, полученное в результате такого обобщения, позволяет изучить, как эффекты потери когерентности влияют на неравновесную спиновую динамику.

Исследована цепочка из $N = 8$ спинов с периодическими граничными условиями. Основными наблюдаемыми выбраны АФМ-параметр порядка $m_s(t) = N^{-1} \sum_i (-1)^i \times \langle \sigma_i^z(t) \rangle$ и продольная корреляционная функция $K^{zz}(l, t) = \langle \sigma_{i+l}^z(t) \sigma_i^z(t) \rangle$, определенная здесь с учетом трансляционной инвариантности. Фиксируя параметр анизотропии g в двух различных областях значений, $0 \leq g < 1$ и $1 < g$, мы исследуем, как начальное состояние трансформируется в различные динамические состояния, и анализируем их свойства. Ожидаемое различие обусловлено ролью изинговской анизотропии, величина которой контролирует квантовый (при $T = 0$) переход при $g = 1$ в системе от неупорядоченной металлической фазы «латтенжеровской жидкости» ($0 \leq g < 1$) к АФМ упорядоченной неелевской фазе ($1 < g$) в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$ [5].

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В металлической фазе свободных ферми-частиц, $g = 0$, динамика $m_s(t)$ представлена суперпозицией колебаний с небольшим набором частот, кратных J , и сохраняющимися в пределе больших времен амплитудами. Демонстрируя те же незатухающие осцилляции во времени, функция $K^{zz}(l, t)$ указывает также на устойчивость пространственных неелевских корреляций, а именно, АФМ-типа для спина в разных подрешетках (l нечетно) и ФМ — в одинаковых подрешетках (l четно). Устойчивость здесь означает (см. ниже) ненулевые усредненные по времени значения $K^{zz}(l, t)$. Сравнивая эти результаты с динамической картиной, рис. 1, а, б, для взаимодействующих фермионов, $g = 0, 4$, отметим следующие изменения (за единицу времени принято $[t] = J^{-1}$): 1) на начальном этапе, до $t \sim 5$, амплитуда осцилляций АФМ-параметра порядка $m_s(t)$ падает в три раза и далее сохраняется на больших временах эволюции вплоть до изученного предела $t < 800$; 2) АФМ- и ФМ-корреляции устойчивы, но ослаблены приблизительно в два раза. Сходное поведение и тенденции в динамической картине сохраняются при дальнейшем увеличении

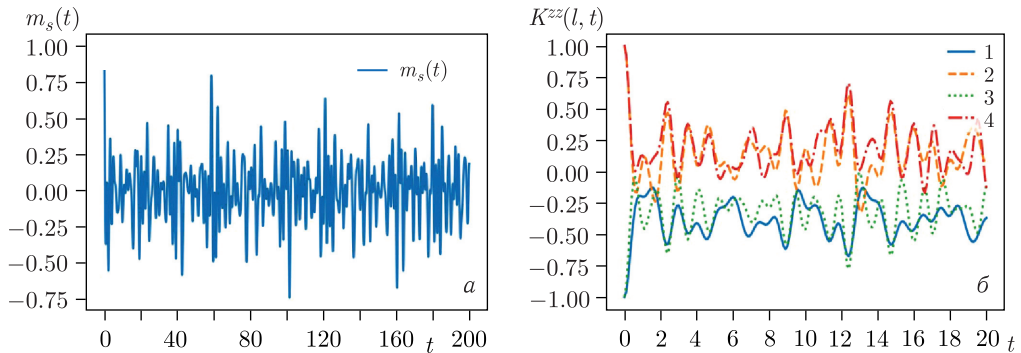


Рис. 1. Эволюция системы для $g = 0,4$: а) АФМ-параметр порядка $m_s(t)$; б) корреляционная функция $K^{zz}(l, t)$. Зависимости пронумерованы индексом l корреляторов $\langle \sigma_i^z(t) \sigma_0^z(t) \rangle$. За единицу времени принято $[t] = J^{-1}$

параметра анизотропии g , вплоть до $g = 1 - \delta$. Узкая критическая δ -область вблизи $g = 1$ в данной работе не рассматривается.

Разлагая среднее от оператора, например $\hat{m}_s$, в базисе собственных состояний гамильтониана, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, получаем, что наряду с постоянным вкладом в среднем от наблюдаемого всегда присутствуют осциллирующие вклады:

$$\langle \hat{m}_s(t) \rangle = \text{Tr } \hat{m}_s \hat{\rho}(t) = \sum_n \rho_{nn}^{\psi_0} \langle n | \hat{m}_s | n \rangle + \sum_{k \neq n} \rho_{kn}^{\psi_0} \langle n | \hat{m}_s | k \rangle e^{i(E_n - E_k)t}, \quad (2)$$

где $\rho_{kn}^{\psi_0} \equiv \langle k | \psi_0 \rangle \langle \psi_0 | n \rangle$. Это означает, что в конечной квантовой системе, полностью изолированной от окружения, на больших временах абсолютное равновесие, т. е. постоянство средних от наблюдаемых не достигается. Согласно концепции фон Неймана равновесие следует трактовать в смысле «среднего по времени» (см. обзор [6]), например:

$$\overline{m_s(t)} = \frac{1}{t} \int_0^t dt' m_s(t') \xrightarrow{(Jt) > (Jt)_{\text{relax}}} \overline{m_s}, \quad (3)$$

где время релаксации t_{relax} такое, что для $t > t_{\text{relax}}$ результат операции усреднения от времени t не зависит, а полученное значение наблюдаемой можно рассматривать как равновесное. В нашем случае $\overline{m_s} = 0$, равновесные величины $\overline{K^{zz}(l, t)}$ принимают конечные значения для времен релаксации: $(Jt)_{\text{relax}} \leq 5$ для $g < 1$ и, как обсуждено ниже, $(Jt)_{\text{relax}} \gg 1$ для $g > 1$.

При смещении в область $g > 1$ имеет место переход к иному динамическому поведению, которое отвечает режиму «закаливания» в изинг-упорядоченной фазе. Масштаб периода осцилляций средних от спиновых операторов, измеряемый в области $g < 1$ единицами безразмерного времени $[t]$, теперь вырос на порядки величин и далее увеличивается с ростом $g > 1$. Вычисленная ковариационная функция $G^{zz}(l, t) = K^{zz}(l, t) - \langle \sigma_{i+l}^z(t) \rangle \langle \sigma_i^z(t) \rangle$ демонстрирует (рис. 2) строго коррелированное осцилляторное движение спинов в двух подрешетках.

Потерю когерентности (дефазировку) колебательных движений в квантовой системе, вызванную шумовыми процессами в окружающей среде, описывает уравнение Линдблада [7]. Окружение генерирует в спиновой системе флуктуирующее во

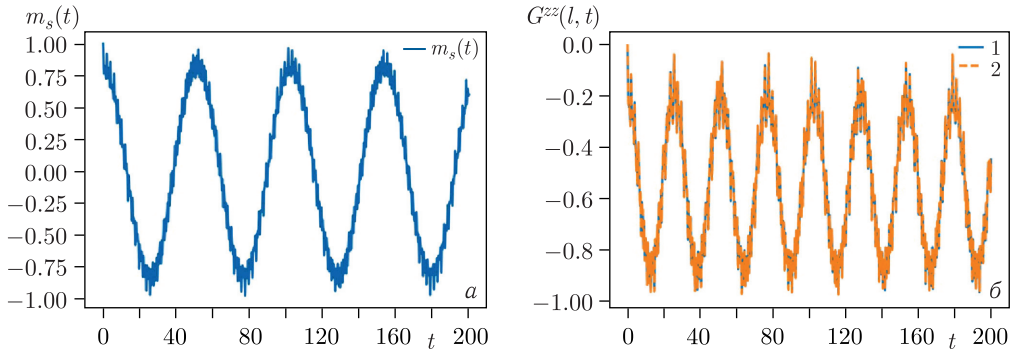


Рис. 2. Эволюция системы для $g = 4$: а) АФМ-параметр порядка $m_s(t)$; б) ковариационная функция $G^{zz}(l, t)$ для $l = 1, 2$

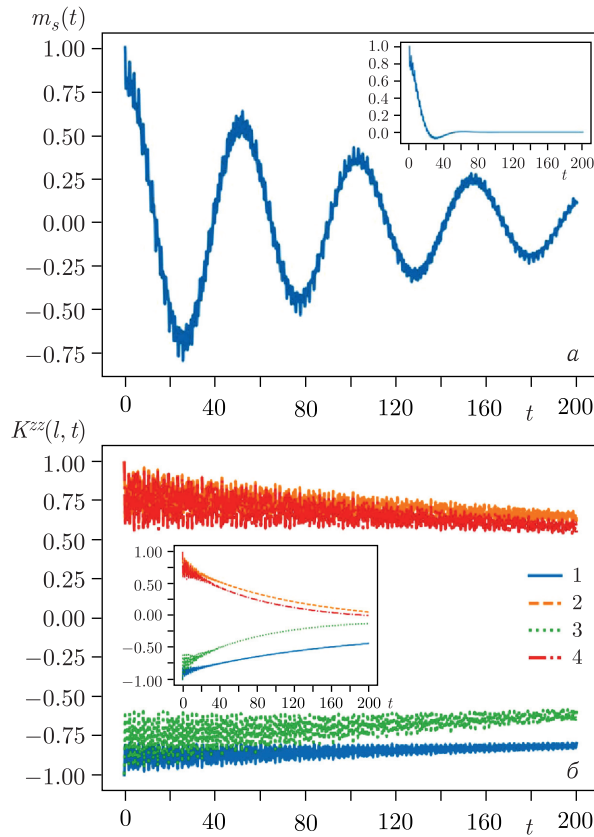


Рис. 3. Неунитарная эволюция системы ($g = 4$) под воздействием шумов окружения. Результаты представлены на основном поле для скорости диссипации $\gamma = 0,001$ и во вставке для $\gamma = 0,01$: а) АФМ-параметр порядка $m_s(t)$; б) корреляционная функция $K^{zz}(l, t)$

времени стохастическое поле, влияние которого в марковском пределе учитывается включением в уравнение оператора диссипации $D[\rho] = \gamma \sum_i (\sigma_i^z \rho \sigma_i^z - \rho)$. Уравнение Линдблада решено для двух значений скорости диссипации: $\gamma = 0,001$ и $\gamma = 0,01$, которая определяется амплитудой и частотой шумового процесса, вызывающего дефазировку. Из результатов, представленных на рис. 3 для $g = 4$, видно, как временное поведение с относительно медленной потерей когерентности при $\gamma = 0,001$ сменяется на быструю при $\gamma = 0,01$. На больших временах в результате полной дефазировки средние значения наблюдаемых сходятся к постоянным равновесным значениям, совпадающим с усредненными по времени значениями $m_s(t)$ и $K^{zz}(l, t)$ в изолированной системе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено численное исследование неравновесной квантовой динамики на примере конечной ($N = 8$) спиновой ($s = 1/2$) одномерной XXZ-модели. В дополнение к изложенным выше результатам отметим также, что обнаруженный кроссовер,

а именно, значительное различие динамического поведения в двух областях значений параметра анизотропии, $g < 1$ и $g > 1$, следует рассматривать в рамках гипотезы [5] динамического фазового перехода в XXZ-модели при $g = 1$ и $N \rightarrow \infty$. Проверка гипотезы на пути увеличения размера N спиновой системы может быть осуществлена с применением а) цифровых программируемых NISQ-компьютеров с числом кубитов $N \sim 100$, б) аналоговых квантовых симуляторов на основе ультрахолодных атомов в оптических решетках и в) развитого здесь подхода и стандартных вычислительных устройств.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Preskill J.* Quantum Computing in the NISQ Era and Beyond // *Quantum*. 2018. V. 2. P. 79.
2. *Oftelie L. B., Urbanek M., Metcalf M. et al.* Simulating Quantum Materials with Digital Quantum Computers // *Quantum Sci. Technol.* 2021. V. 6, No. 4. P. 043002.
3. *Javadi-Abhari A., Treinish M., Krsulich K. et al.* Quantum Computing with Qiskit // *Quantum*. arXiv:2405.08810. 2024. P. 1–19.
4. *Landa H., Misguich G.* Nonlocal Correlations in Noisy Multiqubit Systems Simulated Using Matrix Product Operators // *SciPost Phys. Core*. 2023. V. 6. P. 037.
5. *Barmettler P., Punk M., Gritsev V. et al.* Quantum Quenches in the Anisotropic Spin-1/2 Heisenberg Chain: Different Approaches to Many-Body Dynamics Far from Equilibrium // *New J. Phys.* 2010. V. 12. P. 055017.
6. *Yukalov V. I.* Equilibration and Thermalization in Finite Quantum Systems // *Laser Phys. Lett.* 2011. V. 8, No. 7. P. 485–507.
7. *Campaioli F., Cole J. H., Hapuarachchi H.* Quantum Master Equations: Tips and Tricks for Quantum Optics, Quantum Computing, and Beyond // *PRX Quantum*. 2024. V. 5, No. 2. P. 020202.

Получено 31 октября 2024 г.