

К. А. Валиев, А. А. Кокин

**КВАНТОВЫЕ
КОМПЬЮТЕРЫ:
НАДЕЖДЫ И РЕАЛЬНОСТЬ**

Научно-издательский центр
«Регулярная и хаотическая динамика»

2000

Валиев К. А., Кокин А. А.

Квантовые компьютеры: надежды и реальность. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001, 352 стр.

Предлагаемая монография представляет собой первую отечественную попытку систематического изложения как математических, так и физических основ квантовых вычислений и принципов работы квантовых компьютеров. В ней определены необходимые понятия квантовой теории информации, описаны основные квантовые логические операции и квантовые алгоритмы; обсуждаются ограничения, препятствующие полномасштабным квантовым вычислениям, и возможные пути их преодоления; детально рассматриваются отдельные варианты уже реализованных прототипов квантовых компьютеров и пока нереализованных предложений, а также анализируются их преимущества, недостатки и проблемы реализации. В книгу включены некоторые результаты, полученные авторами.

Содержание книги отражает опыт исследований, накопленный на 2000-й год, и отраженный, главным образом, в зарубежной периодической литературе и Интернете.

Книга представляет интерес для широкого круга специалистов — математиков, физиков и инженеров-разработчиков вычислительных систем. Она будет также полезна преподавателям, аспирантам и студентам старших курсов соответствующих специальностей.

Издание осуществлено при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
по проекту № 01-02-30047

ISBN 5-93972-024-2

© НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001

<http://red.ru>

Содержание

Предисловие	9
Введение	12
Глава 1. Преобразование информации в квантовых системах	20
1.1. Необратимые и обратимые классические информационные процессы	20
1.1.1. Информационная энтропия Шеннона. Количество информации	20
1.1.2. Термодинамический предел для энергии переключения логического элемента	23
1.1.3. Пропускная способность информационного канала. Энергетическая цена передаваемого бита информации	23
1.1.4. Обратимые логические операции и обратимые вентили	25
1.2. Основные понятия квантовой теории информации	29
1.2.1. Оператор (матрица) плотности. Чистое и смешанное состояние	29
1.2.2. Энтропия фон Неймана	31
1.2.3. Взаимная информация. Информация Холево	33
1.3. Квантовые двухуровневые информационные ячейки-кубиты	35
1.4. Запутывание квантовых состояний	39
1.4.1. Чистые состояния	39
1.4.2. Смешанные состояния	45
1.5. Декогерентизация	50
1.5.1. Основные понятия	50
1.5.2. Точно решаемая квантовая модель декогерентизации	55
Литература	61

ГЛАВА 2. Квантовые вычисления	66
2.1. Основные квантовые логические операции	66
2.2. Некоторые квантовые алгоритмы	70
2.2.1. Формирование запутанного состояния	70
2.2.2. Задача Дойча	71
2.2.3. Квантовая телепортация	74
2.2.4. Клонирование сигнального состояния	79
2.2.5. Квантовое фурье-преобразование	81
2.2.6. Алгоритм факторизации Шора	86
2.2.7. Алгоритм Гровера поиска в базе данных	92
2.3. Помехоустойчивость квантовых вычислительных процес- сов	95
2.3.1. Коррекция квантовых ошибок путем кодирования сигнала	95
2.3.2. Универсальные помехоустойчивые квантовые вы- числения	99
2.3.3. Помехоустойчивые квантовые вентили с телепортацией квантовых состояний	103
Приложение П.2. Квантовое вейвлет-преобразование	104
П.2.1. Некоторые общие сведения	104
П.2.2. Построение ортонормированного вейвлет-базиса	106
П.2.3. Дискретное вейвлет-преобразование	108
П.2.4. Вейвлет-преобразование Хаара	111
П.2.5. Квантовое вейвлет-преобразование как альтерна- тива фурье-преобразованию в алгоритме фактори- зации Шора	114
Литература	116
ГЛАВА 3. Квантовый компьютер на ионах в ловушках	121
3.1. Основные требования, выполнение которых необходи- мо для реализации любого полномасштабного квантового компьютера	121
3.2. Ловушки для ионов и нейтральных атомов	123
3.2.1. Электромагнитная ловушка Пеннинга	123
3.2.2. Ловушка Пауля	124
3.2.3. Ловушки для нейтральных атомов. Оптические ре- шетки	132

3.3. Лазерное охлаждение ионов	134
3.4. Колебательное движение ионов в линейном ионном кристалле	139
3.5. Внутренние кубиты на ионах в ловушке	143
3.6. Взаимодействие между кубитами через посредство фононного кубита. Двухкубитовые операции	146
3.7. Считывание результатов вычислений в квантовом компьютере на ионах в ловушке	150
3.8. Лазерные системы квантового компьютера на ионах в ловушке	151
3.9. Оптическая система адресации к отдельным ионам в кристалле	153
3.10. Декогерентизация состояний в квантовом компьютере на ионах в ловушке	156
3.10.1. Декогерентизация состояний, обусловленная не идеальностью управления кубитами с помощью лазерных импульсов	158
3.10.2. Декогерентизация состояний внутренних кубитов на ионах в ловушке	159
3.10.3. Декогерентизация состояний колебательного кубита на ионах в ловушке	161
3.11. Точность воспроизведения квантовых логических операций и аккумуляирование ошибок при квантовых вычислениях	162
3.12. Основные выводы	165
Литература	168

Глава 4. Жидкостные ядерные магнитно-резонансные (ЯМР) квантовые компьютеры	171
4.1. Общие принципы	171
4.2. Матрица плотности квазичистого состояния	174
4.2.1. Переход от смешанного равновесного состояния к квазичистому состоянию	174
4.2.2. Приготовление квазичистого начального состояния методом логической метки	177
4.2.3. Приготовление квазичистого состояния методом пространственного усреднения	180

4.2.4.	Приготовление квазичистого состояния методом временного усреднения	180
4.3.	Формирование кубитовых вентилях методами ЯМР . . .	182
4.3.1.	Однокубитовые кубитовые операции	182
4.3.2.	Двухкубитовый вентиль CNOT	186
4.3.3.	Исключение влияния паразитных естественных процессов в двухкубитовых операциях	191
4.4.	Экспериментальная реализация кубитовых вычислений .	194
4.4.1.	Примеры реализации двухкубитовой операции CNOT	195
4.4.2.	Реализация алгоритмов Дойча – Джозса и Гровера на двухкубитовом компьютере	199
4.4.3.	Кубитовые операции в системах с более, чем двумя кубитами	203
4.5.	Подавление декогерентизации в ЯМР кубитовых компьютерах	207
4.5.1.	Метод контролируемого усреднения	208
4.5.2.	Модель последовательности идеальных мгновенных импульсов	211
4.6.	Перспективы ансамблевых жидкостных ЯМР кубитовых компьютеров	214
Приложение П.4	219
П.4.1.	Развязка с зеемановскими взаимодействиями с помощью неселективного импульса	219
П.4.2.	Пример двухкубитового оператора, осуществляемого двумя неселективными импульсами	220
П.4.3.	Элементарные сведения о геометрической фазе Берри	222
Литература	223
ГЛАВА 5. Твердотельные ЯМР кубитовые компьютеры . .		228
5.1.	Полупроводниковый ЯМР кубитовый компьютер (модель Кейна)	228
5.1.1.	Основные требования к полупроводниковой структуре	228
5.1.2.	Электрон-ядерная спиновая система донорного атома в магнитном поле	231

5.1.3. Электронная структура и постоянная сверхтонкого взаимодействия донорного атома в электрическом поле затвора	234
5.1.4. Электрон-ядерная спиновая система двух соседних донорных атомов	240
5.1.5. Измерение состояний отдельных ядерных спинов в полупроводниковом ЯМР квантовом компьютере	249
5.2. Полупроводниковый ЯМР квантовый компьютер, контролируемый СВЧ и лазерными импульсами	254
5.3. Ансамблевые варианты твердотельных ЯМР квантовых компьютеров	259
5.4. Квантовые компьютеры с архитектурой клеточных автоматов	267
5.4.1. Квантовые автоматы на трех и двух типах двухуровневых элементов	267
5.4.2. ЯМР квантовый клеточный автомат на основе антиферромагнитной структуры	270
Приложение П.5. Двухкубитовая операция CNOT в ЯМР квантовом клеточном автомате	280
Литература	282

Глава 6. Твердотельные квантовые компьютеры на квантовых точках	286
6.1. Клеточные автоматы на ячейках из квантовых точек с зарядовой поляризацией	286
6.2. Клеточные автоматы на квантовых точках с электронной спиновой поляризацией	293
6.3. Квантовые компьютеры на квантовых точках с электронными зарядовыми (орбитальными) состояниями	296
6.3.1. Кубиты на паре квантовых точек с зарядовыми состояниями	296
6.3.2. Кубит на одной квантовой точке, разделенной управляемым потенциальным барьером	305
6.4. Квантовые компьютеры на квантовых точках с электронными спиновыми состояниями	306
6.4.1. Квантовые точки с электронными спинами, связанными обменным взаимодействием	306

6.4.2. Квантовые точки с электронными спинами в электродинамическом резонаторе	313
6.5. Квантовые компьютеры на квантовых точках с несколькими электронными и одним ядерным спином	318
Литература	323
Глава 7. Квантовые компьютеры на сверхпроводниковых элементах	326
7.1. Основные типы сверхпроводниковых кубитов	326
7.1.1. Кубиты на зарядовых состояниях куперовских пар в сверхпроводниковых островках	327
7.1.2. Кубиты на флюксонных состояниях в сверхпроводящих квантовых интерференционных приборах	330
7.1.3. Вариант кубита на переходах Джозефсона в высокотемпературных сверхпроводниках	332
7.2. Квантовый компьютер на сверхпроводниковых островках с переходами Джозефсона	334
7.3. Диссипация и декогерентизация в сверхпроводниковых устройствах на обычных сверхпроводниках	336
7.4. Экспериментальная реализация сверхпроводникового кубита	337
Литература	339
Заключение	341
Предметный указатель	346

ПРЕДИСЛОВИЕ

14 декабря 1900 года, когда будущий нобелевский лауреат немецкий физик Макс Планк доложил на заседании Берлинского физического общества о фундаментальном открытии квантовых свойств теплового излучения, считается днем рождения квантовой физики. В 2000 году отмечается ее 100-летний юбилей.

Теоретические и экспериментальные исследования квантовых явлений привели к существенным изменениям наших представлений о Природе вообще и о твердом теле, в частности. Квантовые явления находят применение в самых разных областях современных науки и техники. В последнее время, в связи с открывшимися возможностями квантовых вычислительных процессов и реальными перспективами их реализации, обещающих грандиозный прорыв в вычислительной технике, снова стал бурно возрастать интерес к квантовым явлениям и процессам.

Предлагаемая монография представляет собой первую отечественную попытку систематического изложения как математических, так и физических основ квантовых вычислений и принципов работы квантовых компьютеров. В ней приводятся необходимые понятия квантовой теории информации, описываются основные квантовые логические операции и квантовые алгоритмы; обсуждаются ограничения, появляющиеся на пути к полномасштабным квантовым вычислениям, и возможные пути их преодоления; детально рассматриваются отдельные варианты уже реализованных прототипов квантовых компьютеров и пока нереализованных предложений, а также анализируются их преимущества, недостатки и проблемы реализации.

Содержание книги отражает опыт исследований, накопленный по 2000 год и отраженный, главным образом, в зарубежной периодической литературе и Интернете. В нее включены и некоторые оригинальные результаты.

При написании книги мы старались, с одной стороны, охватить возможно больший объем информации, а с другой стороны, сохранить необходимую краткость изложения. Для того чтобы можно было ориентироваться в том бурном потоке информации и получить достаточно полное представление о состоянии новой науки о квантовых вычислениях и квантовых компьютерах, определенный минимум знаний в области квантовой теории совершенно необходим. Поэтому нам пришлось обращаться к понятиям и методам, которые развивались в течение всего века в квантовой физике и которые требовали для их изложения и применения определенного теоретического аппарата. В предлагаемой книге мы попытались в какой-то мере проклассифицировать собранную информацию и дать ее такое последовательное и достаточно подробное изложение, которое на первых порах не потребовало бы обращения к первоисточникам. Тем не менее каждая глава сопровождается подробной библиографией, заканчивающейся 2000 годом, которой можно воспользоваться для изучения деталей, касающихся рассматриваемых вопросов. Это особенно существенно в связи с тем, что отечественная литература по квантовым вычислениям и компьютерам пока еще очень бедна. В тексте дается английская транскрипция тех терминов, которые либо вообще не имеют еще русских эквивалентов, либо уже встречаются в русской научной литературе, но их русские эквиваленты еще окончательно не устоялись. Фамилии иностранных авторов также сопровождаются соответствующей транскрипцией.

Естественно, что из всего бурного потока информации нам удалось охватить только ту часть, которая показалась нам наиболее интересной. При этом мы не избегали и тех работ, которые содержали новые интересные идеи, но имели характер еще не достаточно проработанных проектов, поскольку полагали, что знакомство с такими идеями может послужить определенным стимулом для появления других более глубоких исследований и разработок.

Существенную помощь в процессе написания книги оказал нам постоянно действующий в Физико-технологическом институте РАН семинар по физике квантовых компьютеров, руководимый К. А. Валиевым, на котором детально обсуждались многие затронутые в книге вопросы.

Мы надеемся, что книга будет полезной для широкого круга специалистов — математиков, физиков и инженеров-разработчиков вычислительных систем, а также преподавателям, аспирантам и студентам старших курсов соответствующих специальностей. От ее читателей

предполагается знание основ статистической физики, квантовой механики, физики полупроводников в рамках обычных программ для физических и физико-технических специальностей.

Работа была распределена следующим образом. Введение и глава 3 были написаны К. А. Валиевым, главы 2 и 5 — А. А. Кокиным, а остальные совместно.

Мы выражаем благодарность участникам семинара по физике квантовых компьютеров за плодотворное обсуждение сообщений, с которыми выступали авторы, научно-издательскому центру «Регулярная и хаотическая динамика» в лице А. В. Борисова, принявшему к опубликованию книгу, Министерству промышленности, науки и технологий РФ за поддержку проводимых исследований, а также В. А. Кокину за исключительно большую техническую помощь в подготовке электронного варианта рукописи. Без этой помощи книга еще долго не увидела бы свет.

К. А. Валиев, А. А. Кокин
г. Москва

Физико-технологический институт
Российской Академии Наук

ВВЕДЕНИЕ

«... nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical ...».

R. Feynman

Современные цифровые электронные компьютеры базируются на полупроводниковой технологии. Хотя принцип их работы не может быть понят без привлечения таких квантовых представлений, как зонная структура полупроводника, туннелирование носителей заряда через барьер и некоторых других, для описания процесса преобразования информации в них обычно достаточно использовать классические представления о макроскопических токах электронов и дырок в полупроводнике. Такой компьютер можно рассматривать как электрическую схему, включающую совокупность макроскопических базисных нелинейных элементов — *классических битов с только двумя возможными логическими булевыми состояниями «0» и «1»* (binary digits \equiv bits), логических элементов-вентилей и соединений между ними. Логические состояния битов могут быть представлены, например, двумя значениями тока в определенном проводнике или электрического потенциала на нем, рассматриваемых как макроскопические классические некогерентные величины. Универсальные цифровые компьютеры, в которых логические операции производятся с классическими булевыми состояниями, отображающими одну совокупность состояний «0» и «1» в другую совокупность булевых состояний, принято называть *классическими*.

Вычисление в любом компьютере представляет собой процесс, в ходе которого происходит определенное для каждой логической операции нелинейное взаимодействие потоков информации друг с другом и их преобразование. В зависимости от типа выполняемой операции определенным образом изменяется состояние логического элемента, а поступающая на его входы информация либо передается далее, либо как-то преобразуется (инвертируется, записывается, стирается и т. д.). Соот-

ветствующие процессы происходят на физическом уровне с носителями информации — сигналами.

Беспрецедентные успехи в развитии полупроводниковой микроэлектроники, непрерывно продолжающиеся начиная с изобретения первого планарного транзистора в 1959 году, наиболее наглядно выражаются так называемым «законом Мура» (G. Moore), согласно которому число транзисторов в кристалле одной интегральной схемы (ИС) в течение первых 15 лет удваивалось каждый год, а затем и до сих пор такое удвоение происходит за 1,5 года. По экспоненциальному закону уменьшаются со временем и характерные размеры элементов ИС (в два раза за каждые 1,5 года).

Если самые первые кремниевые ИС изготавливались с минимальными размерами элементов в плоскости кристалла в несколько десятков микрон, то современная полупроводниковая технология на основе использования оптической, электронной и рентгеновской литографии, сфокусированных ионных пучков позволяет в ряде случаев получать структуры с горизонтальными размерами менее 100 нм, а методы молекулярной эпитаксии обеспечивают уверенный контроль по составу и толщине слоев в 1–10 нм. В конце 1999 года появилось сообщение о создании инженерами Калифорнийского университета в Беркли на островке кремния в форме плавника МОП-транзистора с рекордно малой длиной затвора в 18 нм. В перспективе возможно и дальнейшее продвижение в область малых горизонтальных размеров вплоть до структур, построенных из отдельных атомов или молекул на основе новых методов так называемой *нанотехнологии* с использованием, в частности, сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) в совокупности с методами химического осаждения, применением химического синтеза и методов молекулярной биологии. Эти методы позволили приступить к созданию устройств *нанозлектроники* и *молекулярной электроники*. При этом компьютеры остаются классическими, поскольку, несмотря на то, что в отдельных элементах существенную роль начинают играть сугубо квантовые эффекты, такие как размерное квантование в низкоразмерных структурах, баллистический режим переноса носителей, кулоновская блокада, интерференция электронных волн в квантовых нитях, они по-прежнему обрабатывают информацию, передаваемую некогерентными сигналами, носителями которых являются токи и напряжения.

В случае классических компьютеров исключительно важной яв-

ляется проблема уменьшения рассеиваемой энергии в процессе вычислительных операций. Мысль о возможности *«логически обратимых»* операций, не сопровождающихся рассеянием энергии, впервые высказал Р. Ландауер в 1961 году [1]. Существенный шаг в решении этой проблемы был сделан в 1982 году Ч. Беннеттом [2, 3], который показал, что универсальный цифровой компьютер типа вычислительной машины Тьюринга может быть построен на логически и термодинамически обратимых вентилях таким образом, что энергия будет рассеиваться только за счет необратимых периферийных процессов ввода информации в машину и, соответственно, считывания результата вычислений на выходе. Типичными классическими обратимыми универсальными вентилями являются вентили Фредкина и Тоффולי.

Идея *квантовых вычислений*, по-видимому впервые высказанная Ю. И. Маниным в 1980 году [4], стала активно обсуждаться в мире с 1982 года, после опубликования статьи американского физика-теоретика, нобелевского лауреата Р. Фейнмана [5]. Эти авторы обратили внимание на то, что каждое состояние квантовой системы из L двухуровневых квантовых элементов (позднее они получили наименование *кубитов* (quantum bits)), в отличие от классической, может находиться в некоторой когерентной *суперпозиции* из 2^L булевых состояний, то есть характеризуется вектором состояния в 2^L -мерном гильбертовом пространстве. Для описания такой квантовой суперпозиции в классическом вычислительном устройстве потребуется задать 2^L комплексных чисел, то есть понадобятся *экспоненциально большие* вычислительные ресурсы. Уже для $L = 100$ их число исключительно велико — порядка 10^{30} ! Отсюда делается обратный вывод о том, что эффективное моделирование квантовых систем, содержащих до сотни двухуровневых элементов, практически недоступно классическим компьютерам, но может эффективно осуществляться на основе использования соответствующих *квантовых логических операций*, которые действуют в 2^L -мерном гильбертовом пространстве состояний, и этим принципиально отличаются от операций над булевыми состояниями [6, 7].

Перспективы квантовых вычислений обычно связывают с ожидаемым экспоненциальным ускорением решения так называемой NP-полной (Nondeterministic polynomial-time complete) *проблемы*, то есть проблемы решения таких задач, для которых очень трудно это решение найти, но очень просто его проверить. Такие задачи относятся к классу *невывчисляемых* задач в том смысле, что они не могут быть решены

на классических компьютерах за время, полиномиально зависящее от числа битов L , представляющих задачу.

Поскольку законы квантовой физики на микроскопическом уровне являются линейными и обратимыми, то и соответствующие квантовые логические устройства, производящие операции с чистыми квантовыми состояниями отдельных двухуровневых элементов-кубитов, в отсутствие помех и шумов, обусловленных взаимодействием квантовых систем с окружением, оказываются также *логически и термодинамически обратимыми* и поэтому вычислительные операции представляются унитарными операторами (или матрицами $2^L \times 2^L$) в 2^L -мерном гильбертовом пространстве. Квантовые вентили аналогичны соответствующим обратимым классическим вентилям, но в отличие от классических они способны совершать *унитарные операции над суперпозициями состояний*. Элементарным шагом при квантовых вычислениях является отдельная унитарная операция над L -кубитовой суперпозицией в квантовых компьютерах, тогда как для классического компьютера такая операция потребовало бы 2^L элементарных шагов, что является проявлением так называемого *квантового параллелизма* [7] в работе квантовых устройств, приводящему к существенному *ускорению* вычислительного процесса. В этом заключается одно из главных преимуществ квантовых компьютеров по сравнению с классическими цифровыми компьютерами.

Фейнман предложил и первую схему квантового обратимого компьютера [8], состоящую из элементов с двумя состояниями в качестве «вычислительного» базиса. Организацию квантовых обратимых (унитарных) логических операций над кубитами предполагалось осуществлять с помощью соответствующих внешних воздействий, которыми могут управлять классические компьютеры.

Принципиальная схема работы любого квантового компьютера может быть представлена следующим образом [9] (рис. 1). Основной его частью является квантовый регистр — совокупность некоторого числа L кубитов. До ввода информации в компьютер все кубиты регистра должны быть приведены в основные базисные (булевы) состояния, то есть $|0_1\rangle, |0_2\rangle, |0_3\rangle, \dots, |0_L\rangle \equiv |0_1, 0_2, 0_3, \dots, 0_L\rangle$. Эта операция называется подготовкой начального состояния или *инициализацией* (initializing). Далее каждый кубит можно подвергнуть селективному воздействию, например, с помощью импульсов внешнего электромагнитного поля, которое переведет основные базисные состояния определенных кубитов

тов в неосновные булевы состояния $|0\rangle \Rightarrow |1\rangle$, а весь регистр — в суперпозицию базисных состояний вида $|n\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots, n_L\rangle$, где $n_i = 0, 1$, задающую бинарное представление числа $n = \sum_{i=1}^L n_i 2^i$.



Рис. 0.1. Схематическая структура квантового компьютера.

При вводе информации в квантовый компьютер состояние входного регистра, с помощью соответствующих импульсных воздействий, преобразуется в соответствующую когерентную суперпозицию базисных ортогональных состояний $|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{2^L-1} c_n |n\rangle$. В таком виде информация далее подвергается воздействию квантового процессора, выполняющего последовательность квантовых логических операций, определяемую в отсутствие влияния окружения унитарным преобразованием $\hat{U}(t)$, действующим на состояние всего регистра. К моменту времени t в результате преобразований исходное квантовое состояние становится новой суперпозицией вида $|\psi(t)\rangle = \sum_{n,m} c_n \hat{U}_{mn}(t) |n\rangle$.

Совокупность всех возможных операций на входе данного компьютера, формирующих исходные состояния, а также воздействий, осуществляющих унитарные локальные преобразования, соответствующие алгоритму вычисления, способ подавления потери когерентности квантовых состояний и исправления случайных ошибок играет здесь ту же роль, что и «программное обеспечение» (software) в классическом компьютере.

При выборе конкретной схемы квантового компьютера необходимо решить три вопроса: во-первых, выбрать физическую систему — элементную базу, которая обеспечит возможность иметь в компьютере

достаточное число управляемых кубитов, во-вторых, определить физический механизм, определяющий взаимодействие между кубитами, в-третьих, определить способ селективного управления кубитами и измерения их состояния на выходе. Все это вместе взятое представляет собой *«аппаратное обеспечение»* (hardware) квантового компьютера.

Указанные идеи быстро получили дальнейшее развитие, но только в последние годы появилась определенная надежда на возможность их практической реализации. Количество публикаций по квантовой теории информации и квантовым вычислениям приобрело в последнее время лавинообразный характер, появились и экспериментальные работы. Это в свою очередь способствовало более глубокому осмыслению основ самой квантовой теории и ее связи с квантовой теорией информации [10].

Квантовые методы выполнения вычислительных операций, а также передачи и обработки информации, уже начинают воплощаться в реально функционирующих экспериментальных устройствах, что стимулирует усилия по реализации *квантовых компьютеров* — этого нового направления в вычислительной технике [11, 12].

Что касается практического создания аппаратного обеспечения для квантовых компьютеров, то в настоящее время просматривается несколько направлений в развитии их элементной базы. Наиболее широко обсуждаются следующие:

а) использование низколежащих энергетических уровней ионов, захваченных ионными ловушками, созданных в вакууме с помощью электрических и магнитных полей определенной конфигурации, при лазерном охлаждении ионов до микрокельвиновых температур;

б) использование ядерных спинов с $I = 1/2$ и методов ядерного магнитного резонанса (ЯМР);

в) использование макроскопических квантовых состояний сверхпроводящих устройств;

г) использование двух спиновых или двух орбитальных электронных состояний в квантовых точках;

д) использование квантовых электродинамических полостей и фотонных кристаллов.

Детальному обсуждению перспектив построения квантовых компьютеров посвящена предлагаемая читателю книга. Мы постарались

построить изложение таким образом, чтобы от читателя не требовалось бы специальных знаний, выходящих за рамки обычной физико-математической подготовки. Многие принципиальные и специфические для рассматриваемой области вопросы излагаются достаточно подробно для того, чтобы читатель при первом чтении мог не обращаться за помощью к другим источникам. При возникновении такой необходимости он может воспользоваться достаточно подробной, хотя и далеко не полной, но доступной для российского читателя библиографией.

Изложение строится далее следующим образом. В первой главе рассматриваются основные понятия и положения квантовой теории информации, излагаются представления о квантовых двухуровневых элементах-кубитах, об общих свойствах квантовых состояний ансамблей кубитов, таких как запутывание и декогерентизация. Во второй главе описываются квантовые операции над одним или двумя кубитами, на основе которых могут быть построены любые более сложные квантовые логические операции, а также основные квантовые алгоритмы. В третьей главе описываются основные принципы работы квантовых компьютеров на ионных ловушках и обсуждаются экспериментально полученные результаты. Описанию простейших квантовых операций на ядерных спинах в ансамблевых жидкостных квантовых компьютерах посвящена четвертая глава. В пятой главе рассматриваются возможные варианты многокубитовых твердотельных ядерных магнитно-резонансных квантовых компьютеров с индивидуальным и ансамблевым обращением к кубитам, а также работающих на принципах клеточного автомата. Шестая глава содержит описание возможных вариантов квантовых компьютеров на квантовых точках с электронными орбитальными и спиновыми состояниями. Наконец, седьмая глава посвящена рассмотрению вариантов элементной базы квантовых компьютеров на сверхпроводниковых элементах. В заключении дается сравнительный анализ некоторых развивающихся направлений по созданию квантовых компьютеров и оцениваются их перспективы. В книге отражены взгляды авторов на обсуждаемые проблемы, а также включены некоторые оригинальные результаты.

Литература

- [1] *Landauer R.* Irreversibility and Heat Generation in the Computing Process // *IBM Journ. Res. Develop.*, 1961, v. 5, № 3, pp. 183–191. / *Ландауер Р.* Необратимость и выделение тепла в процессе вычислений. Перевод с англ.

- под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 9–32.
- [2] *Bennett C. H.* The Thermodynamics of Computation. — A Review. // *Inter. Journ. of Theor. Phys.*, 1982, v. 21, № 12, pp. 905–940.
- [3] *Bennett C. H.* Notes on the History of Reversible Computation. // *IBM Journ. Res. Develop.*, 1988, v. 32, № 1, pp. 16–23.
- [4] *Манин Ю. И.* Вычислимое и невычислимое. — М.: Сов. Радио, 1980, с. 128.
- [5] *Feynman R.* Simulating Physics with Computers // *Inter. Jour. Theor. Phys.* 1982, v. 21, № 6/7, pp. 467–488. / *Фейнман Р.* Моделирование физики на компьютерах. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 96–124.
- [6] *Benioff P.* Quantum-Mechanical Hamiltonian Models of Turing Machines // *Jour. Stat. Phys.*, 1982, v. 29, № 3, pp. 515–546. / *Бенёв П.* Квантовомеханические гамильтоновы модели машин Тьюринга. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 53–95.
- [7] *Deutsch D.* Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer // *Proc. Roy. Soc., Lond.* 1985, v. A400, № 1818, pp. 97–117. / *Дойч Д.* Квантовая теория принципа Чёрча–Тьюринга и универсальный квантовый компьютер. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 157–189.
- [8] *Feynman R. P.* Quantum Mechanical Computers // *Foundation of Phys.*, 1986, v. 16, № 6, pp. 507–531. / *Фейнман Р. Ф.* Квантовомеханические компьютеры. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 125–156.
- [9] *Валиев К. А.* Квантовые компьютеры: могут ли они быть «большими»? // *УФН*, 1999, т. 169, № 6, с. 691–694.
- [10] *Килин С. Я.* Квантовая информация // *УФН*, 1999, т. 169, № 5, с. 507–526.
- [11] *Валиев К. А.* Квантовая информатика: компьютеры, связь и криптография // *Вестник РАН*, 2000, т. 70, с. 688–718.
- [12] *Валиев К. А., Кокин А. А.* Из итогов XX века: от квантов к квантовым компьютерам. I. Физические основы и принципы построения квантового компьютера // *Известия ВУЗ, Электроника*, 2000, № 4–5, с. 46–52.

ГЛАВА 1

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ИНФОРМАЦИИ В КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХ

*«Много неясного в странной стране,
Можно запутаться и заблудиться.
Даже мурашки бегут по спине,
Если представить, что может случиться.»*

В. С. Высоцкий

1.1. Необратимые и обратимые классические информационные процессы

1.1.1. Информационная энтропия Шеннона. Количество информации

Прежде чем рассматривать преобразование информации в квантовых системах, остановимся кратко на некоторых основных понятиях и представлениях классической теории информации, обобщенных, развитых и существенно дополненных в дальнейшем в квантовой теории информации.

Состояние классических макроскопических систем, какими являются традиционные полупроводниковые приборы, — логические элементы, элементы памяти, а также различные каналы связи — контролируется сравнительно небольшим числом макроскопических параметров (температура, полная энергия, энтропия, электрический заряд, электрическое поле и т. д.), которых, однако, недостаточно для того, чтобы можно было считать состояние такой физической системы *полностью* определенной, поскольку оно представляет собой совокупность огромного числа не доступных контролю микросостояний. Для отражения этого обстоятельства в статистической физике вводится понятие *энтропии* системы S , которую будем здесь называть *физической* и

определять выражением [1.1] $S = k \ln \Delta\Gamma$, где k — постоянная Больцмана, $\Delta\Gamma$ — статистический вес, равный числу микросостояний, охватываемых рассматриваемым макросостоянием системы. С этим понятием связано и понятие информационной энтропии системы H , являющейся с точки зрения классической теории информации *мерой недостатка* (или степени неопределенности) *информации* о действительном состоянии физической системы. *Информационную энтропию Шеннона* принято определять следующим образом [1.2]

$$H = \log_2 \Delta\Gamma = - \sum_n p_n \log_2 p_n, \quad \sum_n p_n = 1, \quad (1.1)$$

где p_n — вероятность n -го микросостояния макроскопической системы.

Количество информации I (или просто информация) о состоянии классической системы, получаемое в результате измерений внешним прибором, связанным с рассматриваемой системой некоторым каналом связи, определяется как разность информационной энтропии, соответствующей начальной неопределенности состояния системы H_0 , и информационной энтропии конечного состояния системы после измерения H . Имеет место следующее соотношение: $I + H = H_0 = \text{const}$. В идеальном случае, когда отсутствуют шумы и помехи, создаваемые внешними источниками в канале связи, конечное распределение вероятностей после измерения сводится к одному определенному значению $p_n = 1$, то есть к $H = 0$, а максимальное значение для количества полученной при измерении информации будет определяться соотношением $I_{\text{max}} = H_0$. Таким образом, информационная энтропия Шеннона системы имеет смысл *максимальной информации*, заключенной в системе; она может быть определена в идеальных условиях измерения состояния системы в отсутствии шумов и помех, когда энтропия конечного состояния $H = 0$.

Рассмотрим далее классический логический элемент, который может находиться в *одном из двух* равновероятных булевых логических состояний «0» или «1», представляющий вместе с окружающей средой — термостатом и генерируемым внешним теплоизолированным объектом сигналом единую, вообще говоря, неравновесную замкнутую систему. Переход элемента в одно из состояний, например в состояние «1», соответствует уменьшению статистического веса его состояния по сравнению с начальным состоянием в 2 раза. Это эквивалентно *уменьшению*

информационной энтропии Шеннона и *увеличению* количества информации об элементе на единицу, которую принято называть *битом*:

$$\Delta H = -\Delta I = \log_2(\Delta\Gamma/2) - \log_2 \Delta\Gamma = -\log_2 2 = -1 \text{ бит.} \quad (1.2)$$

Таким образом, информационная энтропия определяет число битов, которое требуется для кодирования информации в рассматриваемой системе или сообщении. Шеннону [1.2] принадлежит теорема, доказывающая возможность достижения произвольной точности кодирования информации для случая предельно длительных сообщений в отсутствии шумов и помех.

Изменение физической энтропии двухуровневого логического элемента, соответствующее *увеличению* количества информации на один бит, составляет $-\Delta S = -k \ln 2 \Delta I = k \ln 2 > 0$. При этом сам логический элемент переключается в неравновесное состояние относительно окружения¹. Произведенная при этом над элементом работа $W = P \cdot \tau$, где P — мощность, τ — длительность внешнего воздействия, расходуется согласно первому началу термодинамики на изменение его внутренней энергии ΔU , а также на передаваемое термостату тепло $-\Delta Q$:

$$W = \Delta U - \Delta Q = \Delta U + T_T \Delta S_T, \quad (1.3)$$

где $-\Delta Q = T_T \Delta S_T$, $T_T = \text{const}$ — температура, ΔS_T — изменение энтропии термостата. Для изменения энтропии замкнутой системы, включающей логический элемент и термостат, в соответствии с требованием второго начала термодинамики, получим $\Delta S + \Delta S_T = \Delta S_D \leq 0$, где ΔS_D — *производство энтропии*, обусловленное необратимыми диссипативными процессами в логическом элементе при переключении.

Минимальной работе W_{\min} соответствует *термодинамически обратимый* процесс ($\Delta S_D = 0$) переключения логического элемента в состояние с $\Delta S > 0$ [1.1]:

$$\Delta U - \Delta Q \geq W_{\min} = \Delta(U - T_T S). \quad (1.4)$$

Если к тому же этот процесс изотермический ($T = T_T$), то минимальная работа оказывается равной просто изменению свободной энергии логического элемента $W_{\min} = \Delta F = \Delta(U - TS)$, определяющему ту

¹Вместо уменьшения энтропии можно говорить об увеличении негэнтропии $\Delta N = -\Delta H$ [1.3].

часть изменения его внутренней энергии ΔU , которая может быть восстановлена в виде *обратимой* работы. С другой стороны, минимальная работа W_{\min} представляет собой энергию переключения элемента $P \cdot \tau$ логического элемента при термодинамически обратимом процессе.

1.1.2. Термодинамический предел для энергии переключения логического элемента

К фундаментальным понятиям теории информации относится *термодинамический предел* для энергии переключения классического логического элемента $(P \cdot \tau)_{\min}$, определяемый как предельное значение минимальной работы $W_{\min} = \Delta F$, которую необходимо сообщить логическому элементу для того, чтобы термодинамически обратимым образом перевести его в состояние, отличающееся от исходного только на один бит информационной энтропии. Полагая в (1.4) $\Delta U = 0$ и $\Delta I = -\Delta H = 1$, для этого предела получим

$$(P \cdot \tau)_{\min} = \Delta F_{\min} = kT \cdot \ln 2 \approx 3 \cdot 10^{-21} (T/300 \text{ К}) \text{ Дж/бит.} \quad (1.5)$$

Однако при минимальной работе, равной предельному значению (1.5), вероятность ошибок или ложного срабатывания за счет тепловых флуктуаций, которую можно грубо оценить с помощью выражения

$$p \approx \exp(-\Delta F_{\min}/kT) = 0,5, \quad (1.6)$$

оказывается достаточно высокой. Поэтому в качестве *классического термодинамического предела* для энергии переключения выбирают значение $(P \cdot \tau)_{\min}$ с определенным запасом по сравнению с (1.5), а именно [1.3, 1.4]:

$$(P \cdot \tau)_{\min} = 4kT \approx 2 \cdot 10^{-20} \cdot (T/300 \text{ К}) \text{ Дж/бит,} \quad (1.7)$$

что соответствует значительно меньшей вероятности ошибок $\sim 0,02$. В этом случае при увеличении количества информации на один бит внутренняя энергия логического элемента должна увеличиться на величину $\Delta U = kT \cdot (4 - \ln 2) > kT$.

1.1.3. Пропускная способность информационного канала. Энергетическая цена передаваемого бита информации

Фундаментальным в теории информации является также вопрос о максимальном значении количества информации, которое мо-

жет передать физическая система-канал. В качестве информационного канала может рассматриваться также и логическое устройство. Если в отсутствие шумов и помех в канале связи или логическом элементе информация может передаваться со скоростью, ограниченной лишь скоростью распространения сигнала в устройстве, то в противном случае эта скорость значительно меньше. Для характеристики максимальной скорости передачи информации по каналу связи или через логическую структуру было введено понятие *пропускной способности* (transmission capacity) или *емкости канала* (channel capacity) C , определяемое пределом [1.2, 1.3]:

$$C = \lim_{\tau \rightarrow \infty} I_m(\tau)/\tau, \quad (1.8)$$

где τ — длительность передаваемого сообщения, $I_m(\tau)$ — максимальное количество информации, которое может быть передано по каналу за время τ при оптимальном кодировании с исчезающе малой ошибкой при $\tau \rightarrow \infty$. Для стационарного процесса она определяется выражением

$$C = \Delta\nu \cdot I_m, \quad (1.9)$$

где $\Delta\nu$ — ширина полосы частот, пропускаемой каналом связи, I_m — максимальное количество передаваемой информации на единицу частотного интервала.

Если характеризовать канал шириной полосы частот $\Delta\nu = \nu_{\max} = 1/2\tau$, то при мощности создаваемого окружением теплового шума $N = kT/2\tau$ (влияние другого рода случайных помех можно грубо учесть, введя эффективную температуру $T_{eff} > T$), пропускную способность можно определить с помощью *формулы Шеннона* [1.2]:

$$C = I_m/2\tau = \frac{1}{2\tau} \log_2(1 + P/N), \quad (1.10)$$

где $P/N = 2(P \cdot \tau)/kT = 1/\delta^2$ — отношение сигнал/шум, δ — относительная погрешность определения амплитуды сигнала. Шеннон доказал, что при условии оптимального кодирования передача информации по каналу при наличии шумов возможна с исчезающе малой ошибкой.

Информационный процесс в логическом элементе можно характеризовать также энергией, требуемой для передачи одного бита информации, называемой *энергетической ценой* одного бита [1.5, 1.6], опреде-

ляемой выражением $E = P/C$, где P — мощность сигнала. Для энергетической цены одного бита передаваемой информации будем иметь

$$E = P/C = 2(P \cdot \tau)/I_m = \frac{\ln 2 \cdot 2(P \cdot \tau)}{\ln(1 + 2(P \cdot \tau)/kT)}. \quad (1.11)$$

В отсутствие шумов ($kT \rightarrow 0$) энергетическая цена согласно (1.11) может быть сделана произвольно малой. На самом деле она ограничена снизу соотношением неопределенности между энергией E и временем передачи сообщения τ типа $E > \hbar/\tau$.

Для случая наличия шумов в результате минимизации выражения (1.11) получим оценку предельного значения энергетической цены:

$$E_{\min} = kT \ln 2, \quad (1.12)$$

которое совпадает по величине с приведенным в (1.5) выражением ΔF_{\min} , но соответствует предельно малой энергии переключения $(P \cdot \tau) \rightarrow 0$, то есть при конечном времени переключения τ и конечной температуре соответствует предельно малой скорости передачи информации $C = P/(kT \ln 2) \rightarrow 0$. Поскольку реальное преобразование сигнала в логическом элементе должно происходить с конечной скоростью C , то для энергетической цены будем иметь $E > kT \ln 2$.

Заметим, что согласно формуле Шеннона (1.10) при наличии шумов мощность сигнала увеличивается на мощность шумов, что отражает *линейность* рассматриваемых систем. Это и приводит к конечному значению энергетической цены бита E .

1.1.4. Обратимые логические операции и обратимые вентили

Возникает естественный вопрос: нельзя ли преодолеть квазиклассический термодинамический барьер и сделать компьютер термодинамически и логически обратимым? Оказывается, в определенном смысле можно!

Если в системе произошло стирание или потеря одного бита информации, то статистический вес состояния соответствующего элемента увеличивается вдвое, а его энтропия возрастает на $\Delta S = k \ln 2$. При этом неизменно происходит рассеяние энергии и выделение тепла $\Delta Q_{\min} = T \Delta S = (P \cdot \tau)_{\min} = kT \ln 2$ (в этом состоит так называемый *принцип Ландауера* [1.7]), соответственно уменьшается свободная энергия элемента ΔF . Таким образом, логически необратимая операция —

стирание бита информации, является также и термодинамически необратимой операцией. Чтобы сделать необратимый компьютер хотя бы логически обратимым, необходимо сохранять всю информацию, которая терялась бы в других случаях в процессе его работы.

В качестве одной из возможностей существенного уменьшения рассеиваемой мощности широко обсуждается использование процессов переключения, настолько медленных по сравнению с процессами релаксации внутри логического элемента, что в каждый момент времени он оказывается в квазиравновесном состоянии. При таком квазистатическом или *адиабатическом* процессе энтропия логического элемента практически не изменяется и, следовательно, не происходит рассеяние энергии ($\Delta Q_{\min} \approx 0$), а минимальная работа переключения совпадает с изменением внутренней энергии $W_{\min} \approx \Delta U_{\min}$ и может быть в принципе возвращена для полезного использования. Описанные соображения лежат в основе так называемой *адиабатической динамической логики* [1.8]. Кроме адиабатических процессов для уменьшения рассеиваемой мощности были предложены схемы, позволяющие исключить в процессе переключения логического элемента протекание в нем токов [1.9].

Логический элемент осуществляет логически *обратимую операцию*, когда сигнал на его входе может быть однозначно определен по сигналу на выходе. В последнее время был предложен целый ряд другого рода обратимых логических устройств [1.10–1.15]. При этом было показано [1.16], что при наличии шумов *полностью* избежать диссипации энергии все-таки оказывается невозможно. Отметим, однако, что логическая обратимость *не обязательно* требует бездиссипативных энергетических процессов. В оптимальном классическом компьютере с соответствующей обратимой логической архитектурой промежуточные результаты не должны стираться, переходы между состояниями при промежуточных операциях не должны быть слишком быстрыми, а надежность результатов не должна быть чрезмерной, для того чтобы процесс переключения мог считаться и термодинамически обратимым. Необратимыми в компьютере будут лишь периферийные процессы ввода и вывода информации.

Фредкин и Тоффоли [1.17] обратили внимание на аналогию логических операций в компьютерах с элементарными физическими процессами. Существенным их достижением было изобретение умозрительной механической модели идеально упругих «бильярдных шаров», где

каждый шар представляет собой неразрушаемый бит. Модель позволяет получать наглядную картину обратимых операций в так называемом механическом баллистическом компьютере. Многоэтапные вычисления реализуются в нем как иерархия субвычислительных обратимых операций, которые осуществляются в процессе *упругих* столкновений движущегося шара-бита с совокупностью «управляющих» шаров и неподвижных отражателей, изменяющих определенным образом направление его движения. Запущенный в устройство с определенной скоростью шар-бит в результате выходит из него в состоянии с той же энергией, но с новым направлением скорости, а само устройство обратимым образом возвращается в исходное состояние. Энергетическая и энтропийная цена бита информации в этом случае определяется только количеством стираемой на выходе и генерируемой на входе компьютера информации, поскольку промежуточного стирания не происходит. Такого рода схема была названа *консервативной логикой*. Однако на самом деле из-за неидеальности шаров и отражателей их движение будет быстро хаотизироваться и вычислительный процесс разрушаться. Для сохранения необходимого порядка в движении шаров предлагалось ввести дополнительный периодически движущийся потенциал.

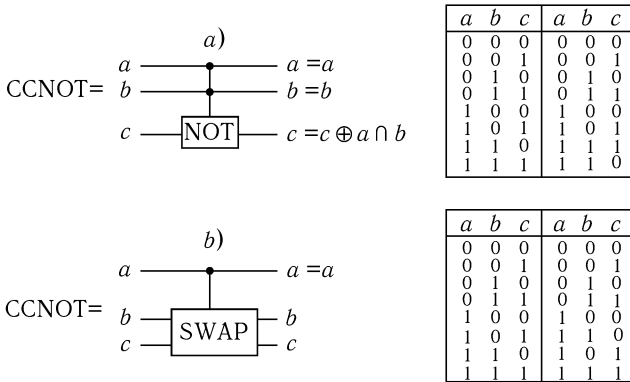


Рис. 1.1. Схемы и таблицы истинности трехвыходовых обратимых вентилей Тоффли (CCNOT) а) и Фредкина (CSWAP) б). Знак \oplus обозначает сумму по модулю 2, а знак \wedge — операцию конъюнкции «И».

Следует заметить, что не каждый обратимый вентиль является универсальным в том смысле, что одних таких вентилей недостаточ-

но для организации произвольных логических операций в компьютере. Необходимой для этого *логической полнотой* обладают обратимый вентиль Тоффоли или дважды контролируемое «НЕ» (Controlled-Controlled-NOT \equiv CCNOT) и обратимый вентиль Фредкина или контролируемый обмен (Controlled SWAP = CSWAP) [1.17], содержащие три входа и три выхода (рис. 1.1).

Например, дважды контролируемое «НЕ» (CCNOT) имеет две контролирующие линии с сигналами a и b , которые дублируются на выходе и осуществляют операцию «НЕ» на третьей контролируемой (target) линии только тогда, когда есть сигнал на входе обоих контролирующих линий ($a = b = 1$). В противном случае сигнал на выходе третьей линии не изменяется $c' = c$. Если на третий вход подан нуль (единица), то при $a = b = 1$ он превращается в единицу (нуль), то есть для него выполняется операция «НЕ».

Для описания работы универсальных обратимых логических операторов CCNOT и CSWAP можно ввести унитарную матрицу преобразования $2^3 \times 2^3$. Для входных a, b, c и выходных сигналов a', b', c' она имеет отличные от нуля матричные элементы для состояний, указанных в приведенных таблицах истинности.

Двухвходовой обратимый вентиль контролируемое «НЕ» (Controlled-NOT \equiv CNOT), известный также как исключающее ИЛИ (XOR) с одной контролирующей (control) шиной $a - a'$ и одной контролируемой (target) шиной $b - b'$ (см. рис. 1.2).

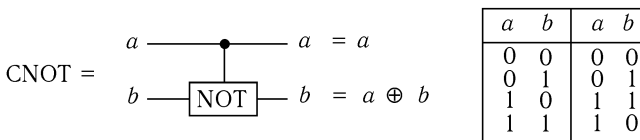


Рис. 1.2. Схема и таблица истинности двухвходового обратимого вентиля контролируемое «НЕ» (CNOT).

В отличие от вентиля Фредкина и Тоффоли сам по себе этот вентиль не является универсальным. Однако он оказывается удобным для организации любых квантовых операций при использовании совместно с некоторыми одновходными вентилями и поэтому широко применяется в квантовых компьютерах (см. ниже).

1.2. Основные понятия квантовой теории информации

1.2.1. Оператор (матрица) плотности. Чистое и смешанное состояние

Процессы передачи, обработки и считывания информации в квантовых системах основываются на представлениях и понятиях, значительно отличающихся от представлений и понятий классической теории информации. При переходе в квантовую область для этих процессов открываются качественно новые возможности широкие перспективы. В частности более эффективными становятся некоторые квантовые алгоритмы и вычислительные операции. Соответственно, бурно развивается в настоящее время и квантовая теория информации.

Одним из основных понятий квантовой, так же как и классической, теории информации является понятие энтропии, представляющей собой *меру недостатка* (или степени неопределенности) информации о действительном состоянии физической системы.

Для описания изолированной от окружения (замкнутой) квантовой системы используется понятие *чистого* (или *когерентного*) состояния, которое характеризуется *волновой функцией* $\Psi(x, t)$ (x — полный набор всех непрерывных и дискретных переменных, определяющих состояние квантовой системы, например, это могут быть координаты и спиновые переменные всех частиц), или *вектором состояния* по Дираку $|\Psi(t)\rangle$ (кет), представляемый матрицей-столбцом в гильбертовом пространстве, с размерностью, равной числу состояний квантовой системы. Для чистого состояния можно ввести также *матрицу плотности*:

$$\rho(x, x', t) = \rho(x', x, t)^* = \Psi(x, t) \cdot \Psi^*(x', t), \quad (1.13)$$

или эквивалентный ей эрмитовый оператор (*матрицу плотности*)

$$\hat{\rho}(t) = |\Psi(t)\rangle \cdot \langle\Psi(t)|, \quad (1.14)$$

где $\langle\Psi(t)|$ — эрмитово-сопряженный вектор состояния (бра). Оператор такого типа называется *проекционным*. Это название связано с тем, что действие оператора на любой другой вектор состояния $|\Phi\rangle$ проецирует его в гильбертовом пространстве на направление (одномерное пространство), определяемое вектором $|\Psi(t)\rangle$. Оператор плотности и вектор состояния — два равносильных способа описания чистого состояния квантовой системы.

Учитывая нормированность векторов состояний $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$, для оператора плотности чистого состояния найдем

$$\hat{\rho}(t) \cdot \hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(t). \quad (1.15)$$

Разлагая волновую функцию $\Psi(x, t)$ по произвольно выбранной в качестве базиса совокупности ортонормированных стационарных волновых функций $\psi_n(x)$, для матрицы плотности чистого состояния квантовой системы (1.13) получим

$$\rho(x, x', t) = \sum_{n, m} a_m(t) \psi_m^*(x') \cdot a_n(t) \psi_n(x) = \sum_{n, m} \rho_{nm}(t) \psi_n(x) \psi_m^*(x'). \quad (1.16)$$

Положительно определенная матрица чистого состояния в n -представлении принимает вид произведения коэффициентов разложения $\rho_{nm}(t) = a_n(t) a_m^*(t)$. Откуда следует свойство для элементов матрицы плотности в произвольном представлении

$$\rho_{nn} \rho_{mm} = |\rho_{nm}|^2. \quad (1.17)$$

Поскольку путем должного выбора базиса матрица плотности всегда может быть приведена к диагональному виду, когда $\rho_{nm} = 0$ ($n \neq m$), то из (1.17) следует, что отличным от нуля будет *только один* диагональный матричный элемент, равный к тому же, в силу условия нормировки, единице.

Взаимодействие квантовой системы с окружением, к которому относится и измерительная система, приводит, как и в классическом случае, к *флуктуациям* (шумам) ее макроскопических характеристик, необратимым процессам *диссипации* энергии квантовой системы и к необратимому квантовому эффекту — разрушению квантовой когерентности или так называемой *декогерентизации* (decoherence)¹ квантовых состояний (см. ниже). В конечном счете квантовая система достигает термодинамического равновесия с окружением. В этом случае состояние системы называется *смешанным (некогерентным)*. Оно описыва-

¹В отечественной литературе еще не устоялся термин, соответствующий английскому decoherence, означающему процесс потери когерентности. Употребляются, например, такие термины как декогеренция, декогерентность, дефазировка. Нам представляется, что правильнее пользоваться термином декогерентизация.

ется уже не волновой функцией, а положительно определенным оператором (или матрицей) плотности $\hat{\rho}$, совпадающим в случае чистого состояния с приведенным выше проекционным оператором (1.14). Оператор плотности смешанного состояния квантовой системы можно рассматривать как результат усреднения проекционного оператора более общей замкнутой системы, включающей как рассматриваемую квантовую систему, так и окружающую среду, по неконтролируемым состояниям последней.

1.2.2. Энтропия фон Неймана

Основным понятием квантовой теории информации является введенное фон Нейманом [1.18] понятие информационной энтропии квантового ансамбля (*энтропия фон Неймана*), определяемой выражением:

$$S(\rho) = -\text{Sp} \hat{\rho} \log_2 \hat{\rho} \geq 0, \quad \text{Sp} \hat{\rho} = 1. \quad (1.18)$$

Легко видеть, что для чистого состояния энтропия $S(\rho) = 0$, означающее полную его определенность. Максимальное значение энтропии фон Неймана соответствует равновероятному распределению D собственных значений матрицы плотности $S(\rho) \leq \log_2 D$.

Энтропия фон Неймана $S(\rho)$ для сигнала, представляющего ансамбль чистых квантовых состояний, может интерпретироваться аналогично энтропии Шеннона как количество информации, которое может быть передано на выход канала или преобразовано в квантовой системе с идеальной точностью. *Точность воспроизведения* (fidelity) $F(\rho)$ определяется как вероятность того, что сигнал на входе, описываемый чистым состоянием с оператором плотности $\hat{\rho}_{in}$, на выходе будет описываться операторами плотности $\hat{\rho}_{out}$

$$F = \text{Sp} \hat{\rho}_{in} \hat{\rho}_{out} = 1 - \varepsilon \leq 1. \quad (1.19)$$

Вероятность получаемой ошибки ε при передаче сигнала при этом равна $1 - F$. Если шумы и помехи отсутствуют, то $\hat{\rho}_{out} = \hat{\rho}_{in}$, и поскольку для чистых состояний $\hat{\rho}_{in} \hat{\rho}_{in} = \hat{\rho}_{in}$, будем иметь идеальную точность $F = 1$.

В отличие от матрицы плотности чистого состояния матричные элементы матрицы плотности смешанного состояния в произвольном представлении вместо (1.17) подчиняются неравенству $\rho_{nn} \rho_{mm} > |\rho_{nm}|^2$ [1.19].

Оператор плотности смешанного состояния квантового ансамбля можно представить как взвешенную сумму проекционных операторов $\hat{\rho}_\alpha = |\psi_\alpha\rangle \cdot \langle\psi_\alpha|$, представляющих отдельные α -е *парциальные чистые* состояния с весовыми множителями $p_\alpha(t)$, являющимися вероятностями парциальных чистых состояний:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha} p_{\alpha}(t) |\psi_{\alpha}\rangle \langle\psi_{\alpha}|, \quad \sum_{\alpha} p_{\alpha}(t) = 1. \quad (1.20)$$

Обратим здесь внимание на то, что матрица плотности смешанного состояния $\rho(x, x', t)$, в отличие от матрицы плотности чистого состояния, не может быть представлена в виде произведения типа (1.15).

В процессе квантовых измерений (считывания информации на выходе компьютера) в результате взаимодействия квантовой системы с внешним макроскопическим измерительным прибором состояние системы необратимым образом преобразуется (проектируется) с вероятностями $p_n(t)$ в выбранный для измерения ортогональный набор состояний-указателей $\psi_n(x)$ прибора («pointer» states). Этот результат принято называть *редукцией* или *коллапсом* волновой функции измеряемого квантового состояния. Такое представление о процессе измерения, сформулированное фон Нейманом [1.18], имеет, однако, феноменологический характер и поэтому не решает полностью проблему квантовых измерений. Требуется более детальный анализ этой проблемы, а также получение ответа на более общий вопрос о том, где граница между квантовыми и классическими свойствами достаточно сложной замкнутой системы.

Значение энтропии фон Неймана (1.18) не зависит от вида выбранного представления для матрицы плотности квантовой системы. В то же время в классическом случае *информационная энтропия Шеннона* определяется только вероятностями отдельных микросостояний p_n (временной аргумент опустим). Этим вероятностям соответствуют диагональные элементы матрицы плотности ρ_{nn} в представлении, задаваемом кодирующей системой. Выражение для энтропии, в которой полностью игнорируются недиагональные элементы матрицы плотности, аналогичное выражению для классической энтропии Шеннона, будем называть энтропией Шеннона. Эту энтропию иногда называют также смешанной для того, чтобы отличать ее в квантовом случае от классической информационной энтропии Шеннона. Запишем ее в оператор-

ном виде:

$$H = - \sum_n \rho_{nn} \log_2 \rho_{nn} = - \text{Sp } \widehat{\rho}(n) \log_2 \widehat{\rho}(n) \geq 0, \quad (1.21)$$

$$\sum_n \rho_{nn} = \text{Sp } \widehat{\rho}(n) = 1,$$

где мы ввели вспомогательный положительно определенный оператор плотности $\widehat{\rho}(n)$, который в отличие от $\widehat{\rho}$ имеет в n -представлении только диагональные элементы матрицы $\rho_{nn}(n) = \rho_{nn} \delta_{nn}$ и поэтому $(\log_2 \widehat{\rho}(n))_{nn} = \log_2 \rho_{nn} \delta_{nn}$. Для любого положительно определенного оператора $\widehat{\rho}(n)$, отличающегося от $\widehat{\rho}$ отсутствием недиагональных элементов в n -представлении, можно написать соотношение (*лемма Клейна*) [1.20]

$$S(\rho) \leq H. \quad (1.22)$$

Знак равенства в (1.22) относится к случаю $\widehat{\rho}(n) = \widehat{\rho}$, то есть когда n -представление совпадает с собственным представлением для оператора $\widehat{\rho}$, иначе говоря, когда оператор $\widehat{\rho}$ коммутирует с оператором, для которого n -представление является собственным и, следовательно, волновые функции ψ_n образуют ортонормированную систему.

Энтропия фон Неймана $S(\rho)$ квантовой системы определяет количество закодированной в ней информации. Смысл неравенства (1.22) в том, что из-за игнорирования недиагональных элементов матрицы плотности в энтропии Шеннона неопределенность состояния оказывается больше, чем при их учете. В результате квантовая энтропия фон Неймана, включающая дополнительную определенность состояния, вносимую недиагональными элементами матрицы плотности, оказывается *меньше* соответствующего значения энтропии Шеннона. Это означает, что, вообще говоря, возможно *более плотное* кодирование информации по сравнению с классическим случаем.

1.2.3. Взаимная информация. Информация Холево

Количество передаваемой по каналу связи (или через логический элемент) квантовой информации определяется значением *взаимной* (mutual) *информации* (для последней используем обозначение $I(\rho)$ и ограничимся рассмотрением стационарных сигналов). *Априорная* (безусловная) вероятность обнаружить приемным устройством на выходе канала значение переменных x для всего ансамбля

передаваемых сигналов в результате редукции в базисные состояния $\psi_n(x)$ приемника описывается диагональным элементом матрицы плотности $\rho(x, x, t) = \sum_n p_n(t) \rho_n(x, x)$, где вероятность $\rho_n(x, x) = |\psi_n(x)|^2 \leq 0$ играет роль *условной вероятности* обнаружить на выходе значения переменных x при условии, что принимается только n -й частичный сигнал. Взаимная информация или энтропия является разностью, соответственно, *априорной* $H_{apr} = H$ и *апостериорной* (условной) H_{aps} энтропий Шеннона на выходе канала [1.21]:

$$I(\rho) = H_{apr} - H_{aps} \leq H_{apr} = H, \quad (1.23)$$

где

$$H_{apr} = - \sum_x \rho(x, x, t) \log_2 \rho(x, x, t) = H, \quad (1.24)$$

$$H_{aps} = \sum_n p_n(t) H_n, \quad H_n = - \sum_x \rho_n(x, x) \log_2 \rho_n(x, x). \quad (1.25)$$

Апостериорная информационная энтропия H_{aps} — *неотрицательная* величина, как и H_{apr} в классической системе она определяет внесимую каналом ошибку в передаваемый сигнал, обусловленную классическими шумами и случайными пространственными помехами. В общем случае этот механизм дополняется ответственной за *квантовые шумы* квантовой недетерминированностью сигналов, связанной с соотношением неопределенности в случае, когда операторы, для которых переменные x и n являются собственными значениями, не коммутируют между собой. В отсутствии классических шумов и помех апостериорная энтропия H_{aps} обращается в нуль когда эти операторы коммутируют друг с другом, при этом частичная матрица плотности становится диагональной для определенных значений x и имеет одно собственное значение: $\rho_n(x, x) = \delta_{n, n(x)}$ (знак равенства в (1.23)). Сигналы на входе и выходе в этом случае максимально коррелированы и взаимная информация $I(\rho) = S = H$.

Для взаимной информации существует *верхняя* граница, определяемая теоремой Левитина–Холево [1.21–1.25], согласно которой:

$$I(\rho) \leq D(\rho) = S(\rho)_{apr} - S(\rho)_{aps}, \quad (1.26)$$

где квантовая взаимная энтропия $D(\rho)$ называется *дефектом энтропии* или *информацией Холево*, $S(\rho)_{apr} = S(\rho) \leq H$ — априорная энтропия и

$$S(\rho)_{aps} = - \sum_n p_n \text{Sp} \hat{\rho}_n \log_2 \hat{\rho}_n = \sum_n p_n S_n(\rho) \geq 0 \quad (1.27)$$

— апостериорная или условная энтропия фон Неймана, аналогичная соответствующей условной энтропии Шеннона H_{aps} .

Максимальное относительно всех возможных вероятностных мер (probability-operator-valued measure — POVM), то есть при наилучшем измерении сигнала на выходе, значение взаимной информации (*верхняя граница*) получило в квантовой теории информации название *достижимой* информации (accessible information) $I_{acc} = \max_{\text{POVM}} I(\rho)$. Она определяет число битов, необходимое для точной передачи сообщения. В отличие от I_{acc} , приведенная в разделе 1.1.3 величина I_m в классической теории соответствует максимальному значению взаимной информации, при лучшем кодировании передаваемого сигнала.

Из соотношений (1.26) и (1.27) следует, что достижимая информация определяется выражением $I_{acc} = S(\rho) = H$, что соответствует случаю, когда сигнал формируется из ортонормированных собственных состояний $\psi_n(x)$, а операторы с собственными значениями x на выходе коммутируют с оператором плотности $\hat{\rho}_n$, то есть когда $S(\rho)_{aps} = = H(\rho)_{aps} = 0$. *Нижняя* граница для I_{acc} определяется более сложным образом [1.26].

В отличие от условной энтропии Шеннона *неотрицательность* условной энтропии фон Неймана не является общим свойством. Такое свойство является *необходимым* условием того, что *совместный* оператор плотности измеряемого начального состояния $\hat{\rho}(x)$ и состояния сигнала после редукции в измерительном устройстве $\hat{\rho}(y)$ является *выпуклой* (convex) комбинацией прямых (внешних или тензорных) произведений (знак \otimes) парциальных операторов плотности (*условие сепарабельности* смешанного совместного состояния) [1.27]:

$$\hat{\rho}(x, y) = \sum_n p_n \hat{\rho}_n(x) \otimes \hat{\rho}_n(y), \quad \sum_n p_n = 1. \quad (1.28)$$

1.3. Квантовые двухуровневые информационные ячейки-кубиты

Естественными квантовыми двухуровневыми элементами являются отдельные электронные и ядерные спины $I = 1/2$, состояния которых описываются двухкомпонентными спиновыми волновыми функциями-спинорами, представляющими собой *векторы состояния* в двухмерном гильбертовом пространстве \mathcal{H}_2 . При описании состояний квантовых

двухуровневых элементов другой неспиновой природы часто пользуются аналогичными понятиями *псевдоспинора* и *псевдоспина*.

Для описания состояний спиноров будем далее пользоваться обозначениями Дирака. Векторы состояния $|\alpha\rangle$ представляются двухрядными матрицами-столбцами. Стандартным базисом для описания состояний квантовых двухуровневых элементов являются собственные состояния z -компоненты спинового момента. *Основному* состоянию спина $\alpha = 0$ соответствует отличная от нуля верхняя строка столбца вектора:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.29)$$

а возбужденному $\alpha = 1$ — нижняя:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Векторы $\langle\alpha|$ образуют эрмитово-сопряженные матрицы-строки $\langle\alpha| = |\alpha\rangle^+$. Для протона при $|0\rangle = |\uparrow\rangle$ спиновый момент направлен по магнитному полю и при $|1\rangle = |\downarrow\rangle$ — против поля, а для электрона — наоборот.

Квантовый двухуровневый элемент в отличие от классического может находиться не только в каком-то одном из двух чистых базисных состояний, но и в обоих состояниях *одновременно*: $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$, $|a|^2 + |b|^2 = 1$, то есть вектор состояния может представлять собой произвольную *когерентную суперпозицию* базисных состояний или другими словами вектор состояний кубита может оканчиваться в любой точке окружности единичного радиуса в *двухмерном* гильбертовом пространстве \mathcal{H}_2 . Измерение такого квантового состояния состоит в определении коэффициентов разложения, или, другими словами, проекций измеряемого состояния на базисные состояния: $a = \langle 0|\psi\rangle$, $b = \langle 1|\psi\rangle$.

Условие *ортонормированности* векторов состояний имеет вид:

$$\langle\alpha'|\alpha\rangle = \delta_{\alpha',\alpha}. \quad (1.31)$$

Двухуровневый квантовый элемент, способный находиться в таком общем суперпозиционном состоянии, был назван Б. Шумахером *кубитом* (quantum bit \equiv qubit) [1.22]. Кубитом, аналогично классическому биту, стала называться также и единица количества квантовой информации.

Кодирование информации осуществляется последовательностью состояний отдельных кубитов. Энтропия фон Неймана квантового ансамбля является средним значением числа кубитов, необходимых для кодирования состояний ансамбля в идеальной схеме. Кубит — более общее понятие, чем бит, поскольку допускает кодировать большее количество информации, а совокупность кубитов способна образовывать запутанные состояния (см. ниже), не существующие в классических системах.

Собственному представлению оператора спиновой плотности чистого состояния отдельного спина-кубита $\hat{\rho}$ соответствует диагональная матрица, выражающаяся через ортонормированные векторы состояния:

$$\hat{\rho}(\alpha) \equiv |\alpha\rangle\langle\alpha|, \tag{1.32}$$

где двум его состояниям соответствуют матрицы плотности

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{1.33}$$

при этом

$$\text{Sp } \hat{\rho}(\alpha) = 1, \tag{1.34}$$

то есть для каждого значения $\alpha = 0$ и 1 у кубита в чистом состоянии имеется только *одно ненулевое* собственное значение матрицы, равное 1 .

Состояние ансамбля, состоящего из L кубитов, описывается вектором состояния в 2^L -мерном гильбертовом пространстве, представляемым матрицей с размерностью $2^L \times 2^L$. Такую же размерность имеет и матрица плотности ансамбля кубитов. Соответственно, число нулевых собственных значений в матрице плотности L -кубитового чистого состояния равно $2^L - 1$.

Для энтропии фон Неймана одного кубита с помощью (1.33) получим

$$S(\rho) = -\text{Sp } \hat{\rho}(\alpha) \log_2 \hat{\rho}(\alpha) = 0. \tag{1.35}$$

Это значит, что энтропия чистого состояния имеет наименьшее возможное значение или что чистое состояние обеспечивает *максимальную полноту* информации о системе, и эта полнота сохраняется, если чистота (когерентность) состояния не разрушается. Сказанное справедливо и в случае чистого состояния самого общего вида.

При выбранном базисе в случае *смешанного* (некогерентного) состояния, в соответствии с (1.20), (1.32), матрица плотности получает диагональный вид

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \cdot \hat{\rho}(\alpha) = \begin{pmatrix} p_0 & 0 \\ 0 & p_1 \end{pmatrix}, \quad \sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1, \quad (1.36)$$

и, следовательно, энтропия фон Неймана совпадает с энтропией Шеннона:

$$S(\rho) = H = - \sum_{\alpha} p_{\alpha} \cdot \log_2 p_{\alpha}. \quad (1.37)$$

Существенное отличие возникает, если чистые спиновые состояния представляются произвольной суперпозицией вида:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} a & 0 \\ b & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \\ \langle\psi| &= a^*\langle\uparrow| + b^*\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} a^* & b^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.38)$$

где предполагается выполнение условия нормировки

$$\langle\psi|\psi\rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (1.39)$$

Матрица плотности чистого состояния одного кубита в этом случае не является уже диагональной и в базисном представлении имеет вид

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* \\ ba^* & |b|^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + s_z & s_x + is_y \\ s_x - is_y & 1 - s_z \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

или в операторной форме

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (\hat{1} + \mathbf{s}\hat{\sigma}). \quad (1.41)$$

Ее недиагональные элементы $(s_x \pm is_y)/2$ описывают когерентность чистого состояния в этом представлении. Классический единичный вектор \mathbf{s} с составляющими s_x , s_y и s_z , который упирается в поверхность, называемую *сферой Блоха*, носит название *вектора Блоха*. Векторный оператор Паули $\hat{\sigma}$ имеет составляющие $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$,

$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ — операторы-матрицы Паули. Таким образом, эволюцию матрицы плотности кубита можно выразить через эволюцию трехмерного вектора Блоха $s = \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{\sigma})$, который можно рассматривать как классическую модель кубита (или спина $I = 1/2$). Энтропия Шеннона такого чистого состояния (1.40) подобна энтропии смешанного состояния с вероятностями заполнения состояний (*населенностями*) $\rho_{00} = |a|^2$, $\rho_{11} = |b|^2 = 1 - |a|^2$, поскольку не учитывает недиагональных элементов $\rho_{01} = \rho_{10}^* = ab^*$, описывающих *когерентность* состояния. Она определяется выражением

$$H(|a|^2) = -|a|^2 \log_2 |a|^2 - (1 - |a|^2) \log_2 (1 - |a|^2), \quad (1.42)$$

которое достигает максимального значения при $|a|^2 = |b|^2 = 1/2$, равного $H = \log_2 2$ или одному биту.

Важно отметить то, что отличие матрицы плотности чистого состояния от матрицы плотности смешанного состояния заключается и в том, что матрица плотности чистого состояния имеет *только одно равное единице* собственное значение, а у матрицы плотности смешанного состояния отличны от нуля несколько собственных значений — населенностей отдельных парциальных чистых состояний.

Энтропия фон Неймана, определяемая через матрицу плотности $\hat{\rho}$, в отличие от энтропии Шеннона, инвариантна относительно выбора представления для матрицы плотности. Переходя в (1.18) к диагональному представлению, получим:

$$S(\rho) = -\text{Sp} \hat{\rho} \log_2 \hat{\rho} = -\sum_n \lambda_n \log_2 \lambda_n, \quad (1.43)$$

где $\lambda_n = 0, 1$ — собственные значения матрицы чистого состояния (1.40). В результате, в согласии с (1.22), получим $S(\rho) = 0 < H$.

1.4. Запутывание квантовых состояний

1.4.1. Чистые состояния

Одним из наиболее интересных свойств чистых квантовых состояний, принципиально отличающих их от классических, является *запутывание* (entanglement) состояний, определяемое своеобразной *нелокальной* корреляцией состояний квантовых структур. Эти состояния играют очень важную роль в различных процессах передачи и обработки

квантовой информации [1.28, 1.29]. Хотя понятие запутывания (немецкий термин — *Verschränkung* — скрещивание) было введено Шредингером еще в 1935 году [1.30], большое внимание оно привлекло к себе лишь с 1993 года в связи с обнаруженной Беннеттом с сотрудниками [1.31] возможностью его использования в качестве квантового канала для передачи (*телепортации*) *неизвестного* квантового состояния двухуровневой системы от отправителя A к получателю B (в литературе их обычно называют Alice и Bob) без реального перемещения самой системы. Эта мысль стала далее основой для развития принципиально нового метода секретной передачи информации (*криптографии*). Перечень возможных приложений этого состояния уже достаточно велик. Явление запутывания квантовых состояний играет важную роль в квантовых компьютерах. Оно является корнем ожидаемых успехов квантовых вычислительных процессов, поскольку открывает принципиально новые возможности плотного и помехоустойчивого кодирования информации и более эффективного управления ею, позволяет организовать существенное *ускорение* отдельных вычислительных процессов и обеспечить *квантовый параллелизм* обработки информации. Количество возможных приложений запутанных состояний растет. Развитие теории запутанных состояний способствует также и более глубокому пониманию основных законов квантовой физики и, в частности, физики взаимодействия квантового объекта и измерительного устройства.

Здесь мы ограничимся рассмотрением тех свойств запутанных состояний, которые существенны для бурно развивающейся области квантовых вычислительных процессов. В последующих разделах будут рассмотрены некоторые конкретные примеры проявления и использования свойств запутанных состояний.

Если имеется *два двухуровневых* элемента-кубита A и B , например, атом с электронным и ядерным спином, молекула с двумя ядерными спинами $I_{A,B} = 1/2$, то можно выбрать в качестве базисных четыре четырехкомпонентных составляющих прямого произведения базисных состояний отдельных кубитов следующие вектора

$$|0_A 0_B\rangle = |0_A\rangle \otimes |0_B\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.44)$$

и, соответственно, $|0_A 1_B\rangle$, $|1_A 0_B\rangle$ и $|1_A 1_B\rangle$. Чистое квантовое состоя-

ние такой системы в общем виде описывается суперпозицией чистых двухкубитовых состояний следующего вида

$$|\psi_{AB}\rangle = a|0_A0_B\rangle + b|0_A1_B\rangle + c|1_A0_B\rangle + d|1_A1_B\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}, \quad (1.45)$$

где

$$\langle \Psi_{AB} | \Psi_{AB} \rangle = |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1 \quad (1.46)$$

— скалярное произведение векторов состояний. Число комплексных постоянных теперь равно четырем. Для L кубитов их число составит 2^L , то есть равно размерности гильбертова пространства всей системы.

В общем случае, когда $ad \neq bc$, двухкубитовое состояние (1.45) не представляется в виде одного прямого произведения независимых векторов состояний двух кубитов

$$|\psi_{AB}\rangle \neq (a_A|0_A\rangle + b_A|1_A\rangle) \otimes (a_B|0_B\rangle + b_B|1_B\rangle), \quad (1.47)$$

то есть такое состояние *несепарабельно* (nonseparable).

Это значит, что благодаря наличию взаимодействия для подсистем A и B возникает нелокальная корреляция, которая имеет чисто квантовый характер, принципиально отличающий ее от классической корреляции, описываемой в случае двух кубитов матрицей плотности смешанного состояния типа

$$\hat{\rho} = p_1|00\rangle\langle 00| + p_2|10\rangle\langle 10| + p_3|01\rangle\langle 01| + p_4|11\rangle\langle 11|, \quad (1.48)$$

где p_i — населенность или вероятности i -го состояния в рассматриваемом представлении, $p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1$.

Указанное свойство когерентных квантовых состояний и называется *запутыванием*. В частности, пары элементов, находящихся в запутанном состоянии с $b = c = 0$, $a = d = \pm 1/\sqrt{2}$, называют двухкубитным состоянием «шредингеровского кот», а с $a = d = 0$, $b = -c = \pm 1/\sqrt{2}$ — синглетной EPR (Einstein–Podolsky–Rosen)-парой:

$$|\psi_{AB}\rangle_{EPR} = \sqrt{1/2}(|0_A1_B\rangle - |1_A0_B\rangle). \quad (1.49)$$

Матрица плотности запутанного EPR состояния

$$|\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|_{EPR} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.50)$$

имеет, как и любое чистое состояние, только одно отличное от нуля собственное значение, равное единице.

Характерной особенностью запутанных (entangled) или несепарабельных состояний является то, что для их создания необходимы нелокальные унитарные преобразования, то есть действующие одновременно на разные кубиты (запутанные состояния двух кубитов рассматриваются ниже). Эта квантовая корреляция, возникнув благодаря некоторому взаимодействию между кубитами, способна сохраняться и далее, когда это взаимодействие становится несущественным, при условии сохранения когерентности квантового состояния.

Общее выражение для вектора состояния двух кубитов (1.45) может быть представлено также в виде следующего *разложения Шмидта*:

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i=1,2} c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle, \quad \sum_{i=1,2} c_i^2 = 1, \quad (1.51)$$

где

$$\begin{aligned} |\alpha_1\rangle &= \frac{|0_A\rangle + \gamma|1_A\rangle}{\sqrt{1 + |\gamma|^2}}, & |\alpha_2\rangle &= \frac{\gamma|0_A\rangle - |1_A\rangle}{\sqrt{1 + |\gamma|^2}}, \\ |\beta_1\rangle &= \frac{|0_B\rangle + \delta|1_B\rangle}{\sqrt{1 + |\delta|^2}}, & |\beta_2\rangle &= \frac{\delta|0_B\rangle - |1_B\rangle}{\sqrt{1 + |\delta|^2}} \end{aligned} \quad (1.52)$$

— четыре новых ортонормированных когерентных вектора состояний для двухуровневых элементов A и B , а c_i — два *вещественных* и *положительных* (фазовые множители можно всегда отнести к исходным векторам состояния) коэффициента Шмидта, которые вместе с параметрами δ и γ могут быть выражены через введенные выше коэффициенты a , b , c , и d .

При этом матрица плотности в этом представлении принимает вид:

$$\begin{aligned} |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| &= c_1^2 |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| \otimes |\beta_1\rangle\langle\beta_1| + c_1 c_2 |\alpha_1\rangle\langle\alpha_2| \otimes |\beta_1\rangle\langle\beta_2| + \\ &+ c_1 c_2 |\alpha_2\rangle\langle\alpha_1| \otimes |\beta_2\rangle\langle\beta_1| + c_2^2 |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| \otimes |\beta_2\rangle\langle\beta_2|. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Когда некоторая замкнутая квантовая система находится в чистом состоянии в качестве *меры запутанности*, для состояния ее части вводится *энтропия запутанности* или просто *запутанность*. Так, в простейшем случае для чистого состояния системы $|\psi_{AB}\rangle$, состоящей всего из двух подсистем (кубитов), относящихся к отправителю A и получателю информации B , энтропия запутанности состояния одной из подсистем выражается через соответствующую энтропию фон Неймана [1.32, 1.33]

$$E(\rho) = -\text{Sp } \hat{\rho}_A \log_2 \hat{\rho}_A = -\text{Sp } \hat{\rho}_B \log_2 \hat{\rho}_B, \quad (1.54)$$

для *приведенных* (reduced) операторов плотности

$$\hat{\rho}_A = \text{Sp}_B |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|, \quad \hat{\rho}_B = \text{Sp}_A |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|, \quad (1.55)$$

которые имеют смысл операторов плотности смешанного состояния с точки зрения, соответственно, наблюдателей A и B .

В связи с изложенным заметим, что энтропию фон Неймана смешанного состояния квантовой системы A , являющейся подсистемой некоторой замкнутой системы, можно рассматривать также как меру запутанности ее состояний с состояниями окружения B , и наоборот (сравни (1.55)).

В качестве *единицы запутанности* обычно принимают энтропию запутанности *максимально* запутанного состояния пары элементов. Ее называют кубитом запутанности или *забитом* [1.28] (entangled qubit \equiv \equiv ebit [1.29]). Запутанность двух кубитов изменяется от нуля для незапутанных и до одного забита для максимально запутанных состояний. В отличие от кубита забит характеризует *нелокальную* квантовую корреляцию состояний двух элементов, сохраняющуюся и в том случае, когда партнеры пары разнесены на большие расстояния.

Для определения максимально запутанного состояния двух спиновых кубитов воспользуемся далее разложением Шмидта (1.51). Тогда для оператора $\hat{\rho}_A$ (и аналогично для $\hat{\rho}_B$) получим выражение

$$\hat{\rho}_A = \sum_{i=1,2} c_i^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|, \quad (1.56)$$

где коэффициенты c_i^2 являются собственными значениями оператора $\hat{\rho}_A$, они имеют смысл вероятностей найти элемент в чистом состоянии $|\alpha_i\rangle$. Поэтому энтропия запутанности теперь выражается через

энтропию фон Неймана соответствующего смешанного состояния:

$$E(\rho) = -\text{Sp } \hat{\rho}_A \log_2 \hat{\rho}_A = -\text{Sp } \hat{\rho}_B \log_2 \hat{\rho}_B = -\sum_{i=1,2} c_i^2 \log_2 c_i^2. \quad (1.57)$$

Число отличных от нуля собственных значений c_i^2 приведенных матриц плотности $\hat{\rho}_A$ (1.56) или $\hat{\rho}_B$ называется *числом Шмидта* состояния $|\psi_{AB}\rangle$. В случае двух кубитов оно не превышает двух, для запутанного состояния оно равно двум. Если $c_1^2 = 0$ или $c_2^2 = 0$, то состояния $|\psi_{AB}\rangle$ являются незапутанными (сепарабельными). В этом случае из (1.53) для матрицы плотности чистого незапутанного состояния двух кубитов следует

$$|\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| = |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| \otimes |\beta_1\rangle\langle\beta_1|. \quad (1.58)$$

В качестве меры запутанности для двухкубитного состояния (1.45) можно также принять величину C , называемую *согласованностью* (concurrence) и определяемую выражением

$$C = 2(ad - bc) = 2c_1c_2 = 2c_1\sqrt{1 - c_1^2}, \quad (1.59)$$

откуда получим

$$c_1^2 = \frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}, \quad 0 \leq C \leq 1. \quad (1.60)$$

Максимальное значение запутанности состояний для пары двухуровневых элементов достигается при $c_i^2 = 1/2$, то есть при согласованности $C = 1$ оно составляет $E_{\max}(\rho) = \log_2 2 = 1$ бит.

Полагая $c_2 = c_1 = \sqrt{1/2}$, с помощью (1.51) и (1.52) получим для вектора *максимально запутанного* чистого состояния выражение:

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1 + |\gamma|^2)(1 + |\delta|^2)}} \left\{ (1 + \gamma\delta)(|0_A0_B\rangle + |1_A1_B\rangle) + (\gamma - \delta)(|1_A0_B\rangle - |0_A1_B\rangle) \right\}. \quad (1.61)$$

При $\delta = -\gamma = 1$ состояние $|\psi_{AB}\rangle$ соответствует двухкубитовому антисимметричному *синглетному* EPR (A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen)-состоянию, а $|\psi_{AB}\rangle$ — двухкубитовой суперпозиции симметричных

триплетных состояний типа шредингеровского кота. Среднее значение проекции оператора полного спина $\hat{s}_{Az} + \hat{s}_{Bz}$ ($2\hat{s}_z = \hat{\sigma}_z$) в синглетном максимально запутанном состоянии

$$\langle \psi_{AB} | \hat{s}_{Az} + \hat{s}_{Bz} | \psi_{AB} \rangle = 0. \quad (1.62)$$

Синглетное состояние для спинов является основным для антиферромагнитного характера обменного взаимодействия $J > 0$.

Более сложные запутанные состояния могут образовываться из суперпозиции многокубитных состояний.

Запутанность квантовых состояний в силу своей нелокальности, не может быть создана из незапутанных состояний или увеличена путем использования только локальных унитарных операций (то есть воздействием только со стороны A или B), а также классических принципов связи [1.28, 1.29]. Однако это не исключает использование только локальных операций для *обратимого* преобразования запутанного состояния одной пары элементов рассматриваемой системы в запутанное состояние другой пары. Так для систем, состоящих из большого числа двухуровневых элементов, энтропия запутанности состояния может быть выражена через энтропию пар, которые находятся только в *синглетном* состоянии, число таких пар и будет определять число забит для этого квантового состояния.

1.4.2. Смешанные состояния

Энтропия запутанности (1.52) является *хорошей* мерой запутанности *чистого* состояния системы [1.29]. В условиях же реального эксперимента квантовые состояния оказываются *смешанными*, и запутанность состояний достигает меньшего значения, чем это возможно для чистых состояний. Однако оказывается возможным с помощью только локальных унитарных операций выделение из смешанного ансамбля передаваемых сигналов, описываемого частично запутанным состоянием, подансамбля с более высокой средней запутанностью, что было названо *концентрацией запутанности* [1.32]. Это достигается с помощью процедуры *очистки* (purification, distillation), как для частично запутанного чистого, так и смешанного состояния.

Очистка запутанности, как и *сжатие* (compression) квантовой информации [1.29, 1.32], состоят в проектировании гильбертова пространства неполного ансамбля чистых состояний $|\psi_n\rangle$, генерируемых источ-

ником сигнала с вероятностями p_n , на ортогональное гильбертово подпространство меньшей размерности. Однако между этими двумя подходами имеется и существенное различие.

Сжатие квантовой информации может производиться отдельно с помощью локальных операций для каждой из двух подсистем A и B . Это возможно в том случае, если подсистема имеет энтропию, меньшую чем максимальное значение, и формируется (см. раздел 1.2.2) из неортогональных состояний. На этом условии основана теорема Шумахера об оптимальном кодировании квантовой информации в длинных сообщениях при отсутствии шумов [1.22], обобщающей аналогичную теорему Шеннона в классической теории информации. В результате одностороннего сжатия информации в отдельных подсистемах запутанность состояния всей системы не достигает максимального значения, поскольку коэффициенты c_i в разложении Шмидта, вообще говоря, не являются одинаковыми. В отличие от сжатия информации, которая производится с помощью локальных операций для отдельных подсистем, операция концентрации запутанности выполняется для всей системы в целом.

В качестве меры запутанности в смешанном ансамбле предлагается [1.29, 1.32–1.34] ввести *запутанность формирования* (entanglement of formation) $E_F(\rho)$, определяемую *минимальным числом* максимально запутанных (синглетных) парных состояний, необходимых для представления состояния, описываемого оператором плотности смешанного состояния $\hat{\rho} = \sum_n p_n \hat{\rho}_n$,

$$E_F(\rho) = \min_{\rho} \sum_n p_n E(\rho_n), \quad (1.63)$$

где минимум определяется по отношению ко всем возможным реализациям смешанного ансамбля. Оказывается, можно создать *максимально запутанные смешанные состояния*, такие, для которых запутанность не может быть увеличена далее никакими унитарными операциями [1.36]. К сожалению, конкретное вычисление этой меры, как и других — непростая задача даже для двух кубитов.

Запутанность формирования E_F определяют через значение согласованности C , она может быть найдена из матрицы плотности смешанного состояния двух кубитов с помощью выражения [1.37]:

$$E_F = H\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}\right), \quad (1.64)$$

где

$$H(x) = -x \log_2 x - (1-x) \log_2(1-x) \quad (1.65)$$

— функция энтропии Шеннона для двух кубитов (сравни (1.42)). Примером многокубитовой системы, находящейся в смешанном состоянии, может быть бесконечная цепочка кубитов, в которой состояние каждого кубита запутано только с состояниями ближайших соседей, а состояние всей цепочки инвариантно относительно сдвига каждого кубита из начального положения j в положение $j+n$ для любого целого n [1.38].

Рассмотрим сначала состояние цепочки $|z_0\rangle$, в которой кубиты с номерами j и $j+1$ образуют синглетные запутанные пары, но не образуют запутанных состояний с левыми ($j-1$) кубитами:

$$|z_0\rangle = \dots \otimes \left(\frac{|0\rangle_0|1\rangle_1 - |1\rangle_0|0\rangle_1}{\sqrt{2}} \right) \otimes \left(\frac{|0\rangle_2|1\rangle_3 - |1\rangle_2|0\rangle_3}{\sqrt{2}} \right) \otimes \dots \quad (1.66)$$

Это состояние является трансляционно-инвариантным относительно четных смещений, но не является запутанным для всей цепочки, так как отдельные кубиты запутаны только с одним из соседей. Матрица плотности для незапутанных двух соседних кубитов в положениях $j=1$ и $j=2$ соответствует полностью смешанному состоянию:

$$\hat{\rho}_0(1,2) = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}. \quad (1.67)$$

Состояние, смещенное по сравнению с (1.66) на одну позицию вправо $|z_1\rangle$, имеет ту же трансляционную инвариантность:

$$|z_1\rangle = \dots \otimes \left(\frac{|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2}{\sqrt{2}} \right) \otimes \left(\frac{|0\rangle_3|1\rangle_4 - |1\rangle_3|0\rangle_4}{\sqrt{2}} \right) \otimes \dots, \quad (1.68)$$

но теперь матрица плотности для двух кубитов в положениях $j=1$ и $j=2$ соответствует уже чистому запутанному состоянию

$$\hat{\rho}_1(1,2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.69)$$

Равная смесь этих двух состояний $\hat{\rho} = (\hat{\rho}_0 + \hat{\rho}_1)/2$ инвариантна относительно нечетных смещений и оказывается запутанным смешанным состоянием по всей цепочке. Для определения максимального значения запутанности формирования E_F такого состояния достаточно теперь определить согласованность C для состояний кубитов в положениях $j = 1, j = 2$, которая равна $C = 1/4$ [1.38]. В указанной работе было также показано, что можно построить однородную запутанную цепочку и с максимальным значением $C = 0,434467$ и $E_F(\rho)_{\max} = 0,284934$ забит.

Другой мерой запутанности является *очищенная* (distillable, purified) *запутанность* $E_D(\rho)$ [1.29, 1.32, 1.39], определяемая *наибольшим числом* синглетных пар, которые можно экстрагировать из ансамбля с помощью классических и квантовых локальных операций очистки. Для чистого состояния запутанность формирования и очищенная запутанность совпадают и равны энтропии запутанности $E(\rho)$, которая определяет таким образом *верхнюю* границу эффективности очистки. Для смешанного состояния знак разности $E(\rho) - E_D(\rho)$ нельзя обратить с помощью только локальных операций. В общем случае значение $E_D(\rho)$ зависит от процесса очистки и для нее отсутствует универсальный способ ее вычисления.

Для необратимых преобразований были предложены и альтернативные подходы, в одном из которых для смешанного состояния вводится мера, называемая *относительной энтропией запутанности* $0 \geq E_R(\rho) \geq E_F(\rho)$, которая является *мерой отклонения* данного квантового состояния пары элементов A и B , описываемого оператором плотности $\hat{\rho}_{AB}$ от незапутанного состояния с соответствующим сепарабельным оператором плотности $\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$ [1.27, 1.29, 1.39]:

$$E_R(\rho) = - \min_{\rho_A \otimes \rho_B} \hat{\rho}_{AB} \left(\log_2(\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B) - \log_2 \hat{\rho}_{AB} \right), \quad (1.70)$$

где минимум определяется по всем реализациям ансамбля, описываемого оператором $(\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B)$. Относительная энтропия запутанности определяет верхний предел эффективности очистки запутанности.

В другом подходе вводится *запутанность содействия* (assistance) E_A , определяемая выражением [1.41]:

$$E_A(\rho) = \max_{\rho} \sum_n p_n E(\rho_n), \quad (1.71)$$

которая является мерой ресурса запутывания, имеющегося в системе. В отличие от приведенных выше мер запутанности, обладающих свойством аддитивности, эта мера характеризуется свойством супераддитивности:

$$E_A(\rho_{AB1} \otimes \rho_{AB2}) > E_A(\rho_{AB1}) + E_A(\rho_{AB2}). \quad (1.72)$$

На существование формальной аналогии между понятиями термодинамики и понятиями запутанности обращается внимание в работах [1.29, 1.34, 1.42]. Отметим здесь аналогию между термодинамической энтропией, которая согласно второму началу термодинамики не может уменьшаться в замкнутой системе за счет внутренних процессов, и разностью энтропий $E(\rho) - E_D(\rho)$, которая не может уменьшаться в системе за счет только локальных операций. В другой формулировке [1.29] это можно выразить как аналогию между невозможностью создать *обратимую* тепловую машину, более эффективную, чем идеальная машина, рассмотренная Карно, и невозможностью лучшей *обратимой* очистки состояния, чем идеальная процедура, рассмотренная Беннеттом, Бернштейном, Попеску и Шумахером [1.32].

Обратим наконец внимание на одну важную отличительную особенность запутанных или несепарабельных состояний. В общем случае условная энтропия фон Неймана подсистемы A полной системы AB , описываемой оператором плотности $\hat{\rho}_{AB}$, при условии, что состояние подсистемы B известно, имеет вид [1.27]:

$$S_{A/B} = -\text{Sp} \hat{\rho}_{AB} \log_2 \hat{\rho}_{A/B} = -\text{Sp} \hat{\rho}_{AB} \log_2 \hat{\rho}_{AB} + \text{Sp} \hat{\rho}_B \log_2 \hat{\rho}_B, \quad (1.73)$$

где

$$\log_2 \hat{\rho}_{A/B} = \log_2 \hat{\rho}_{AB} - \log_2 (\hat{1}_A \otimes \hat{\rho}_B) \quad (1.74)$$

— квантовый аналог логарифма классической условной вероятности.

Пусть система AB находится в чистом состоянии, тогда ее энтропия фон Неймана $S_{AB} = -\text{Sp} \hat{\rho}_{AB} \log_2 \hat{\rho}_{AB} = 0$. При наличии запутанности состояний подсистем A и B энтропия запутанности $E(B) = -\text{Sp} \hat{\rho}_B \log_2 \hat{\rho}_B > 0$, и, следовательно, согласно (1.73), условная энтропия $S_{A/B}$ оказывается *отрицательной*. Другими словами, в квантовом случае может возникнуть невозможная в классической теории информации ситуация, когда энтропия полной системы S_{AB} может быть

меньше энтропии одной из ее частей $S_B = E(B)$. В этом случае собственные значения квантового аналога условной вероятности — оператора $\hat{\rho}_{A/B}$ превышают единицу, то есть не имеют смысла вероятностей. С другой стороны, если все собственные значения оператора $\hat{\rho}_{A/B} \leq 1$ (это необходимое и достаточное условие), то состояние полной системы сепарабельно, то есть не образует запутанных состояний. Это справедливо для любой размерности гильбертова пространства. Что касается взаимной квантовой энтропии $S_{A:B} = S_A - S_{A/B}$, то она, как и информация Холево $D(\rho)$ (1.26), остается всегда положительной.

Таким образом, принципиальное отличие квантовой энтропии от классической, являющейся только мерой недостатка информации о рассматриваемой системе, состоит в учете квантовых корреляций типа запутывания состояний.

1.5. Декогерентизация

1.5.1. Основные понятия

Декогерентизация квантовых состояний в открытой макроскопической системе при переходе к равновесному состоянию, впервые рассмотренная Л. Ландау еще в 1927 году [1.43], является типичным необратимым процессом. Она и связанные с ней проблемы в настоящее время привлекли к себе большое внимание в связи с бурным развитием квантовой теории информации и квантовых вычислений. Это явление является и одним из основных ограничивающих факторов на пути создания квантовых компьютеров.

Заметим, что матрица плотности как чистого, так и смешанного состояния, в произвольном представлении имеет не только диагональные, но и недиагональные элементы. Поэтому о квантовой когерентности, описываемой недиагональными элементами матрицы плотности, имеет смысл говорить лишь при определенном *выборе представления* для этой матрицы. Понятие декогерентизации, как физического процесса затухания недиагональных элементов матрицы плотности, обусловленного взаимодействием квантовой системы с окружением, также требует определения этого представления. Следовательно, следует определить объективный способ выбора базиса такого представления. Этим базисом могут быть такие ортогональные состояния квантовой системы (включающей, в частности, и измерительное устройство), которые *минимально* запутаны с окружением в течение всего

процесса эволюции квантовой системы. Они называются *состояниями-указателями* («pointer» states).

Начальное чистое состояние квантовой системы $\widehat{\rho}(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$ с течением времени благодаря взаимодействию с окружением запутывается с его состояниями. Запутанность этого состояния определяется выражением $E(\rho) = -\text{Sp} \widehat{\rho}(t) \log_2 \widehat{\rho}(t)$, где $\widehat{\rho}(t)$ — приведенный оператор плотности квантовой системы, то есть полученный путем взятия следа от общего оператора плотности $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ по неконтролируемым степеням свободы окружения (см. (1.54)). Требуемые для представления матрицы плотности квантовой системы базисные состояния-указатели определяются с помощью минимизации $E(\rho)$ относительно $|\psi(0)\rangle$ и условия их относительной стабильности с течением времени [1.44]. Природа определенных таким образом состояний существенным образом зависит от вида спектральной плотности распределения частот окружения и их относительной роли в образовании запутанных состояний гамильтониана изолированной квантовой системы и гамильтониана взаимодействия ее с окружением. В случае, когда характерные частоты ν_C спектральной плотности окружения малы по сравнению с характерными частотами квантовой системы или когда гамильтонианы квантовой системы и взаимодействия ее с окружением коммутируют между собой, состояниями-указателями оказываются собственные функции гамильтониана квантовой системы, то есть соответствующее представление является *энергетическим*.

В энергетическом представлении процессы диссипации и декогерентизации уже четко разделяются и имеют свои временные масштабы. Непрерывное затухание диагональных в энергетическом представлении элементов матрицы плотности в открытой квантовой системе, связанное с диссипацией энергии неравновесной системы при ее взаимодействии с окружением, характеризуется *временем релаксации энергии*, которое часто значительно больше *времени декогерентизации*. В результате эволюции квантовой системы матрица плотности приобретает диагональный вид смешанного состояния. При этом происходит так называемый суперотбор (superselection), разрушающий стабильную суперпозицию состояний-указателей энергетического представления.

В собственном представлении, в котором матрица плотности системы диагональна (это уже не энергетическое представление), процессы затухания матричных элементов будут описываться более сложным образом, не разделяясь на диссипацию и декогерентизацию.

Явление декогерентизации хорошо известно в физике разного рода двухуровневых систем и, в частности, в ядерном магнитном резонансе (ЯМР) [1.45, 1.46], где время релаксации энергии характеризуется сравнительно большим продольным или «спин-решеточным» временем релаксации T_{\parallel} (или T_1) (для протонов в воде это секунды), а время фазовой дефокусировки (время декогерентизации) — поперечным временем релаксации T_{\perp} (или T_2), $T_{\perp} \leq T_{\parallel}$. При этом обратное значение времени T_{\perp}^{-1} , определяющее ширину резонансной линии ЯМР, содержит две составляющие — одну, определяемую взаимодействием ядерных спинов с окружением — «решеткой» (в жидкости это взаимодействие с другими спинами, модулированное вращательными, поступательными и колебательными движениями молекул). Она называется *однородным уширением*. Другая составляющая, если характеризовать ее обратной величиной некоторого эффективного временного параметра $(T_{\perp}^*)^{-1}$, определяется случайным разбросом резонансных частот отдельных спинов в системе из-за неоднородности распределения статического внешнего и внутреннего магнитного поля и называется *неоднородным уширением*. Последняя составляющая уширения в определенных условиях может быть много больше первой. Процесс фазовой дефокусировки, связанный с неоднородным уширением резонансной линии, как известно, является обратимым и сам по себе не приводит к необратимой потере информации о начальном состоянии двухуровневых систем за время $T_{\perp}^* \ll t \leq T_{\parallel}$. Она может быть частично восстановлена, что осуществляется, например, при наблюдении спинового эха и в методах ЯМР высокого разрешения [1.47, 1.48]. Подобные методы предполагается в настоящее время использовать для активного динамического подавления декогерентизации в существующих прототипах квантовых компьютерах (см. раздел 4.5).

Рассмотрим подробнее явление декогерентизации на простейшем примере. Предполагая, что отдельные кубиты в системе независимо взаимодействуют с окружением, декогерентизацию их запутанных состояний будем рассматривать как результат независимой декогерентизации отдельных кубитов. При этом будем предполагать, что характерная частота воздействия окружения на спины ν_C мала по сравнению с частотой переходов спинов между энергетическими уровнями ω_0 ($\nu_C \ll \omega_0$) и поэтому релаксации энергии практически не происходит (это известное *адиабатическое приближение* в теории ширины линии ядерного магнитного резонанса [1.45]). В этом случае основной

причиной декогерентизации являются не диссипация энергии, а фазовые шумы, приводящие к появлению сдвига фазы состояния $|1\rangle$, который будем считать случайной функцией времени $\varphi(t) = \int_0^t \nu(t) dt$.

Чистое состояние кубита с учетом фазовых шумов вида

$$|\psi\rangle \approx \sqrt{1/2} \left(|0\rangle + e^{i\varphi(t)} |1\rangle \right) \quad (1.75)$$

определяет матрицу плотности соответствующего однокубитового состояния, которая после усреднения по распределению случайных фаз для ансамбля кубитов будет иметь вид

$$\langle \rho(L=1) \rangle = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & \langle e^{i\varphi(t)} \rangle \\ \langle e^{i\varphi(t)} \rangle & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.76)$$

Если теперь предположить, что случайная функция $\varphi(t)$ подчиняется гауссовскому распределению, то будем иметь:

$$\langle e^{i\varphi(t)} \rangle = \exp\left(-\int_0^t (t-\tau) \langle \nu(\tau) \nu(0) \rangle d\tau\right), \quad (1.77)$$

где $\langle \nu(\tau) \nu(0) \rangle$ — корреляционная функция случайных частот. Выражение (1.77) при малом времени корреляции $\tau_C = \nu_C^{-1}$, таком, что $\tau_C^2 \langle \nu^2(0) \rangle \ll 1$ (случай «сильного сужения» резонансной линии) [1.45], сводится к $\exp(-\gamma_D t)$, где $\gamma_D \approx \langle \nu^2(0) \rangle \tau_C$ — скорость процесса декогерентизации кубита. В противоположном случае «жесткой решетки», когда $\tau_C^2 \langle \nu^2(0) \rangle \gg 1$, выражение (1.77) приводится к $\exp(-\langle \nu^2(0) \rangle t^2 / 2)$.

Для запутанного состояния L кубитов, например, типа суперпозиции L -кубитового состояния «шредингеровского кота»

$$|\psi\rangle = \sqrt{1/2} \left(|0_1, 0_2, \dots, 0_L\rangle + |1_1, 1_2, \dots, 1_L\rangle \right), \quad (1.78)$$

для усредненной матрицы плотности при наличии фазовых шумов, переходя к базису $|0_1, 0_2, \dots, 0_L\rangle$ $|1_1, 1_2, \dots, 1_L\rangle$ в случае сильного сужения теперь получим

$$\langle \rho(L) \rangle = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & e^{-L\gamma_D t} \\ e^{-L\gamma_D t} & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.79)$$

то есть запутанные состояния «кота» декогерентизируются с эффективной скоростью $L\gamma_D$. Соответственно, экспоненциально растет с числом кубитов L и вероятностью ошибок. Этот пример демонстрирует очень быструю декогерентизацию сложных запутанных состояний и их высокую чувствительность к возмущениям со стороны окружения, по сравнению с состояниями макроскопических классических логических элементов.

Если рассматривать любой макроскопический объект как открытую квантовую систему с очень большим числом степеней свободы и практически непрерывным энергетическим спектром, состояние которого запутано с неконтролируемыми состояниями существующего макроскопического окружения, то в результате декогерентизации он будет очень быстро необратимым образом терять свои квантовые свойства и поведет себя как классический (на этом выводе основано решение парадокса «шредингеровского кота»).

При квантовых измерениях квантовый объект приводится в контакт с макроскопическим измерительным прибором. Запутывание состояний квантовой системы с состояниями измерительного прибора, рассматриваемого как квантовая система, и состояний измерительного прибора с многочисленными неконтролируемыми состояниями окружения, сопровождается быстрой декогерентизацией состояний квантовой системы, что приводит к образованию смешанного состояния (*необратимому коллапсу* ее волновых функций), которое и фиксируется измерительным прибором.

Другая сторона явления декогерентизации квантовых состояний проявляется, когда ее вызывают помехи в виде *дискретных* случайных внешних воздействий на отдельные кубиты квантового регистра, приводящие как к амплитудным, так и фазовым ошибкам в квантовых вычислительных процессах. В этом случае матрица плотности квантового состояния в координатном представлении может иметь недиагональные когерентные элементы $\rho(x, x', t)$. Наличие случайных статических помех в системе квантовых элементов приводит в отличие от рассмотренной выше *временной* декогерентизации к их *пространственной* декогерентизации, которую можно характеризовать *длиной декогерентизации* $l_D = v_S/\gamma_D$, где v_S — скорость распространения сигнала вдоль цепочки кубитов, которая в случае, если она определяется взаимодействием между соседними кубитами-спинами характеризующегося обменным интегралом I , равна $v_S \sim Ia/\hbar$, где a — расстояние между бли-

жайшими элементами. Подобно средней длине пробега электронов при рассеянии на дефектах и тепловых колебаниях решетки в проводнике, длина декогерентизации определяет «среднюю длину пробега» квантового состояния между нарушающими когерентность событиями, происходящих благодаря случайным воздействиям на квантовые элементы со стороны окружения.

Среди работ, посвященных общей теории эффектов декогерентизации и связанным с ними проблемам, появившимся в последнее время, отметим обзор М. Менского [1.49], а также работы [1.50–1.52].

1.5.2. Точно решаемая квантовая модель декогерентизации

Рассмотрим здесь более подробно процесс декогерентизации отдельного кубита, взаимодействующего с окружением, используя модельный гамильтониан типа гамильтониана Кальдейры–Леггетта [1.53], который представим в виде матрицы 4×4 (жирные символы), а именно:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} &= \hat{H}_S \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_S \otimes \hat{H}_B + \hat{\mathbf{H}}_{SB} = \\ &= (\hbar\omega_0/2)\hat{\sigma}_z \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_S \otimes \sum_k \hbar\omega_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k + \sum_k \hbar\hat{\sigma}_z \otimes (g_k \hat{b}_k^+ + g_k^* \hat{b}_k), \end{aligned} \quad (1.80)$$

где гамильтонианы \hat{H}_S и \hat{H}_B описывают свободную эволюцию кубита и окружения в матричном представлении, $\hat{1}_S$ и $\hat{1}_B$ — единичные 2×2 матрицы-операторы, действующие, соответственно, на кубит и бозонное возбуждение, а третий член — билинейное взаимодействие между ними. Напомним, что $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ — диагональная матрица Паули,

$\hat{b}_k^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_k$ и $\hat{b}_k = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_k$ — бозонные матрицы k -й гармонической полевой моды квантованного окружения, $\hat{b}_k^+ \hat{b}_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_k$, $g_k \hat{b}_k^+ + g_k^* \hat{b}_k = \begin{pmatrix} 0 & g_k^* \\ g_k & 0 \end{pmatrix}$.

Гамильтониан (1.80) имеет характерное свойство:

$$\left(\hat{H}_S \otimes \hat{1}_B, \hat{\mathbf{H}} \right) = \left(\hat{1}_S \otimes \hat{H}_B, \hat{\mathbf{H}}_{SB} \right) = 0, \quad (1.81)$$

означающее, что никакой диссипации энергии квантовой системы не происходит. Процесс декогерентизации в этом случае называется *adia-*

батическим. Реально он соответствует случаю, когда диссипация энергии происходит значительно медленнее, чем декогерентизация. Более сложная модель с произвольной операторной функцией $S(\hat{\sigma}_z)$ вместо $\hat{\sigma}_z$ была рассмотрена в [1.52, 1.54].

Состояние системы кубит + окружение описывается оператором плотности $\hat{\rho}(t)$, а динамика отдельного кубита — приведенным оператором плотности $\hat{\rho}_S(t)$, определяемым как след от оператора $\hat{\rho}(t)$ по степеням свободы окружения:

$$\hat{\rho}_S(t) = \text{Sp}_B \hat{\rho}(t) = \sum_{i,j=0,1} \rho_{ij}(t) |i\rangle\langle j|, \quad (1.82)$$

где $|i\rangle$, $i = 0, 1$ — базисные состояния кубита, которые являются собственными состояниями гамильтониана \hat{H}_S с собственными значениями $E_0 = -\hbar\omega_0/2$, $E_1 = \hbar\omega_0/2$. Поэтому взаимодействие с окружением не влияет на населенности спиновых состояний, диагональные элементы матрицы плотности остаются постоянными: $\rho_{ii}(t) = \rho_{ii}(0)$, а энтропия запутанности стремится к постоянному значению, соответствующему энтропии Шеннона. Эти состояния в рассматриваемом случае являются хорошими состояниями-указателями. Однако взаимодействие с окружением определяет в рассматриваемом случае динамику фазы и динамику когерентности состояния кубита, описываемой недиагональными элементами $\rho_{01}(t) = \rho_{10}^*(t)$.

Будем предполагать, что в начальный $t = 0$ состояния кубита и окружения некоррелированы, то есть оператор плотности представим в виде:

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_B, \quad (1.83)$$

где начальное значение приведенного оператора плотности кубита имеет отличные от нуля недиагональные элементы и когерентность $\rho_{01}(0) = \text{Sp}_S \left(\frac{1}{2} (\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y) \cdot \hat{\rho}_S(0) \right)$, а в качестве оператора плотности окружения, рассматриваемого как система бозонных возбуждений, воспользуемся его равновесным значением при температуре T :

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_B &= \exp(-\hat{H}_B/kT) / \text{Sp} \exp(-\hat{H}_B/kT) = \\ &= \prod_k \hat{\rho}_{Bk} = \prod_k \frac{\exp(-(\hbar\omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k / kT))}{(1 - \exp(-\hbar\omega_k / kT))}. \end{aligned} \quad (1.84)$$

Зависимость от времени недиагональных элементов матрицы плотности определяется выражением:

$$\rho_{01}(t) = \text{Sp}_S \left(\frac{1}{2} (\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y) \cdot \text{Sp}_B \hat{\rho}(t) \right), \quad (1.85)$$

где оператор плотности $\hat{\rho}(t)$ удовлетворяет операторному уравнению

$$i\hbar \partial \hat{\rho}(t) / \partial t = [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\rho}(t)]. \quad (1.86)$$

Далее перейдем, как обычно, к *представлению взаимодействия*:

$$\hat{\rho}(t) \rightarrow \hat{\rho}_{int}(t) = \hat{U}^{-1}(t) \hat{\rho}(t) \hat{U}(t),$$

где

$$\hat{U}(t) = \exp \left(-i (\hat{H}_S \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_S \otimes \hat{H}_B) t / \hbar \right). \quad (1.87)$$

Уравнение для оператора плотности в этом представлении принимает следующий вид:

$$i\hbar \partial \hat{\rho}_{int}(t) / \partial t = [\hat{\mathbf{H}}_{SB}(t), \hat{\rho}_{int}(t)], \quad (1.88)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_{SB}(t) &= \hat{U}^{-1}(t) \hat{H}_{SB} \hat{U}(t) = \exp(i\hat{H}_B t) \hat{\mathbf{H}}_{SB} \exp(-i\hat{H}_B t) = \\ &= \hbar \hat{\sigma}_z \otimes \sum_k \left(g_k \hat{b}_k^+ \exp(i\omega_k t) + g_k^* \hat{b}_k \exp(-i\omega_k t) \right). \end{aligned} \quad (1.89)$$

Решение уравнения (1.88) можно записать, в чем легко убедиться путем непосредственной подстановки, в виде

$$\hat{\rho}_{int}(t) = \hat{U}_{int}^{-1}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}_{int}(t), \quad (1.90)$$

где

$$\hat{U}_{int}(t) = \exp \left((\hbar \hat{\sigma}_z / 2) \otimes \sum_k \left(\hat{b}_k^+ \xi_k(t) - \hat{b}_k \xi_k^*(t) \right) \right), \quad (1.91)$$

$$\xi_k(t) = \frac{2g_k}{\omega_k} (1 - \exp(i\omega_k t)). \quad (1.92)$$

Оператор $\hat{U}_{int}(t)$ индуцирует запутывание состояний кубита и окружения, возникающее при $t > 0$. Именно образование запутанного состояния с окружением ответственно за процесс декогерентизации квантового состояния кубита, описываемого элементом матрицы плотности $\rho_{01}(t)$.

Так, если начальное состояние кубита $c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, а состояние окружения $|0_k\rangle$, то оператор $\widehat{U}_{int}(t)$ генерирует запутанное состояние вида:

$$\widehat{U}_{int}(t) \left(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \right) \otimes |0_k\rangle = c_0|0\rangle \otimes \left| -\frac{\xi_k(t)}{2} \right\rangle + c_1|1\rangle \otimes \left| \frac{\xi_k(t)}{2} \right\rangle. \quad (1.93)$$

Перейдем к вычислению $\rho_{01}(t)$. Подставляя в (1.85) найденное значение $\widehat{\rho}_{int}(t)$ (1.90)–(1.92), получим

$$\begin{aligned} \rho_{01}(t) &= \text{Sp}_{SB} \left(\frac{1}{2} (\widehat{\sigma}_x + i\widehat{\sigma}_y) \cdot \widehat{U}(t) \widehat{U}_{int}^{-1}(t) \widehat{\rho}(0) \widehat{U}_{int}(t) \widehat{U}^{-1}(t) \right) = \\ &= \exp(i\omega_0 t) \text{Sp}_{SB} \left(\frac{1}{2} (\widehat{\sigma}_x + i\widehat{\sigma}_y) \cdot \widehat{U}_{int}^{-1}(t) \cdot \widehat{\rho}_S(0) \otimes \widehat{\rho}_B \cdot \widehat{U}_{int}(t) \right), \end{aligned} \quad (1.94)$$

где использовано свойство инвариантности следа относительно циклической перестановки операторов и соотношение

$$\widehat{U}^{-1}(t) \frac{1}{2} (\widehat{\sigma}_x + i\widehat{\sigma}_y) \cdot \widehat{U}(t) = \frac{1}{2} (\widehat{\sigma}_x + i\widehat{\sigma}_y) \exp(i\omega_0 t). \quad (1.95)$$

Далее учтем, что

$$\begin{aligned} &\widehat{U}_{int}^{-1}(t) \cdot \widehat{\rho}_S(0) \otimes \widehat{\rho}_B \cdot \widehat{U}_{int}(t) = \\ &= \prod_k \exp \left(\hbar \widehat{b}_k^+ \xi_k(t) - \hbar \widehat{b}_k \xi_k^*(t) \right) \cdot \widehat{\rho}_S(0) \otimes \widehat{U}_{int}^{-1}(t) \cdot \widehat{\rho}_B \widehat{U}_{int}(t) \end{aligned} \quad (1.96)$$

и произведем снова циклическую перестановку операторов под знаком следа. В результате получим

$$\rho_{01}(t) = \exp(i\omega_0 t) \prod_k \text{Sp}_B \widehat{\rho}_{Bk} \exp \left(\hbar \widehat{b}_k^+ \xi_k(t) - \hbar \widehat{b}_k \xi_k^*(t) \right) \cdot \rho_{01}(0). \quad (1.97)$$

При вычислении оставшегося следа воспользуемся формулой Ф.Блоха [1.1], согласно которой имеем *точное* выражение:

$$\prod_k \text{Sp}_B \frac{\exp(-\hbar \omega_k \widehat{b}_k^+ \widehat{b}_k / kT)}{1 - \exp(-\hbar \omega_k / kT)} \exp \left(\hbar \widehat{b}_k^+ \xi_k(t) - \hbar \widehat{b}_k \xi_k^*(t) \right) = \exp(-\Gamma(t)), \quad (1.98)$$

где

$$\Gamma(t) = \sum_k \frac{|\xi_k(t)|^2}{2} \operatorname{cth}(\hbar\omega_k/2kT) = \sum_k 4|g_k|^2 \operatorname{cth}(\hbar\omega_k/2kT) \frac{1 - \cos(\omega_k t)}{\omega_k^2}. \quad (1.99)$$

Введя в рассмотрение спектральную плотность окружения $I(\omega) = \sum_k \delta(\omega - \omega_k) |g_k|^2$, последнее выражение перепишем в виде

$$\Gamma(t) = \int_0^\infty 4I(\omega)(2\bar{n}(\omega, T) + 1) \frac{1 - \cos(\omega t)}{\omega^2} d\omega, \quad (1.100)$$

где $\bar{n}(\omega, T) = (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)^{-1}$ — среднее число бозевских возбуждений при температуре T . Из (1.98) следует, что вклад тепловых и вакуумных флуктуаций в $\Gamma(t)$ оказывается разделенным, а перемножение временных шкал, обусловленных этими двумя механизмами, приводит к достаточно сложному процессу декогерентизации:

$$\rho_{01}(t) = \exp(i\omega_0 t - \Gamma(t)) \rho_{01}(0). \quad (1.101)$$

Конкретный вид зависимости $\Gamma(t)$ определяется видом спектральной плотности. Если роль бозонов играют фононы кристаллической решетки, то их спектр ограничен сверху дебаевской частотой ω_D , а спектральную плотность можно представить в виде $I(\omega) = \alpha\omega^n \exp(-\omega/\omega_D)$. При $n = 1$ окружающая среда называется «омической». В этом случае явное аналитическое выражение для $\Gamma(t)$ может быть получено в низкотемпературном режиме, когда $\hbar\omega_D \gg kT$ [1.50]:

$$\Gamma(t) \sim \ln(1 + \omega_D^2 t^2) + 2 \ln \frac{\operatorname{sh}(\pi k T t / \hbar)}{\pi k T t / \hbar}. \quad (1.102)$$

Первое слагаемое здесь возникает за счет квантовых вакуумных флуктуаций, второе — за счет тепловых флуктуаций. С увеличением параметра $\hbar\omega_D/kT$ процесс декогерентизации затягивается.

Можно выделить три основных режима декогерентизации:

а) «Спокойный» режим: $t < \omega_D^{-1}$, где $\Gamma(t) \sim \omega_D^2 t^2 < 1$. Флуктуации мало влияют на декогерентизацию.

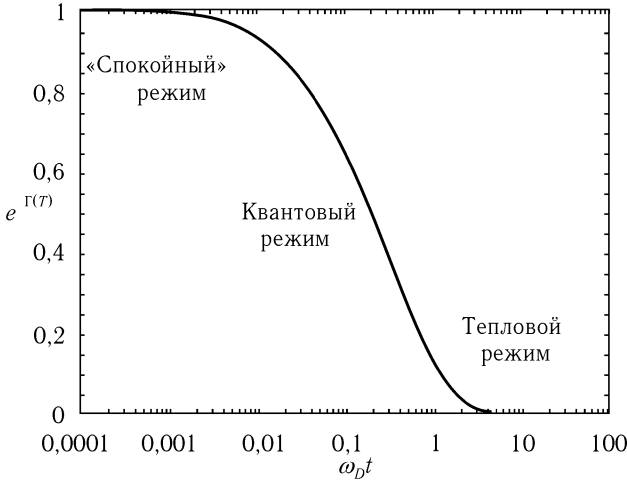


Рис. 1.3. Зависимость декогерентизации отдельного кубита при $\hbar\omega_D/kT = 100$. Хорошо видно три режима затухания.

б) Квантовый режим: $\omega_D^{-1} < t < \hbar/kT$, где $\Gamma(t) \sim 2 \ln \omega_D t$. Декогерентизация обусловлена квантовыми вакуумными флуктуациями.

в) Тепловой режим: $t > \hbar/kT$, где $\Gamma(t) \sim kTt/\hbar > 1$. Тепловые флуктуации играют основную роль.

На рис. 1.3 приведена зависимость $\exp(-\Gamma t)$ от t при $\hbar\omega_D/kT = 100$ [1.50, 1.55].

В работе [1.50] отмечается также, что в отличие от рассмотренного случая для спектральной плотности вида $I(\omega) = \alpha\omega^3 \exp(-\omega/\omega_D)$, декогерентизация не затухает до нуля, а выходит на насыщение, величина которого определяется значением параметра $\hbar\omega_D/kT$.

Здесь мы рассмотрели процесс декогерентизации состояния отдельного кубита. Декогерентизация состояния кубитов в квантовом регистре была рассмотрена в [1.50, 1.52]. Основные результаты состоят в следующем.

Состояние регистра из L кубитов описывается оператором плотности вида

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{i,j=0}^{2^L-1} \rho_{ij} |i\rangle\langle j|, \quad (1.103)$$

где базисные состояния регистра $|i\rangle$ определяются как прямое произведение базисных состояний кубитов:

$$|i\rangle = |i_{L-1}\rangle \otimes |i_{L-2}\rangle \otimes \dots \otimes |i_0\rangle. \quad (1.104)$$

Степень когерентности и запутанности в L -кубитовом регистре определяется недиагональными элементами 2^L -мерной матрицы плотности ρ_{ij} .

В [1.50, 1.52] было показано, что если кубиты взаимодействуют с окружением независимо друг от друга, декогерентизация состояния регистра будет определяться недиагональными матричными элементами с наибольшим затуханием, то есть как $\exp(-L\Gamma(t))$. В другом случае, когда все кубиты регистра находятся в одинаковых состояниях, то есть длина когерентности велика, наиболее быстрое затухание матричных элементов определяется выражением $\exp(-L^2\Gamma(t))$.

Литература

- [1.1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. т. V. Статистическая физика. Часть 1. — М.: Наука, 1976, 584 с.
- [1.2] Шеннон К. Работы по теории информации и кибернетике. / Перевод с англ. под ред. Р. Л. Добрушина и О. Б. Лупанова. — М.: ИЛ, 1963.
- [1.3] Brillouin L. Science and Information Theory. — N.Y.: Acad. Press, 1956. / Бриллюэн Л. Наука и информация. / Перевод с англ. под ред. А. А. Харькевича. — М.: Физматгиз, 1960, 392 с.
- [1.4] Meindl J. D. Low Power Microelectronics: Retrospect and Prospect // Proc. IEEE, 1995, v. 83, № 4, pp. 619–635.
- [1.5] Поплавский Р. П. Термодинамика информационных процессов. — М.: Наука, 1981, 256 с.
- [1.6] Levitin L. B. Energy Cost of Information Transmission (along the path to understanding) // Physica, 1998, v. D120, № 1–2, pp. 162–167.
- [1.7] Landauer R. Irreversibility and Heat Generation in the Computing Process // IBM Journ. Res. Develop., 1961, v. 5, № 3, pp. 183–191. / Ландауер Р. Необратимость и выделение тепла в процессе вычислений. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II, — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 9–32.

-
- [1.8] *Dickinson A. G., Denker J. S.* Adiabatic Dynamic Logic // IEEE Jour. Solid-State Circuits, 1995, v. 30, № 3, pp. 311–315.
- [1.9] *Hall J. S.* Nanocomputers and Reversible Logic // Nanotechnol., 1994, v. 5, pp. 157–167.
- [1.10] *Merkle R. C.* Reversible Electronic Logic Using Switches // Nanotechnol., 1993, v. 4, № 1, pp. 21–40.
- [1.11] *Likharev K. K.* Classical and Quantum Limitations on Energy Consumption in Computation // Inter. Journ. of Theor. Phys., 1982, v. 21, № 12, pp. 311–326.
- [1.12] *Bennett C. H.* The Thermodynamics of Computation — A Review // Inter. Journ. of Theor. Phys., 1982, v. 21, № 12, pp. 905–940.
- [1.13] *Bennett C. H.* Notes on the History of Reversible Computation // IBM Journ. Res. Develop., 1988, v. 32, № 1, pp. 16–23.
- [1.14] *Bennett C. H.* Time/Space Trade-off for Reversible Computation // SIAM Journ. of Comput., 1989, v. 18, № 4, pp. 766–776.
- [1.15] *Landauer R.* Minimal Energy Requirements in Communication // Science, 1996, v. 272, № 6, pp. 1914–1918.
- [1.16] *Porod W., Grondin R. O., Ferry D. F., Porod G.* Dissipation in Computation // Phys. Rev. Lett., 1984, v. 52, № 3, pp. 232–235.
- [1.17] *Fredkin E., Toffoli T.* Conservative Logic // Inter. Journ. of Theor. Phys., 1982, v. 21, № 12, pp. 219–253.
- [1.18] *Von Neumann J.* Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik. — Berlin: Springer, 1932. / *Фон Нейман И.* Математические основы квантовой механики. / Перевод с немец. под ред. Н. Н. Боголюбова. — М.: Наука, 1964, 368 с.
- [1.19] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика, т. III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Наука, 1974, 752 с.
- [1.20] *Файн В. М.* Квантовая радиофизика. т. 1. Фотоны и нелинейные среды. — М.: Сов. Радио, 1972, 472 с.
- [1.21] *Митюгов В. В.* Физические основы теории информации. — М.: Сов. Радио, 1976, 216 с.
- [1.22] *Schumacher B.* Quantum coding // Phys. Rev., 1995, v. A51, № 4, pp. 2738–2747.

- [1.23] *Холево А. С.* О пропускной способности квантового канала связи // Проблемы передачи информации, 1979, т. 15, № 4, с. 3–11.
- [1.24] *Holevo A. S.* The Capacity of the Quantum Channel with General Signal States // IEEE Trans. Inform. Theor., 1998, v. 44, № 1, pp. 269–273.
- [1.25] *Левитин Л. Б.* О квантовой мере количества информации. В кн.: Доклады IV Всесоюзной конференции по теории передачи и кодирования информации. — М., Ташкент: ИППИ АН СССР, 1969, с. 111–115.
- [1.26] *Jozsa R., Robb D., Wootters W. K.* Lower Bond for Accessible Information in Quantum Mechanics // Phys. Rev., 1994, v. A49, № 2, pp. 668–677.
- [1.27] *Cerf N. J., Adami C.* Information Theory of Quantum Entanglement and Measurement // Physica 1998, v. D120, № 1–2, pp. 62–81.
- [1.28] *Кадомцев Б. Б.* Динамика и информация. — М.: Изд. ред. УФН, 2 изд, 1999, 400 с.
- [1.29] *Plenio M. B., Vedral V.* Teleportation, Entanglement and Thermodynamics in the Quantum World // Contemporary Phys., 1998, v. 39, № 6, p. 431–446.
- [1.30] *Schrödinger E.* Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik // Naturwissenschaften, 1935, Bd. 23, S. 807–812.
- [1.31] *Bennett C. H., Brassard G., Crépeau C., Jozsa R., Peres A., Wootters W. K.* Teleporting an Unknown Quantum State via Dual Classical and Einstein-Podolsky-Rosen Channel // Phys. Rev. Lett., 1993, v. 70, № 13, pp. 1895–1899.
- [1.32] *Bennett C. H., Bernstein H. J., Popescu S., Schumacher B.* Concentrating Partial Entanglement by Local Operations // Phys. Rev., 1996, v. A53, № 4, pp. 2046–2052.
- [1.33] *Bennett C. H., DiVincenzo D. P., Smolin J. A., Wootters W. K.* Mixed-State Entanglement and Quantum Error Correction // Phys. Rev., 1996, v. A54, № 5, pp. 3824–3850.
- [1.34] *Popescu S., Rohrlich D.* Thermodynamics and the measure of entanglement // Phys. Rev., 1997, v. A56, № 5, pp. R3319–R3321.
- [1.35] *Bennett C. H., Brassard H., Popescu S., Schumacher B., Smolin J. A., Wootters W.* Purification of Noisy Entanglement and Faithful Teleportation via Noisy Channel // Phys. Rev. Lett., 1996, v. 76, № 5, pp. 722–725.

- [1.36] *Ishizaka S., Hiroshima T.* Maximally Entangled Mixed States in Two Qubits // 2000, LANL E-print arXiv: quant-ph/0003023, 4 p.
- [1.37] *Wootters W.K.* Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits // Phys. Rev. Lett., 1998, v. 80, № 10, pp. 2245–2248.
- [1.38] *Wootters W.K.* Entangled Chains // 2000, LANL E-print arXiv: quant-ph/0001114, 16 p.
- [1.39] *Vedral V., Plenio M.B.* Entanglement Measures and Purification Procedures // Phys. Rev., 1998, v. A57, № 3, pp. 1619–1633.
- [1.40] *Vedral V., Plenio M.B., Rippin M.A., Knight P.L.* Quantifying Entanglement // Phys. Rev. Lett., 1997, v. 78, № 12, pp. 2275–2279.
- [1.41] *DiVincenzo D.P., Fuchs C.A., Mabuchi H., Smolin J.A., Thapliyal A., Uhlman A.* Entanglement of Assistance // 1998, LANL, E-print quant-ph/9803033, 11 p.
- [1.42] *Lloyd S.* Quantum-Mechanical Maxwell's Demon // Phys. Rev. 1997, v. A56, № 5, pp. 3374–3382.
- [1.43] *Landau L.D.* Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik // Zeitsch. Phys. 1927, Bd. 45, S. 430–441. / Перевод с немец.: *Л. Д. Ландау.* Собрание трудов. т. I. — М.: Наука, 1969, 512 с.
- [1.44] *Paz P.P., Zurek W.H.* Quantum Limit of Decoherence: Environment Induced Superselection of Energy Eigenstates // Phys. Rev. Lett. 1999, v. 82, pp. 5181–5185.
- [1.45] *Abragam A.* The Principles of Nuclear Magnetism. — Oxford: Clarendon Press, 1961. / *А. Абрагам.* Ядерный магнетизм. / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скроцкого. — М.: ИИЛ, 1963, 552 с.
- [1.46] *Slichter C.P.* Principles of Magnetic Resonance. Third Ed. — Berlin, Heidelberg, N.Y., Berlin: Springer-Verlag, 1990, 656 p. / *Сликтер Ч.* Основы теории магнитного резонанса. / Перевод с англ. 2-го издания 1980 г. под ред. Г. В. Скроцкого. — М.: Мир, 1981, 445 с.
- [1.47] *Haebleren U.* High Resolution NMR in Solids. Selective Averaging. — Acad. Press: N.Y., 1976. / *Хеберлен У., Меринг М.* ЯМР высокого разрешения в твердых телах. / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скроцкого и Э. Т. Липпмаа. — М.: Мир, 1980, 504 с.
- [1.48] *Ernst R.R., Bodenhausen G., Wokaum A.* Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions. — Oxford: Univ. Press, 1994,

650 p. / Эрст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. / Перевод с англ. 1-го издания 1987 г. под ред. К. М. Салихова. — М.: Мир, 1990, 710 с.

- [1.49] Менский М. Б. Явление декогеренции и теория непрерывных квантовых измерений // УФН, 1998, т. 168, № 9, с. 1017–1035.
- [1.50] Palma G. M., Suominen K.-A., Ekert A. K. Quantum Computers and Dissipation // Proc. Roy. Soc. Lond., 1996, v. A452, pp. 567.
- [1.51] Omne's R. General Theory of the Decoherence Effect in Quantum Mechanics // Phys. Rev., 1997, v. A56, № 5, pp. 3383–3394.
- [1.52] Sun C. P., Zhan H., Liu X. F. Decoherence and Relevant Universality in Quantum Algorithms via a Dynamic Theory for Quantum Measurement // Phys.Rev, 1998, v. A58, № 3, pp. 1810–1821.
- [1.53] Caldeira A. O., Leggett A. J. // Phys. Rev. Lett. 1981, v. 46, pp. 211.
- [1.54] Mozyrsky D., Privman V. Adiabatic Decoherence // Jour. Stat. Phys., 1998, v. 91, № 3/4, pp. 787–799.
- [1.55] Viola L., Lloyd S. Dynamical Suppression of Decoherence in Two-State Quantum Systems // 1998, LANL E-print quant-ph/9803057, 18 p.

ГЛАВА 2

КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

«But to me, quantum computing is not an impossible dream; it is a possible dream.... It is a dream that could change the world. So let us dream.»

John Preskill

2.1. Основные квантовые логические операции

В квантовом компьютере, как уже отмечалось, логические операции производятся в системе кубитов. Они разбиваются на дискретную совокупность последовательных во времени базисных квантовых логических операций — квантовых вентилях (quantum gates). Каждый квантовый вентиль за фиксированный промежуток времени выполняет унитарное преобразование с выделенными кубитами. Квантовый вентиль осуществляет обратимые операции и с этой точки зрения классический обратимый компьютер является аналогом квантового компьютера. Одним из основных условий для построения квантового компьютера является наличие *универсального* набора квантовых вентилях, с помощью которого может быть выполнено любое унитарное преобразование в 2^L -мерном гильбертовом пространстве.

К однокубитовым квантовым операторам, действующим только на один кубит, относятся различные операторы поворота вектора состояния кубита в двухмерном гильбертовом пространстве. Это, в частности, такие вентили, как NOT, описываемый матрицей 2×2 или оператором Паули $\hat{\sigma}_x$:

$$\text{NOT} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \widehat{\sigma}_x, \quad (2.1)$$

оператор Адамара (М. Hadamard), осуществляющий самообратимую (self inverse)¹ операцию формирования суперпозиции состояний

$$\begin{aligned}\widehat{H}|0\rangle &= \widehat{H} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{1/2}(|0\rangle + |1\rangle), \\ \widehat{H}|1\rangle &= \widehat{H} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \sqrt{1/2}(|0\rangle - |1\rangle),\end{aligned}\quad (2.2)$$

которую можно записать также в виде

$$\widehat{H}|x\rangle = \sqrt{1/2} \sum_{y=0,1} (-1)^{x \cdot y} |y\rangle. \quad (2.3)$$

Оператор Адамара \widehat{H} описывается матрицей

$$\widehat{H} = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \sqrt{1/2}(\widehat{\sigma}_z + \widehat{\sigma}_x). \quad (2.4)$$

Аналогичное преобразование в системе L кубитов осуществляется с помощью $N = 2^L$ -мерного оператора Уолша – Адамара (Walsh – Hadamard), представляющего собой прямое произведение однокубитовых операторов Адамара:

$$\widehat{W} = \widehat{H}_1 \otimes \widehat{H}_2 \otimes \dots \widehat{H}_n \otimes \dots \widehat{H}_L, \quad (2.5)$$

Используя выражение (2.3), для него получим

$$\widehat{W}|x\rangle = \sqrt{1/N} \sum_{y=0}^{N-1} (-1)^{x \cdot y} |y\rangle, \quad (2.6)$$

где x, y представляют собой цепочки из $N = 2^L$ состояний L кубитов, а $x \cdot y$ обозначает их побитовое скалярное произведение по модулю 2, определяемое как $x \cdot y \equiv \sum_{n=0}^{N-1} (x_n \cap y_n)$. Существуют и другие представления оператора \widehat{W} .

¹То есть операция, совпадающая с обратной $A = A^{-1}$. Операции CNOT и NOT также обладают этим свойством.

Двухкубитовые вентили соответствуют операциям поворота в гильбертовом пространстве двух взаимодействующих кубитов, которые не могут быть представлены в виде прямого произведения независимых однокубитовых операций. Основным двухкубитовым вентиляем является обратимый контролируемый инвертор или оператор *контролируемое НЕ* (CNOT), который в совокупности с относительно простыми однокубитовыми операциями может быть базовым для формирования *любой унитарной* операции в системе из более двух кубитов [2.1].

Этот вентиль описывается квантовой схемой и матрицей 4×4 следующего вида (см. также раздел 1.1):

$$\text{CNOT} = \begin{array}{c} A: |a\rangle \\ B: |b\rangle \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \boxed{\text{NOT}} \end{array} \begin{array}{c} |a\rangle \\ |b'\rangle = |a \oplus b\rangle \end{array} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Последовательность операций в квантовых схемах принято рассматривать слева направо в соответствии с направлением времени по горизонтальным линиям на схеме. Вентиль с симметричной относительно входа и выхода схемой описывается симметричной матрицей. Первый кубит A в операции CNOT является *контролирующим*, а второй B *контролируемым*, над ним и осуществляется операция NOT, при условии, если первый кубит находится в состоянии $|1\rangle$.

Заметим, что с помощью CNOT можно осуществлять операцию *копирования* или *неразрушающее измерение* состояния контролирующего кубита, полагая $|b\rangle = 0$, получим $|b'\rangle = |a\rangle$.

В свою очередь оператор CNOT формально может быть построен из трех более простых вентилях [2.1–2.3]:

$$\text{CNOT} = \begin{array}{c} A: |a\rangle \\ B: |b\rangle \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \boxed{\text{NOT}} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \boxed{H} \text{---} \boxed{\Pi} \text{---} \boxed{H} \end{array}, \quad (2.8)$$

где (см. ниже (2.43))

$$\hat{B}_{j,j} = \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \boxed{\Pi} \end{array} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

— двухкубитовый оператор контролируемого изменения фазы, который производит в рассматриваемом случае сдвиг фазы только состояния $|1, 1\rangle$ на π : ($|1, 1\rangle \Rightarrow -|1, 1\rangle$), оставляя остальные состояния без

изменений. Для его выполнения существенно наличие физического взаимодействия между кубитами.

Двухкубитовый оператор обмена состояниями кубитов SWAP можно сопоставить квантовой схеме, в которой последовательно выполняются три операции CNOT:

$$\text{SWAP} = \begin{array}{c} A: |a\rangle \\ B: |b\rangle \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \boxed{\text{NOT}} \text{---} \bullet \text{---} \\ \boxed{\text{NOT}} \text{---} \bullet \text{---} \boxed{\text{NOT}} \text{---} \end{array} \begin{array}{c} |2a \oplus b\rangle = |b\rangle \\ |3a \oplus 2b\rangle = |a\rangle \end{array} \quad (2.10)$$

описываемые матрицей

$$\text{SWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Заметим, что случае когда состояние $|a\rangle = |0\rangle$, третий оператор CNOT оказывается лишним.

Операцию CNOT можно осуществить также с помощью последовательности операций следующего вида [2.4]:

$$\text{CNOT} = \left(\hat{Z}_A(\pi/2) \otimes \hat{Z}_B(-\pi/2) \right) \cdot \sqrt{\text{SWAP}} \cdot \left(\hat{Z}_A(\pi/2) \otimes \hat{1}_B \right) \cdot \sqrt{\text{SWAP}}, \quad (2.12)$$

где

$$\hat{Z}(\pm\pi/2) = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 \pm i & 0 \\ 0 & 1 \mp i \end{pmatrix} = \sqrt{1/2} (\hat{1} \pm i\hat{\sigma}_z) \quad (2.13)$$

— однокубитовые операции поворота оператора спина $\hat{\sigma}$, представляющего состояние кубита, на угол $\pm\pi/2$ вокруг оси z в спиновом пространстве, а двухкубитовые операции $\sqrt{\text{SWAP}}$ описываются матрицами

$$\sqrt{\text{SWAP}} = (2i)^{-1/2} \begin{pmatrix} (2i)^{1/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 1 & 0 \\ 0 & 1 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (2i)^{1/2} \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Ниже в главе 4 будут рассмотрены способы осуществления однокубитовых операций поворота и двухкубитовых операций SWAP и $\sqrt{\text{SWAP}}$ на примере ядерных спинов-кубитов.

Используя систему из трех связанных спинов-кубитов, можно сформировать и такой универсальный элемент, как вентиль Тоффли или CCNOT [2.3]:

$$\text{CCNOT} = \begin{array}{c} A: |a\rangle \text{---} \bullet \text{---} |a\rangle \\ | \\ B: |b\rangle \text{---} \bullet \text{---} |b\rangle \\ | \\ C: |c\rangle \text{---} \boxed{\text{NOT}} \text{---} |c'\rangle = |a \cap b \oplus c\rangle \end{array} \quad (2.15)$$

В этом операторе управляющими являются два кубита A и B и один управляемый C . Он описывается следующей матрицей 8×8 в базисных состояниях $|0, 0, 0\rangle, |0, 0, 1\rangle, |0, 1, 0\rangle, |1, 0, 0\rangle, |0, 1, 1\rangle, |1, 0, 1\rangle, |1, 1, 0\rangle$ и $|1, 1, 1\rangle$:

$$\text{CCNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Такая операция может быть выполнена с помощью пяти двухкубитовых операций [2.1].

2.2. Некоторые квантовые алгоритмы

Остановимся теперь на некоторых типичных квантовых алгоритмах, играющих принципиальную роль в квантовых вычислительных процессах, рассмотрим их свойства и возможности, а также произведем сравнение квантовых операций, использующих эти алгоритмы, с классическими операциями независимо от конкретного вида кубитов.

2.2.1. Формирование запутанного состояния

В качестве простейшего примера рассмотрим формирование EPR-пары из незапутанного состояния пары кубитов-спинов $|01\rangle$:

$$|\psi_{EPR}\rangle = \sqrt{1/2}(|01\rangle + |10\rangle) \equiv \sqrt{1/2} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}. \quad (2.17)$$

Для этого оказывается достаточно подействовать сначала преобразованием Адамара \hat{H} (2.2) на состояние первого кубита $|0\rangle$, а затем на полученное состояние операцией CNOT, при которой контролируемым является второй кубит $|1\rangle$:

$$\begin{aligned} \text{CNOT} \cdot (\hat{H} \otimes \hat{1})|01\rangle &\Rightarrow \text{CNOT} \cdot \sqrt{1/2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sqrt{1/2}(|01\rangle + |10\rangle) = |\psi_{EPR}\rangle. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Квантовую схему этого преобразования можно представить следующим образом (нормировочные множители $\sqrt{1/2}$ опущены):

$$\begin{array}{c} |0\rangle \text{ --- } \boxed{H} \text{ --- } \bullet \text{ --- } |0\rangle + |1\rangle \\ |1\rangle \text{ --- } \text{--- } \boxed{\text{NOT}} \text{ --- } |1\rangle + |0\rangle \end{array} = |01\rangle + |10\rangle. \quad (2.19)$$

Заметим здесь, что одно преобразование Адамара, действующее локально только на один кубит, не приводит еще к образованию запутанного состояния. Ниже будет рассмотрен конкретный механизм действия всей этой операции с использованием методов ЯМР.

2.2.2. Задача Дойча

В простейшем варианте задача состоит в следующем [2.5] (см. также обзор [2.6]). Предположим, что имеется совокупность четырех бинарных функций $f_i(x) = \pm 1$ двоичной переменной $x = 0, 1$, из которых две постоянны ($f_1(x) = 0$ и $f_2(x) = 1$ для всех возможных значений x) и две «сбалансированы» (balanced) (имеют различные значения для $x = 0$ и для $x = 1$: $f_3(x) = x$ и $f_4(x) = \text{NOT } x$). Задача Дойча (D.Deutsch) состоит в том, чтобы определить, к какой группе относится функция f_i .

При классическом решении такой задачи необходимо выполнить минимум две операции, то есть определить отдельно $f(0)$ и $f(1)$. В квантовом случае благодаря возможности использовать свойство суперпозиции квантовых состояний достаточно *только одной* операции (один бит информации). Алгоритм Дойча–Джозса (D.Deutsch, R.Jozsa) [2.7] решения этой задачи в рассматриваемом простейшем варианте выполняется на компьютере, состоящем из двух кубитов. Первый основной кубит, состояние которого $|x\rangle$ — это вход квантового компьютера, а второй в состоянии $|y\rangle$ является вспомогательным «рабочим»

кубитом, то есть принадлежит как бы к аппаратным средствам. Пусть квантовый компьютер работает как квантовый черный ящик (специалисты по компьютерам называют его или соответствующую операцию *квантовым оракулом* (oracle)), выполняя над состояниями двухкубитовой системы унитарную операцию $\hat{U}_f : |x\rangle \otimes |y\rangle \Rightarrow |x\rangle \otimes |y \oplus f(x)\rangle$, описываемую оператором \hat{U}_f . Этот оператор представляется четырьмя матрицами 4×4 , соответствующими четырем возможным функциям $f(x)$:

$$\hat{U}_{f_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \hat{I}, \quad \hat{U}_{f_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \hat{I} \otimes \text{NOT}, \quad (2.20)$$

$$\hat{U}_{f_3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \text{CNOT}, \quad \hat{U}_{f_4} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \text{CNOT} \cdot (\hat{I} \otimes \text{NOT}). \quad (2.21)$$

Квантовая схема, соответствующая оператору \hat{U}_f , имеет вид:

$$\begin{array}{ccc} |x\rangle & \text{---} & \boxed{\hat{U}_f} & \text{---} & |x\rangle \\ & & & & \\ |y\rangle & \text{---} & & & |y \oplus f(x)\rangle \end{array} . \quad (2.22)$$

Суть алгоритма Дойча–Джозса состоит в следующем: сначала на входе квантовой схемы с помощью операций Адамара (2.2) готовится начальная суперпозиция состояний основного и вспомогательного кубитов, которая, в частности, при $|x\rangle \otimes |y\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$ принимает вид:

$$\begin{aligned} |0\rangle \otimes |1\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow |\psi_{in}\rangle = (1/2)(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) = \\ &= (1/2)(|00\rangle + |10\rangle - |01\rangle - |11\rangle). \end{aligned} \quad (2.23)$$

В результате действия операторов Адамара возникает незапутанная суперпозиция двухкубитовых состояний, отдельные составляющие в которой имеют *одинаковые амплитуды*, но их фазы могут отличаться на π .

Затем производится преобразование \hat{U}_f . Учитывая, что

$$\begin{aligned} (|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle) &= (-1)^{f(x)}(|0\rangle - |1\rangle) \\ (-1)^{f(1)} &= (-1)^{2f(0) \oplus f(1)}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

после действия операции \widehat{U}_f получим состояние

$$\begin{aligned} \widehat{U}_f : |\psi_{in}\rangle &\Rightarrow |\psi_{out}\rangle = \\ &= (1/2)(-1)^{f(0)}(|0\rangle + (-1)^{f(0)\oplus f(1)}|1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle), \end{aligned} \quad (2.25)$$

которое зависит от значения относительной фазы $f(0) \oplus f(1)$ двух участвующих в суперпозиции состояний. Действуя затем снова операциями Адамара, получим *обращение* суперпозиций на выходе и переход первого кубита в состояние $(-1)^{f(0)}|f(0) \oplus f(1)\rangle$. При этом второй кубит возвращается в состояние $|1\rangle$. Если относительная фаза имеет значение $f(0) \oplus f(1) = 0$, то конечное состояние первого кубита $|0\rangle$, а если $f(0) \oplus f(1) = 1$, то конечное состояние первого кубита $|1\rangle$. В результате полная схема действия алгоритма Дойча–Джозса принимает следующий вид (рис. 2.1) (нормировочные множители $\sqrt{1/2}$ также опущены):

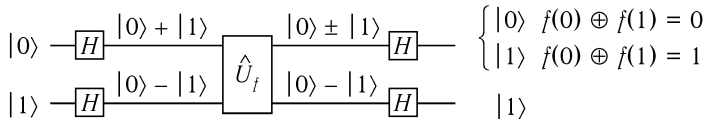


Рис. 2.1. Квантовая схема алгоритма Дойча–Джозса. Последовательность операций слева направо.

Для решения задачи Дойча достаточно *только одной* вычислительной операции по определению относительной фазы $f(0) \oplus f(1)$, то есть определения результирующего состояния первого кубита. (Если $|0\rangle$, то $f_{1,2}(x)$ — постоянные функции, если $|1\rangle$, то $f_{3,4}(x)$ — балансированные функции.) Существенно, что при этом не вычисляются значения самих функций $f(x)$. Квантовый компьютер действует на суперпозицию состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ и тем самым выделяет «глобальную» информацию о функции, которая зависит как от $f(0)$, так и от $f(1)$. В этом проявляется здесь квантовый параллелизм. На примере задачи Дойча было впервые продемонстрировано квантовое ускорение ее решения.

Алгоритм Дойча–Джозса был сформулирован и для общего случая $L > 1$, когда $|x\rangle$ и $|y\rangle$ являются векторами в 2^L -мерном гильбертовом пространстве $|x\rangle \equiv |x_0, x_1, \dots, x_{L-1}\rangle$, $|y\rangle \equiv |y_0, y_1, \dots, y_{L-1}\rangle$, соответственно, квантовый оракул действует на многомерный вектор состояния $\widehat{U}_f : |x_0, x_1, \dots, x_{L-1}\rangle \otimes |y\rangle = |x_0, x_1, \dots, x_{L-1}\rangle \otimes |y \oplus f(x_0, x_1, \dots, x_{L-1})\rangle$ [2.7, 2.8].

Задача снова состоит в определении, является ли двузначная функция постоянной или сбалансированной, имеющей одно значение для одной половины, и другое для второй половины всех x . Квантовый алгоритм позволяет решить эту задачу за L операций, тогда как классический за 2^L .

Экспериментально этот алгоритм был реализован на простейших ЯМР квантовых компьютерах (см. гл. 4).

2.2.3. Квантовая телепортация

Эта операция состоит в использовании *запутанного* состояния двух кубитов для передачи *неизвестного* для отправителя A состояния кубита C другому кубиту получателя B (передается только состояние, а не сам квантовый объект!). Возможность такой операции впервые была подтверждена и экспериментально сначала с помощью использования оптических систем в работе [2.9], а затем и методом ЯМР (см. ниже).

Предположим [2.10], что отправитель A желает передать получателю B информацию о состоянии кубита C вида $|\Phi_C\rangle = a|0_C\rangle + b|1_C\rangle$, не зная значений параметров a и b , и поэтому не может ее передать по классическому каналу. Для этого сначала из состояний кубитов A и B , принадлежащих отправителю A и получателю B с помощью операций Адамара и CNOT (2.2) образуется запутанное вспомогательное (ancilla) состояние, например, вида $|\Psi_{AB}\rangle = \sqrt{1/2}(|0_A0_B\rangle + |1_A1_B\rangle)$. Это состояние кубитов A и B известно как отправителю, так и получателю и играет роль *квантового канала* передачи информации.

Общее начальное состояние передаваемого C и двух запутанных кубитов A и B квантового канала далее представим в виде

$$\begin{aligned} |\Phi_{ABC}\rangle &= |\Phi_C\rangle \otimes |\Psi_{AB}\rangle = (a|0_C\rangle + b|1_C\rangle) \otimes \sqrt{1/2}(|0_A0_B\rangle + |1_A1_B\rangle) = \\ &= \frac{1}{2} \left(|\Phi_{AC}^+\rangle \otimes (a|0_B\rangle + b|1_B\rangle) + |\Phi_{AC}^-\rangle \otimes (a|0_B\rangle - b|1_B\rangle) + \right. \\ &\quad \left. + |\Psi_{AC}^+\rangle \otimes (a|1_B\rangle + b|0_B\rangle) + |\Psi_{AC}^-\rangle \otimes (a|1_B\rangle - b|0_B\rangle) \right), \quad (2.26) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} |\Phi_{AC}^\pm\rangle &= \sqrt{1/2}(|0_A0_C\rangle \pm |1_A1_C\rangle), \\ |\Psi_{AC}^\pm\rangle &= \sqrt{1/2}(|0_A1_C\rangle \pm |1_A0_C\rangle) \end{aligned} \quad (2.27)$$

— составляющие так называемого ортонормированного базиса Белла (J. Bell), построенного на состояниях двух кубитов A и C , относящихся только к отправителю A . Каждому из этих составляющих соответствует определенное состояние кубита получателя B , по-своему зависящее от параметров a и b . Получив некоторое, вообще говоря неизвестное ему состояние $|\Phi_C\rangle$, отправитель производит измерение запутанного состояния двух своих кубитов в базисе Белла (иначе говоря, осуществляет проектирование на состояния этого базиса).

Рассмотрим сначала случай, когда в результате с достаточно большой вероятностью отправитель получит проекцию $|\Psi_{AC}^+\rangle$ и сообщит об этом получателю с помощью классического сигнала (например, по телефону). Поскольку исходное состояние двух кубитов A и C отправителя и одного кубита B получателя $|\Phi_C\rangle \otimes |\Psi_{AB}\rangle$ редуцируется в результате этого измерения в состояние $|\Psi_{AC}^+\rangle \otimes (a|1_B\rangle + b|0_B\rangle)$, то тем самым сообщается получателю, чем отличается полученное им состояние кубита B от отправленного состояния кубита C и какую операцию нужно произвести с кубитом B , чтобы определить, каким было отправленное состояние кубита C . Для определения последнего в рассматриваемом случае достаточно произвести локальное унитарное преобразование, соответствующее логической операции NOT = $\hat{\sigma}_x: |0\rangle \Rightarrow |1\rangle, |1\rangle \Rightarrow |0\rangle$. Если отправитель получил запутанное состояние $|\Phi_{AC}^+\rangle$, то это будет означать, что полученное состояние будет просто совпадать с первоначально отправленным, а если он получил $|\Phi_{AC}^-\rangle$, то нужно произвести преобразование оператором Паули $\hat{\sigma}_z: |0\rangle \Rightarrow |0\rangle, |1\rangle \Rightarrow -|1\rangle$. Легко определить, какую операцию нужно произвести получателю в оставшемся случае. На этом заканчивается процесс телепортации. Аналогичный процесс можно организовать и для более чем двух пользователей. Квантовая схема операции однокубитовой телепортации может быть представлена в виде [2.11]:

Подобным образом можно телепортировать многокубитовые, в том числе и запутанные состояния и осуществлять многокубитовые квантовые операции с разнесенными (remote) кубитами. При этом отпадает необходимость иметь кубиты в непосредственной близости друг от друга при выполнении, например, операции CNOT или операций формирования сложных запутанных состояний, таких как состояния трехкубитового «шредингерского кота» или GHZ (Greenberger-Horn-Zeilinger) $|Y\rangle = (|000\rangle + |111\rangle)/2$.

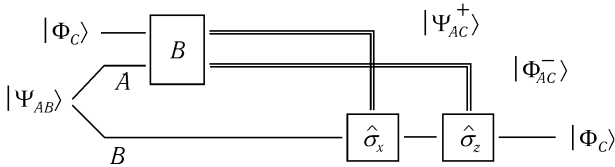


Рис. 2.2. Квантовая схема телепортации для двух случаев получаемой по классическому каналу связи информации о измеренных в базисе Белла (прямоугольник B) $|\Psi_{AC}^+\rangle$ и $|\Phi_{AC}^-\rangle$. Двойная линия соответствует классическому каналу связи.

Готтесман и Чуанг [2.11, 2.12] показали, что, используя однокубитовую квантовую телепортацию, как базовую составляющую (primitive), можно построить квантовые логические операции, которые не могут быть осуществлены непосредственно с помощью унитарных операций. По этой схеме различные разнесенные квантовые операции охватывают определенные вспомогательные состояния и производятся с использованием классически контролируемых однокубитовых операций только на приемном конце квантового канала.

С точки зрения теории информации, кубиты характеризуют *прямые* ресурсы передаваемого сигнала, которые могут быть использованы для передачи информации по квантовому каналу, тогда как забиты представляют собой только *косвенные* ресурсы, необходимые для обслуживания канала связи между A и B . С помощью только одних забитов нельзя передавать направленную информацию о произвольном состоянии системы. Для этого квантовый канал должен быть дополнен направленной передачей классических битов информации.

Все операции, осуществляемые при телепортации, (измерение запутанного состояния отправителем в базисе Белла и однокубитовые унитарные преобразование на приемном конце), являются локальными по своей природе. Они дополняются классической связью. С практической точки зрения важно выяснить, как ведут себя запутанные состояния в процессе телепортации под действием локальных квантовых операций и классической связи (local quantum operations and classical communication — LQCC) и нельзя ли сделать этот процесс более эффективным.

Изложим некоторые результаты, касающиеся этого вопроса, приведенные в статье Джонатана и Пленнио (D. Jonathan, M. Plenio) [2.13].

Пусть отправитель A и получатель B участвуют в образовании чисто-го запутанного двухчастичного конечномерного состояния $|\psi_1\rangle$, которое желательно, используя только LQCC, преобразовать в $|\psi_2\rangle$. В этом случае существенна теорема Нильсена (M. Nilsen) [2.14, 2.15].

Запишем разложения Шмидта для n -мерных парных состояний в виде

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \sum_{i=1}^n c_i |i_A\rangle \otimes |i_B\rangle, & 1 \geq c_1^2 \geq c_2^2 \geq \dots \geq c_n^2 > 0, \\ |\psi_2\rangle &= \sum_{i=1}^n c'_i |i_A\rangle \otimes |i_B\rangle, & 1 \geq c_1'^2 \geq c_2'^2 \geq \dots \geq c_n'^2 > 0. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Теорема Нильсена утверждает, что LQCC конвертирует $|\psi_1\rangle \Rightarrow |\psi_2\rangle$ с 100% вероятностью только если для $1 \leq l \leq n$

$$\sum_{i=1}^l c_i^2 \leq \sum_{i=1}^l c_i'^2. \quad (2.29)$$

Из теоремы следует, что существуют такие пары состояний, когда одно из них не конвертируется в другое. Такие состояния называются *несравнимыми* (incomparable), введем для них обозначение $|\psi_1\rangle \leftarrow / \rightarrow |\psi_2\rangle$.

Например, такими состояниями являются

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \sqrt{0,4} |00\rangle + \sqrt{0,4} |11\rangle + \sqrt{0,1} |22\rangle + \sqrt{0,1} |33\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \sqrt{0,5} |00\rangle + \sqrt{0,25} |11\rangle + \sqrt{0,25} |22\rangle, \end{aligned} \quad (2.30)$$

поскольку $c_1^2 < c_1'^2$, но $c_1^2 + c_2^2 > c_1'^2 + c_2'^2$. Максимальная вероятность, с которой возможна конверсия этих функций, определяется выражением

$$p_{\max}(\psi_1 \Rightarrow \psi_2) = \min_{(l)} \frac{E_l(\psi_1)}{E_l(\psi_2)}, \quad (2.31)$$

где суммы

$$E_l(\psi_1) = 1 - \sum_{i=1}^{l-1} c_i^2 = \sum_{l-1}^n c_i^2 \quad (2.32)$$

носят название *монотонов запутанности* (entanglement monotones) [2.16]. Это минимальное количество невозрастающих параметров, характеризующих квантовый нелокальный ресурс системы кубитов. В случае двух кубитов ($l = 1, 2$) мы имеем только два монотона, равные c_1^2 и $c_1^2 + c_2^2 = 1$. Для вероятности преобразования (2.31) пары функций (2.30) получим 80%.

Из выражения (2.31), в частности, следует, что

- а) процесс преобразования $|\psi_1\rangle \Rightarrow |\psi_2\rangle$ является необратимым;
- б) нелокальные ресурсы, определяемые запутанностью неаддитивны, то есть состояния $|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$ имеют большие ресурсы, чем удвоенный ресурс одного состояния $|\psi\rangle$;
- в) нелокальный ресурс полностью описывается совокупностью монотонов.

Предположим теперь, что имеется «банк запутанных состояний», то есть такой *нерасходуемый* физический ресурс, из которого можно *позаимствовать на время* преобразования дополнительное запутанное состояние $|\phi\rangle$. Преобразование запутанных состояний с использованием запутанного состояния $|\phi\rangle$ было названо локальным квантовым преобразованием при содействии запутывания (entanglement-assisted local quantum transformation — ELQCC).

Пусть заимствовано состояние

$$|\phi\rangle = \sqrt{0,6}|44\rangle + \sqrt{0,4}|55\rangle. \quad (2.33)$$

Коэффициенты Шмидта γ_k^2 , $\gamma_k'^2$ для произведений состояний в порядке уменьшения:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle \otimes |\phi\rangle &: 0,24; 0,24; 0,16; 0,16; 0,06; 0,06; 0,04; 0,04, \\ |\psi_2\rangle \otimes |\phi\rangle &: 0,30; 0,20; 0,15; 0,15; 0,10; 0,10; 0,00; 0,00, \end{aligned} \quad (2.34)$$

то есть

$$\sum_{k=1}^l \gamma_k^2 \leq \sum_{k=1}^l \gamma_k'^2, \quad 1 \geq l \geq 8. \quad (2.35)$$

Следовательно, согласно теореме Нильсена преобразование $|\psi_1\rangle \otimes |\phi\rangle \Rightarrow |\psi_2\rangle \cdot |\phi\rangle$ может быть теперь реализовано с 100% уверенностью, если использовать LQCC. После выполнения преобразования состояние $|\phi\rangle$ возвращается в «банк» (см. рис. 2.3). Это состояние действует

подобно *катализатору* в химических реакциях: его наличие позволяет произвести запрещенное преобразование, и поскольку оно не расходуется, оно может быть использовано многократно.

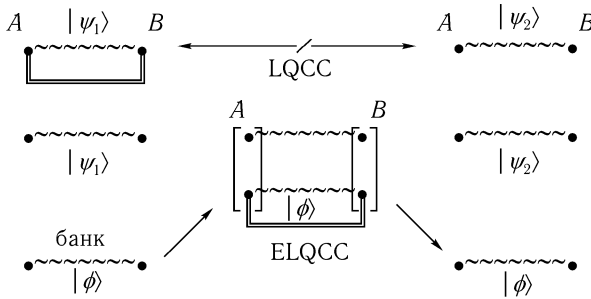


Рис. 2.3. Схема преобразования $|\psi_1\rangle \Rightarrow |\psi_2\rangle$ без участия (LQCC) и при участии катализатора $|\phi\rangle$ (ELQCC), двойная линия обозначает классический канал связи [2.13].

В [2.13], в частности, показано также, что катализатор не может быть максимально запутанным состоянием, кроме того, эффекты катализа не могут привести к максимальной концентрации запутанности.

Заметим, что использование телепортации позволяет сконструировать помехоустойчивые логические операции для универсальных квантовых вычислений [2.12] (об этом см. раздел 2.3.3).

2.2.4. Клонирование сигнального состояния

Отличие клонирования от копирования состоит в том, что при клонировании оператор, желающий создать копию неизвестного состояния кубита, знает только то, что она должна быть идентична первоначальному кубиту, но он не знает ничего о самом ее состоянии.

Рассмотрим два сигнальных состояния квантовой системы M : $|a_m\rangle$ и $|b_m\rangle$ и некоторое устройство — оператор, который создает копию этих состояний в системе X , находящейся в начальном состоянии $|0\rangle$, то есть осуществляет операцию [2.17]:

$$\begin{aligned} |a_m 0_x\rangle &\Rightarrow \sqrt{1/2}|a_m a_x\rangle, \\ |b_m 0_x\rangle &\Rightarrow \sqrt{1/2}|b_m b_x\rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

При клонировании суперпозиции двух состояний $|c_m\rangle = \sqrt{1/2} \times (|a_m\rangle + |b_m\rangle)$, соответственно, мы должны были бы получить

$$\begin{aligned} |c_m 0_x\rangle &= \sqrt{1/2} (|a_m 0_x\rangle + |b_m 0_x\rangle) \Rightarrow 1/2 (|a_m a_x\rangle + |b_m b_x\rangle) \neq \\ &\neq |c_m c_x\rangle = 1/2 (|a_m a_x\rangle + |b_m b_x\rangle + |a_m b_x\rangle + |b_m a_x\rangle), \end{aligned} \quad (2.37)$$

откуда следует, что в случае неортогональности состояний ($|a_m b_x\rangle$, $|b_m a_x\rangle \neq 0$) операция клонирования суперпозиции противоречит квантовомеханическому принципу *линейности* унитарных операций. Это значит, что невозможно создать такое копирующее квантовое устройство, основанное на использовании унитарных операций, которое бы, получив произвольное неизвестное состояние на входе, создало бы две копии — одну на входе, а другую на выходе. В этом состоит теорема Вуттерса и Зурека (W. Wootters, W. Zurek) [2.18] о *невозможности клонирования* неизвестного заранее квантового состояния. Оказывается, однако, можно указать также случаи, когда и при ортогональности смешанных сигнальных состояний клонирование невозможно [2.19].

Если бы клонирование было возможным, то оказалось бы возможным в процессе телепортации передавать классические сигналы со сверхсветовой скоростью. Это означало бы, что два события — отправление сигнала C от A и получение его у B — разделены пространственно-подобным мнимым интервалом и поэтому в некоторой системе отсчета второе событие могло бы предшествовать первому событию, и, следовательно, во временном интервале между этими событиями состояние передаваемого кубита C могло бы совпадать с состоянием кубита B , то есть произошло бы его клонирование [2.20].

Из теоремы о невозможности клонирования, в частности также следует, что сохранение копии начального неизвестного сигнального состояния кубита C у отправителя A после телепортации сигнала к получателю B невозможно. Первоначальный сигнал у отправителя *неизбежно стирается*. Пусть теперь предполагается произвести телепортацию сигнала, образующего запутанное состояние для двух кубитов отправителя A , при этом у получателя B имеется вначале один кубит в некотором состоянии. Помимо этого, как обычно формируется максимально запутанное состояние для кубитов отправителя и получателя, образующее квантовый канал. После телепортации сигнала получатель помимо запутанного состояния канала должен приобрести запутанное состоя-

ние переданного кубита и кубита, оставшегося у отправителя. Тем самым запутанность состояния получателя увеличится вдвое по сравнению с максимальной. Однако это противоречит общему закону о невозможности увеличения запутанности с помощью локальных операций, выполняемых при телепортации [2.21]. Таким образом, после телепортации сигнала не только стирается начальный сигнал у отправителя, но должно также *разрушаться* и максимально запутанное состояние, играющее роль квантового канала. Это значит, что имеет место полное или частичное расходование запутывания как ресурса. Однако, если использовать принцип локальных квантовых преобразований с заимствованием вспомогательного запутывания (ELQCC), рассмотренный в разделе 2.2.3, полного разрушения квантового канала и расходования ресурса запутывания при выполнении таких операций можно избежать.

2.2.5. Квантовое фурье-преобразование

Рассмотрим квантовую систему — *квантовый регистр* в виде цепочки из L кубитов с номерами $i = 0, 1, 2, \dots, L - 1$, имеющий $N = 2^L$ булевых состояний и который может хранить целые числа x от 0 до $N - 1$. Для L -значного в двоичном представлении числа запишем

$$x = \sum_{i=0}^{L-1} x_i 2^i, \quad (2.38)$$

где коэффициенты x_i , как и в случае классических битов, принимают только два значения 0 или 1. Состояния квантового регистра, соответствующие 2^L -мерным векторам являются прямыми произведениями двухмерных векторов состояний отдельных кубитов $|x_i\rangle$. Используем далее для них обозначение:

$$|x\rangle = |x_{L-1}, x_{L-2}, \dots, x_0\rangle = |x_{L-1}\rangle \otimes |x_{L-2}\rangle \otimes \dots \otimes |x_0\rangle, \quad (2.39)$$

например, состояние $|5\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle = |101\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ — восьмимерный вектор состояния требует для записи 3 кубита.

Квантовое фурье-преобразование представляет собой унитарное преобразование (quantum Fourier transform — QFT_N) состояния кван-

того регистра, описываемого N -мерным вектором состояния вида $\sum_{x=0}^{N-1} f(x)|x\rangle$ в $N = 2^L$ -мерном пространстве, в другое состояние $\sum_{k=0}^{N-1} \tilde{f}(k)|k\rangle$:

$$\text{QFT}_N : \sum_{x=0}^{N-1} f(x)|x\rangle \Rightarrow \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{f}(k)|k\rangle, \quad (2.40)$$

где амплитуда фурье-преобразования $f(x)$ имеет вид

$$\tilde{f}(k) = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{x=0}^{N-1} \exp(2\pi i k x / N) f(x). \quad (2.41)$$

В двухмерной x, k -плоскости фурье-преобразование соответствует повороту осей координат на 90° , приводящему к преобразованию шкалы x в шкалу k . Квантовое фурье-преобразование представляется унитарной матрицей $N \times N$:

$$\text{QFT}_N = \sqrt{1/N} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \dots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \dots & \omega^{2(N-1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \omega^{N-1} & \omega^{2(N-1)} & \dots & \omega^{(N-1)2} \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

$$\omega = \exp(2\pi i / N).$$

Амплитуды базисных функций фурье-преобразования $\exp(2\pi i k x / N)$ одинаковы при всех значениях x , а их фазы пробегают значения $0, 2\pi i k / N, 2\pi i 2k / N, \dots, 2\pi i (N-1)k / N$.

Квантовое фурье-преобразование может быть построено с помощью двух основных операторов, осуществляющих унитарные операции в 2^L -мерном гильбертовом пространстве состояний. Это однокубитовый оператор Адамара \hat{H}_j (2.2), действующий на j -й кубит и двухкубитовый оператор контролируемого изменения фазы $\hat{B}_{j,k}$, зависящий только от относительной фазы состояний $|1\rangle$ j -го и k -го кубитов, независимо от состояния других кубитов. Эти операторы описываются, соответственно, матрицами в базисах $|x_j\rangle$ и $|x_j x_k\rangle = |x_j\rangle \otimes |x_k\rangle$ [2.22]:

$$\hat{H}_j = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{B}_{j,k} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\theta_{k-j}} \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

где относительная фаза $\theta_{j-k} = \pi/2^{k-j}$, $k-j$ — «расстояние» между двумя кубитами, $1 \geq k-j \geq L$.

Произведем далее над состоянием $|x\rangle$ определенную последовательность операций, отмечая каждый шаг индексом j , который изменяется от $j = L-1$ до $j = 0$. В качестве *первого шага* положим $j = L-1$ и подействуем оператором \hat{H}_{L-1} на первый кубит x_{L-1} , что эквивалентно действию оператора $\hat{H}_{L-1} \otimes 1_{L-2} \otimes \dots \otimes 1_2 \otimes 1_1 \otimes 1_0$ на состояние всего регистра $|x\rangle$.

Далее на *втором шаге* положим $j = L-2$ и подействуем произведением операторов $B_{L-2,L-1}(1_{L-1} \otimes \hat{H}_{L-2})|_{\Rightarrow}$ на состояния двух кубитов x_{L-1} и x_{L-2} (здесь, как и в квантовых схемах [2.22], предполагается, что операторы действуют по направлению оси времени в порядке слева направо, что обозначим здесь $|_{\Rightarrow}$). Продолжая далее таким образом, на очередном j -м шаге получим операцию $\hat{B}_{j,j+1} \cdot \hat{B}_{j,j+2} \times \dots \cdot \hat{B}_{j,L-1} \cdot \hat{H}_j|_{\Rightarrow}$. Когда будет достигнуто значение $j = 0$, этот шаг заканчивается операцией \hat{H}_0 . В результате, полное унитарное преобразование представляется как последовательность элементарных шагов для всех значений j .

Например, в случае простейшего регистра из $L = 2$ кубитов ($j = 0, 1$) унитарное фурье-преобразование QFT_4 формируется из последовательности всего трех элементарных операций, описываемых матрицами в четырехмерном базисе $|x\rangle = |x_1 x_0\rangle: |0_1 0_0\rangle, |0_1 1_0\rangle, |1_1 0_0\rangle, |1_1 1_0\rangle$ следующего вида $\hat{U}_4 = (\hat{H}_1 \otimes 1_0) \cdot \hat{B}_{01} \cdot (1_1 \otimes \hat{H}_0)|_{\Rightarrow}$.

Чтобы записать результат действия последнего выражения на состояние двухкубитового регистра в матричной форме, представим, используя единичную двухрядную матрицу $\hat{1}_k$, операторы Адамара \hat{H}_j также в виде матриц 4×4 в базисе $|x_{j+1} x_j\rangle$:

$$\begin{aligned} (\hat{H}_{j+1} \otimes \hat{1}_j) &= \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ (\hat{1}_{j+1} \otimes \hat{H}_j) &= \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.44)$$

и перейдем к обычной для умножаемых операторов-матриц последова-

тельности действующих справа налево ($|\leftarrow$):

$$\begin{aligned} \widehat{U}_4 &= (\widehat{H}_1 \otimes \widehat{I}_0) \cdot \widehat{B}_{01} \cdot (\widehat{I}_1 \otimes \widehat{H}_0) | \Rightarrow = (\widehat{I}_1 \otimes \widehat{H}_0) \cdot \widehat{B}_{01} \cdot (\widehat{H}_1 \otimes \widehat{I}_0) | \leftarrow = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & i & -i \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -i & i \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

В результате действия унитарной операции (2.45) четырехмерное состояние $|x\rangle$ двухкубитового регистра преобразуется в четырехмерную линейную суперпозицию $|c\rangle$ состояний следующим образом:

$$\widehat{U}_4 |x\rangle = \widehat{U}_4 \begin{pmatrix} |00\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{pmatrix} = |c\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} |00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle \\ |01\rangle - |01\rangle + i|10\rangle - i|11\rangle \\ |10\rangle + |01\rangle - |10\rangle - |11\rangle \\ |11\rangle - |01\rangle + i|10\rangle + i|11\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Заметим, что это преобразование *не приводит к запутыванию состояний*. Действительно, правую часть выражения (2.46) можно представить в виде произведений:

$$\begin{aligned} |00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle &= (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \\ |01\rangle - |01\rangle + i|10\rangle - i|11\rangle &= (|0\rangle + i|1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \\ |10\rangle + |01\rangle - |10\rangle - |11\rangle &= (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \\ |11\rangle - |01\rangle + i|10\rangle + i|11\rangle &= (|0\rangle - i|1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned} \quad (2.47)$$

То есть для $N = 2^L = 4$ (четырем базисным состояниям 00, 01, 10, 11 сопоставим числа $x, k = 0, 1, 2, 3$) получим:

$$\widehat{U}_4 : |x\rangle \Rightarrow \frac{1}{2} \left(|10\rangle + \exp(\pi i x/2) |1\rangle + \exp(\pi i x) |2\rangle + \exp(3\pi i x/2) |3\rangle \right). \quad (2.48)$$

Из сравнения (2.41) и (2.48) видно, что для получения квантового фурье-преобразования следует дополнительно перейти от состояния $|c\rangle$ в (2.46) к состоянию $|k\rangle$, отличающемуся от $|c\rangle$ обратным порядком расположения состояний кубитов в регистре: $00 \Rightarrow 00, 01 \Rightarrow 10, 10 \Rightarrow 01, 11 \Rightarrow 11$. Такое преобразование производится с помощью еще

одной унитарной операции обмена (SWAP) состояний двух кубитов:

$$|k\rangle = \text{SWAP}|c\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} |c\rangle. \quad (2.49)$$

Заметим, что эта процедура аналогична операции «инверсии порядка двоичных знаков» в классическом алгоритме быстрого дискретного фурье-преобразования Кули–Тьюки (J. Cooley, J. Tukey) [2.23]. В результате $\text{QFT}_4 = \text{SWAP} \cdot \hat{U}_4$.

При $L = 4$ размерность гильбертова пространства $N = 2^4 = 16$ и для выполнения $(\text{QFT})_{16}$ необходимо произвести последовательность уже не трех, а $L(L+1)/2 = 10$ элементарных унитарных операций, с L операциями Адамара с каждым кубитом и $L(L-1)/2$ двухкубитовыми операциями контролируемого изменения фазы, а именно (для краткости здесь опущены единичные операторы) [2.22]:

$$\hat{U}_{16} = \hat{H}_3 \cdot (\hat{B}_{23}\hat{H}_2) \cdot (\hat{B}_{13}\hat{B}_{12}\hat{H}_1) \cdot (\hat{B}_{03}\hat{B}_{02}\hat{B}_{01}\hat{H}_0)|_{\Rightarrow}. \quad (2.50)$$

Схема QFT для этого случая представлена на рис. 2.4.

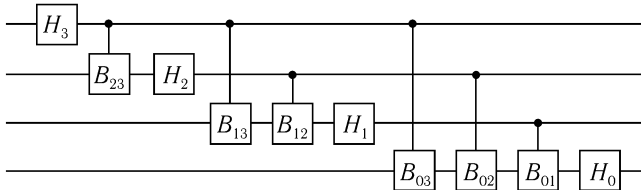


Рис. 2.4. Квантовая схема квантового фурье-образования, выполняемого на регистре из четырех кубитов (последовательность операций слева направо).

Если предполагать, что на каждую элементарную операцию затрачивается *одно и то же время*, то есть все операции имеют одинаковое разрешение по времени, то временная цена полного преобразования пропорциональна числу операций и растет как *квадратичная* функция от числа L . Для сравнения укажем, что число элементарных операций, необходимых для выполнения быстрого классического фурье-преобразования Кули–Тьюки *экспоненциально* зависит от используемого числа кубитов [2.23], а именно, $\sim 3NL = 3 \cdot 2^L L \gg L(L+1)/2$ и, следовательно, временная цена классического фурье-преобразования растет экспоненциально с L . Ускорение квантового фурье-преобразования

по сравнению с классическим обязано свойству унитарного преобразования, действующего одновременно на целый массив параметров в гильбертовом пространстве состояний, что является проявлением квантового параллелизма.

Отдельные реальные квантовые логические операции требуют обычно для своего выполнения характерного времени. В ЯМР квантовых компьютерах — это длительность радиочастотных импульсов заданной интенсивности, осуществляющих необходимый поворот спинов (см. гл. 4). Так, для выполнения операции $\hat{V}_{j,k}$ в случае квантового фурье-преобразования необходимо осуществить поворот фазы на угол $\theta_{j-k} = \pi/2^{k-j}$, что требует длительности τ_{k-j} , пропорциональной $2^{-(k-j)}$, где $2^{-1} \leq 2^{-(k-j)} \leq 2^{-(L-1)}$. Число таких двухкубитовых операций контролируемого изменения фазы при выполнении квантового фурье-преобразования равно $L(L-1)/2$. Диапазон необходимых длительностей элементарных операций при сохранении точности квантового фурье-преобразования увеличивается с числом L экспоненциально и соответственно влияет на временную цену всего преобразования. Однако следует учесть, что минимальное значение длительности элементарной операции определяется *временным разрешением* регистрирующей системы, которое при больших значениях L может существенно ограничить этот диапазон и в результате привести к тому, что зависимость от L временной цены квантового фурье-преобразования хотя и будет более сильной, чем $\sim L$, но более слабой, чем $\sim L2^L$ [2.24]. Использование приближенного квантового фурье-преобразования, в котором уменьшается число операций контролируемого фазового сдвига до величины, определяемой требованием точности [2.25], может привести к аналогичному выводу. Более того, можно предложить оптимизационную процедуру выполнения такого преобразования, приводящую к *полиномиальной* зависимости временной цены квантового фурье-преобразования от L , позволяющую сохранить значительное ускорение квантового фурье-преобразования по сравнению с классическим фурье-преобразованием и для неидеальных квантовых операций.

2.2.6. Алгоритм факторизации Шора

Алгоритм состоит в определении простых множителей p и q для заданного целого числа $M = p \cdot q$ путем использования квантовой схемы для определения периода r некоторой периодической функции вида $u_M(x) = a^x \bmod M$, где $x = 0, 1, \dots, N-1$, $N = 2^L$, a — любое число, не

имеющее общих делителей с рассматриваемым числом M . Например, в случае нечетного числа $M = 15$ можно выбрать, в частности, $a = 2$ (если M — четное число, то задача разделения на множители, очевидно, сводится к задаче для соответствующего нечетного сомножителя), и тогда последовательность чисел $2^0, 2^1, \dots, 2^x$ по модулю 15 представляется в следующем виде $1, 2, 4, 8, 1, 2, 4, 8 \dots$, то есть имеет период по x $r = 4$ и удовлетворяет уравнению $2^r \equiv 1 \pmod{15}$ (в общем случае $a^r \equiv 1 \pmod{M}$, а параметр r называется порядком функции $a \pmod{M}$ когда $a < M$ и не имеет общих множителей с M).

Теперь, когда период r известен, множители числа M с помощью алгоритма Евклида определяются как наибольшие общие делители чисел $2^{r/2} \pm 1$ и M . В рассматриваемом случае будем иметь $15 = 5 \cdot 3$. Для записи этого числа, очевидно, необходимо 4 бита ($2^4 = 16$). В общем случае для записи числа M необходимо будет иметь около $\log_2 M$ бит информации.

Вычислительная схема, используемая для осуществления квантового алгоритма Гора (P. Shor) (см. расширенную версию первого сообщения в 1994 г. [2.26], а также [2.22, 2.27]), представляет собой два квантовых регистра X и Y , каждый состоящий в начальный момент из совокупности кубитов в нулевом булевом состоянии $|0\rangle = |0_{L-1}, 0_{L-2}, \dots, 0_0\rangle$. Регистр X используется для размещения аргументов x (натуральные числа) функции $y_M(x)$, то есть N состояний $|x\rangle$ типа (2.39), а вспомогательный регистр Y используется для размещения значений самой функции $y_M(x)$ с подлежащим определению периодом r . Регистр Y должен быть достаточно большим, чтобы разместить значения функции $y_M(x)$, охватывающие достаточное число предполагаемых полных периодов. Для этого необходимо, чтобы число состояний регистра $N = 2^L \geq M^2 \gg r^2$.

На первом этапе алгоритма начальное состояние $|0\rangle$ регистра X переводится с помощью операции Уолша–Адамара в равновероятную (с равными амплитудами) суперпозицию всех булевых состояний $N = 2^L$ $|x\rangle = |x_{L-1}, x_{L-2}, \dots, x_0\rangle$ при этом второй регистр остается в состоянии $|0\rangle$. В результате, для системы двух регистров получается состояние

$$|\varphi[x, 0]\rangle = \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes |0\rangle = \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} |x, 0\rangle. \quad (2.51)$$

Полное число необходимых логических операций на этом этапе опреде-

ляется числом элементарных операций Адамара, то есть числом L . Параллельно с помощью обратимой вычислительной операции квантовый регистр Y заполняется значениями функции $y_M(x) = 2^x \bmod M$ и первоначальное состояние системы двух регистров превращается в суперпозицию, в которой между состояниями обоих регистров образуется определенная связь. Например, в случае $M = 15$ она имеет вид:

$$\begin{aligned} |\varphi[x, y_M(x)]\rangle &= \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes |y_M(x)\rangle = \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes |2^x \bmod 15\rangle = \\ &= \sqrt{1/N} \left(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |2\rangle + |2\rangle \otimes |4\rangle + |3\rangle \otimes \right. \\ &\left. \otimes |8\rangle + |4\rangle \otimes |1\rangle + |5\rangle \otimes |2\rangle + |6\rangle \otimes |4\rangle + \dots + |N-1\rangle \otimes |2^{N-1} \bmod 15\rangle \right), \end{aligned} \quad (2.52)$$

откуда следует, что последовательность значений функций $y_{15}(x)$ имеет период $r = 4$ и каждому фиксированному состоянию второго регистра соответствует последовательность амплитуд, оставшихся в первом регистре x , с расстояниями друг от друга, равными периоду функции $y_{15}(x)$. Например, если *зафиксировано* состояние второго регистра $|4\rangle$, то в первом регистре соответствующие числа x отличаются на период $r = 4$:

$$\begin{aligned} |\varphi[x, 4]\rangle &= \sqrt{1/N} \left(|2\rangle + |6\rangle + |10\rangle + \dots + |4A + l\rangle \right) \otimes |4\rangle = \\ &= \sqrt{1/(A+1)} \sum_{j=0}^A |rj + l\rangle \otimes |4\rangle, \end{aligned} \quad (2.53)$$

где $0 \leq l \leq r < M$, $A = [N/r - 1]$ (целая часть). В рассматриваемом случае $l = 2$ — начальное значение x в (2.53), определяемое выбором фиксированного значения состояния второго регистра $|4\rangle$.

Состояние (2.53) является однородной некогерентной суперпозицией нумеруемых числами j и l базисных состояний в первом регистре с периодом r в зависимости от $x = rj + l$ (рис. 2.5а). Таким образом, *второй* регистр служит для приготовления периодического состояния в первом регистре. Это оказывается возможным благодаря использованию суперпозиции квантовых состояний обоих регистров, что является проявлением квантового параллелизма в алгоритме Шора. При

этом не возникает необходимости отдельного измерения состояния второго регистра.

На *втором* этапе алгоритма для экстракции периода r над состоянием *первого* регистра производится операция фурье-преобразования (2.41) (для простоты предположим, что N точно делится на r , так что $A = N/r - 1$):

$$\text{QFT}_N: \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^A |rj + l\rangle \Rightarrow \sum_{k=0}^{N-1} f_l(k) |k\rangle, \quad (2.54)$$

где

$$f_l(k) = (\sqrt{r/N}) \sum_{j=0}^A \exp\left(\frac{2\pi i(jr + l)k}{N}\right). \quad (2.55)$$

Вероятность получить состояние $|k\rangle$ определяется выражением

$$p(k) = |f_l(k)|^2 = (r/N^2) \left| \sum_{j=0}^A \exp[2\pi i j r k / N] \right|^2, \quad (2.56)$$

которое не зависит от l . Учитывая, что основной вклад в (2.56) дают слагаемые, у которых rk/N близко к целому числу, точнее

$$-r/2 \leq rk \bmod N \leq r/2, \quad (2.57)$$

в случае малых значений r/N для каждого значения r , которое удовлетворяет (2.57), можно получить оценку для вероятности [2.22]:

$$p(k) \geq 4/(\pi^2 r). \quad (2.58)$$

Из (2.58) следует, что по крайней мере с вероятностью $4/\pi^2 = 0,405$ измеренное значение k принимает дискретные значения $k = \nu N/r$, где $\nu = 0, 1, \dots, r - 1$ — целое число. То есть в результате квантового фурье-преобразования суперпозиция (2.53) преобразуется в равновероятную суперпозицию (2.55) с периодом N/r (рис. 2.5 б).

Измерение вероятности (2.56) позволяет далее определить значения $k = \nu N/r$, имея которые при известном k/N , можно найти отношение ν/r . Если ν и r не имеют общих множителей, кроме единицы, можно

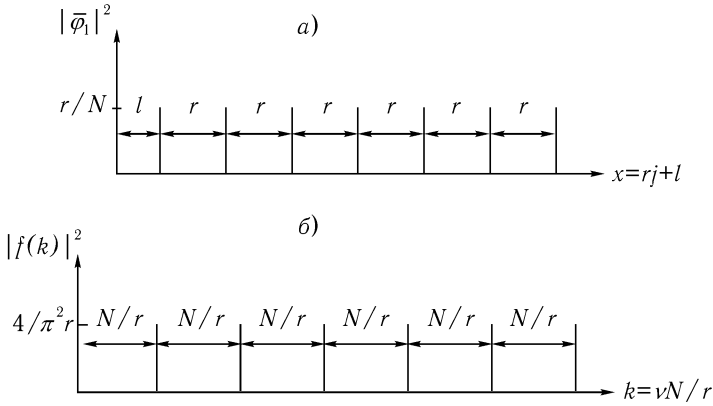


Рис. 2.5. Схематический вид идеальных зависимостей функций а) $|\varphi_1^-(x)|^2$ и б) $|f(k)|^2$ в отсутствии декогерентизации.

определить период r путем преобразования отношения ν/r к неприводимому виду, то есть к виду, когда числитель и знаменатель не имеют других общих наибольших делителей, кроме единицы. После этого с помощью алгоритма Евклида легко найти и множители числа M .

Определение неизвестного периода с помощью фурье-преобразования в некоторой степени аналогично измерению постоянных решетки кристалла методом рентгеновской или нейтронной дифракции. Заметим также, что для определения периода r не требуется определять все значения $y_M(x)$. В этом смысле задача подобна задаче Дойча, в которой важно знать только некоторые свойства функции $f(x)$, а не все ее значения.

Алгоритм Шора содержит вероятностный аспект. Это связано с тем, что благодаря наличию разного рода шумов период r , а следовательно, и множители числа M , полученные в процессе описанных выше вычислений, не будут точными. Реально для извлечения периода из фурье-преобразования следует произвести еще ряд дополнительных вычислительных операций, например, произвести умножение полученных множителей с помощью классических вычислительных операций для проверки результата. Если число M не получится, то весь алгоритм Шора повторяется с другим значением ν , пока не будет получен правильный ответ. Это может, вообще говоря, существенно ухудшить эффективность всей процедуры алгоритма квантовой факторизации.

Разложения числа N на множители с помощью классических операций в простейшем случае можно попытаться сделать путем деления N на 2, 3, 4 и т. д. до \sqrt{N} . Число элементарных операций в этом случае будет $\sqrt{N} = 2^{L/2}$, то есть экспоненциально зависит от числа кубитов в регистре L . Проблема факторизации стала привлекать внимание, в связи с использованием систем секретного обмена данными по открытому каналу связи с открытым ключом (криптография), например, шифрованных по методу RSA (*R. Rivest, A. Shamir, L. Adleman*).

Наилучший из известных сейчас классических алгоритмов факторизации требует порядка $\exp(\text{const} \cdot L^{1/3} (\log L)^{2/3})$ операций [2.28]. Для факторизации, например, 1000-значного числа (соответствующий регистр должен был бы иметь $L \sim 1000$ кубит!) потребуется $\sim 10^{23}$ классических операций, которую гигафлопный классический компьютер выполнял бы за более чем 10^7 лет.

В случае алгоритма Шора, использующего квантовое дискретное фурье-преобразование, полное число операций *степенным образом* зависит от L полиномиально ($\sim L^3$), то есть имеет место экспоненциальный выигрыш по сравнению с классическими методами. Однако эта зависимость не учитывает влияния паразитного взаимодействия между кубитами, которое приводит к заметной деградации квантовых вычислительных процессов с ростом L [2.29].

Далеко не ясным остается также сложный вопрос о временной цене конкретного способа реализации алгоритма Шора (см. выше параграф 2.2.5). Возможно, что решение этой проблемы может быть найдено на пути использования вместо быстрого квантового фурье-преобразования — быстрого *квантового вейвлет-преобразования* (quantum wavelet-transform). Для выполнения последнего требуется то же полиномиальное число элементарных унитарных операций, что и в случае квантового дискретного фурье-преобразования, то есть $\sim L^2$ [2.30]. Однако оно не содержит операций типа контролируемого изменения фазы $\hat{V}_{j,k}$ и, следовательно, не содержит возрастающей экспоненциально с числом операций временной цены алгоритма Шора. Некоторые сведения о дискретных вейвлет-преобразованиях и их преимуществах перед дискретными фурье-преобразованиями смотри в приложении П.2 к главе 2.

Быстрый алгоритм факторизации, отличный от алгоритма Шора, был рассмотрен также А. Китаевым [2.31]. Он основан на измерении

собственных значений некоторого унитарного оператора. Простое и достаточно подробное изложение его можно найти в [2.32].

На выполнение алгоритма Шора существенное влияние оказывает процесс декогерентизации квантовых состояний. В частности, он определяет верхнюю границу для числа кубитов в регистре L , при котором этот алгоритм оказывается еще состоятельным. Если время декогерентизации для L -кубитового состояния $\sim (L\gamma_D)^{-1}$ (1.79), а время, затрачиваемое на каждый элементарный шаг вычислений τ и число шагов в случае алгоритма Шора $K \sim L^2$, то условие того, что когерентное выполнение всех L^2 шагов произойдет, будет определяться неравенством [2.22]

$$\tau L^2 < (L\gamma_D)^{-1}$$

или

$$L < (\tau\gamma_D)^{-1/3}. \quad (2.59)$$

Таким образом, предел алгоритма Шора зависит от отношения $(\tau\gamma_D)^{-1} = \tau_D/\tau$, которое определяется конкретным способом реализации квантовых операций. Например, для $L = 100$ необходимо иметь $\tau_D/\tau = 10^6$.

Еще более жестким становится это условие в случае, когда время декогерентизации L -кубитового состояния $\sim \tau_D/L^2$ (см. параграф 1.5.2).

2.2.7. Алгоритм Гровера поиска в базе данных

Пусть неотсортированная база данных состоит из N сообщений $S(0), S(1), \dots, S(x), \dots, S(v), \dots, S(N-1)$, представленных $N = 2^L$ состояниями квантового регистра из L кубитов. Известно, что одно из сообщений, соответствующее состоянию $x = v$, в отличие от других удовлетворяет определенному условию $S(v) = a$ (маркировано). Его и требуется найти. Наиболее эффективный классический алгоритм решения такой задачи состоит в простом переборе сообщений одного за другим. Такой алгоритм требует в среднем выполнения $N/2$ шагов для того, чтобы обнаружить сообщение $S(v)$ с вероятностью $1/2$. В 1996 году Гровером (L. Grover) был предложен *быстрый квантовый алгоритм* [2.33],

построенный на использовании *трех* основных элементарных унитарных операций, который позволяет произвести такой поиск за $\sim \sqrt{N}$ шагов.

Первая операция создает равновероятную (с равными амплитудами) начальную суперпозицию $|s\rangle$ всех $N = 2^L$ булевых состояний $|y\rangle = |y_{L-1}, y_{L-2}, \dots, y_0\rangle$, в которой все амплитуды одинаковы и равны $1/\sqrt{N}$. Она осуществляется с помощью $N = 2^L$ -мерного оператора Уолша–Адамара \widehat{W} (2.6), действующего на каждый из L кубитов, находящихся в исходном состоянии $|0\rangle = |0_{N-1}, 0_{N-2}, \dots, 0_n, \dots, 0_0\rangle$:

$$|s\rangle = \widehat{W}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} |y\rangle. \quad (2.60)$$

При этом амплитуда искомого маркированного состояния v тоже оказывается равной $1/\sqrt{N}$.

Сопоставим x -му начальному состоянию регистра цепочку состояний кубитов $|0\rangle$ и $|1\rangle$ $|y\rangle \equiv |y_{N-1}, y_{N-2}, \dots, y_0\rangle$ и аналогичную цепочку x -му результирующему состоянию, получаемую в результате *второй* унитарной операции Уолша–Адамара. Фаза результирующей конфигурации изменится на π каждый раз, когда преобразование действует на какой-либо кубит, находившийся в состоянии $|1\rangle$, оставляя его в том же состоянии. В результате знак амплитуды результирующего состояния после действия этой операции будет определяться четностью (parity) побитного скалярного произведения (по модулю 2) этих двух цепочек, определяемого как $x \cdot y = \sum_{n=0}^{N-1} x_n \cap y_n$ (сравни с операцией квантового фурье-преобразования (2.41)):

$$|x\rangle = \widehat{W}|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} (-1)^{x \cdot y} |y\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} \exp(i\pi x \cdot y) |y\rangle. \quad (2.61)$$

Третьим элементарным преобразованием является выборочное вращение фазы амплитуды в определенных состояниях. Одним из операторов, описывающих такое преобразование, является оператор инверсии \widehat{U}_0 , сохраняющий вектор состояния $|0\rangle$, но изменяющий знак всех векторов состояния, ортогональных $|0\rangle$ (так называемая инверсия относительно состояния $|0\rangle$):

$$\widehat{U}_0 = 2|0\rangle\langle 0| - \widehat{1}. \quad (2.62)$$

Унитарный оператор, действующий на произвольный вектор состояния, который сохраняет *известный* вектор $|s\rangle$ и изменяет знак всех векторов в гильбертовой гиперплоскости, ортогональной $|s\rangle$, принимает вид

$$\widehat{U}_s = 2|s\rangle\langle s| - \widehat{1} = \widehat{W}\widehat{U}_0\widehat{W}. \quad (2.63)$$

Такое преобразование называется также «преобразованием диффузии». Эта операция осуществляет *инверсию всех амплитуд* x -го состояния относительно всех амплитуд известного начального s -го состояния. Учитывая, что $\langle s|s\rangle = 1/N$ и $\langle s|x\rangle = 0$ при $s \neq x$, получим

$$\widehat{U}_s|x\rangle = 2/N|s\rangle - \widehat{1}|x\rangle. \quad (2.64)$$

Основой алгоритма Гровера является повторение над начальным состоянием двух унитарных операций: инверсии амплитуды только у искомого состояния v , определяемой третьим оператором типа

$$\widehat{U}_v = \widehat{1} - 2|v\rangle\langle v|, \quad (2.65)$$

и применения затем преобразования диффузии для всех амплитуд состояния \widehat{U}_s . Операция диффузии действует на вектор состояния, у которого все составляющие имеют одинаковые амплитуды, равные среднему значению $\sim 1/\sqrt{N}$, кроме одной, соответствующей искомому состоянию, амплитуда которой после первой операции стала отрицательна. Амплитуды $N - 1$ составляющих практически не изменят своей величины, а отрицательная амплитуда станет положительной и увеличит свою величину до $\sim 2/\sqrt{N}$.

Таким образом, необходимо повторение указанных операций $\sim \sqrt{N}$ раз для того, чтобы амплитуда искомого состояния достигла значений $\sim 1 \gg 1/\sqrt{N}$, при которых она может быть измерена. Указанная итерация осуществляется с помощью унитарного преобразования

$$\widehat{G} = \widehat{U}_s\widehat{U}_v. \quad (2.66)$$

Квантовая схема оператора этого преобразования строится только из операторов типа Уолша–Адамара и, в отличие от фурье-преобразования, оно не содержит двухкубитовых операторов типа контролируемого изменения фазы. Фаза отдельных состояний изменяется лишь на 0 или π при каждой последующей итерации. Поэтому для алгоритма Уолша–Адамара не возникает трудностей с экспоненциальным

ростом временной цены операции, с которыми встречаются при квантовом фурье-преобразовании.

Заметим, что база данных для осуществления квантового алгоритма поиска может быть представлена и классическими системами памяти, достаточно лишь иметь выход из нее в квантовую систему, где булевые состояния будут преобразовываться в когерентные суперпозиции.

Экспериментальное осуществление этой операции было впервые выполнено на простейших ЯМР квантовых компьютерах (см. гл. 4).

Строгому математическому обоснованию и развитию квантовых алгоритмов и, в частности, алгоритма Гровера посвящено большое число постоянно появляющихся работ, ряд существенных результатов принадлежит Ю. И. Ожегову [2.34–2.36].

2.3. Помехоустойчивость квантовых вычислительных процессов

2.3.1. Коррекция квантовых ошибок путем кодирования сигнала

Квантовые компьютеры значительно чувствительнее по сравнению с обычными классическими компьютерами к различного рода образующимся, накапливающимся и распространяющимся в них ошибкам, обусловленным случайным разбросом параметров кубитов, взаимодействием кубитов с окружением, внешними помехами и декогерентизацией квантовых состояний. Поэтому для их *надежной* работы очень важно иметь методы контроля и исправления этих ошибок. Для исправления ошибок в классических компьютерах существуют эффективные корректирующие схемы, однако, к сожалению, они не применимы непосредственно в случае квантовых вычислений, когда ошибки связаны в значительной степени с явлением декогерентизации квантовых состояний. Для исправления этих ошибок необходимо иметь достаточную информацию о природе окружения, определение которой потребовало бы измерений, разрушающих квантовую информацию, закодированную в квантовой системе. Использование кодов с повышенной избыточностью казалась также невозможной из-за невозможности клонирования информации в квантовых системах. После длительного пессимизма относительно возможности разработки соответствующих методов коррекции ошибок в квантовых компьютерах, в конце 1996 года

появились сообщения о том, что разработка таких методов все-таки возможна (см. обзор [2.37]). Были изучены механизмы, позволяющие не только подавлять декогерентизацию, но и обращать ее. Существование кодов, исправляющих квантовые ошибки впервые было продемонстрировано в работах Шора и Стина (P. Shor, A. Stean) в 1995 году [2.38, 2.39]. Шором и Китаевым в 1996 году [2.40–2.42] было указано на возможность так называемого *помехоустойчивого восстановления* (fault-tolerant recovery) информации с высокой точностью при наличии ошибок, в том числе и тех, которые вносятся в самом процессе восстановления, а также на возможность организации *помехоустойчивых квантовых вычислительных процессов* (fault-tolerant computation).

Методы помехоустойчивого кодирования в квантовых устройствах основаны на использовании таких свойств квантовых состояний, как возможность образования специальных *когерентных запутанных* состояний, и в этом можно увидеть некоторую аналогию с устойчивостью голографических изображений, определяемой когерентностными свойствами лазерного излучения.

Ошибки, обусловленные взаимодействием кубита с окружением, определяются образованием запутанности состояния компьютерного кубита и состояния окружения. Проблема исправления таких ошибок обычно связывается с необратимыми процессами декогерентизации, обусловленными образованием запутанных состояний кубита и окружения, имеющего громадное число степеней свободы, и быстрой потери информации о состоянии окружения. Для борьбы с этой потерей можно использовать определенный способ кодирования, при котором создаются запутанные состояния рассматриваемого кубита с вспомогательными (ancilla) кубитами, образующими также в свою очередь запутанные состояния с окружением, что позволяет затем путем унитарных операций, играющих роль обратной связи, исправлять квантовые ошибки, вносимые взаимодействием с окружением (quantum error correction codes (QECC)). Считается, что для исправления ошибок необходимо иметь 5–10 вспомогательных кубитов на один основной кубит. Логические операции при этом вместе с операциями по исправлению ошибок должны успевать выполняться за времена, существенно меньшие времен декогерентизации.

Можно сформулировать пять основных требований, выполнение которых может обеспечить помехоустойчивость квантовых вычислительных процессов с помощью корректирующих кодов [2.37]:

а) нельзя использовать один и тот же кубит несколько раз. В противном случае ошибка, возникшая в одном кубите, будет размножаться в системе кубитов подобно инфекции;

б) при операции помехоустойчивого восстановления информации производят копирование некоторой информации с сигнального регистра на вспомогательные кубиты и затем измеряют их состояние, чтобы определить так называемый *синдром ошибок*. При этом *необходимо копировать информацию не о сигнале, а об ошибках*, вносимых окружением. Для этого готовится специальное состояние вспомогательных кубитов, такое, что при измерении его мы получаем информацию только о имеющихся ошибках, а не о самом сигнале;

в) для исключения ошибок, связанных с кодированием, следует убедиться в *правильности процедуры кодирования* для известного состояния;

г) важно убедиться, что измерение синдрома ошибок выполнено корректно. Для этого следует *использовать повторные операции измерения* состояний вспомогательных кубитов;

д) *необходимо иметь правильный код*, который имеет специальные свойства, позволяющие квантовым вентилям эффективно оперировать с закодированной информацией, с учетом четырех требований а)–г).

Рассмотрим, следуя [2.6], в качестве примера простой код, защищающий сигнальный кубит от одиночных *амплитудных* ошибок, типа случайного перехода из состояния $|0\rangle$ в состояние $|1\rangle$, при использовании только двух вспомогательных кубитов. Рассматриваемый корректирующий код осуществляет кодирование состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ посредством состояний кластера из трех кубитов $|000\rangle$ и $|111\rangle$ и, соответственно, суперпозиция кодируется в виде запутанного состояния GHZ-типа

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \Rightarrow \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle = \alpha|0\rangle \otimes |00\rangle + \beta|1\rangle \otimes |11\rangle. \quad (2.67)$$

Если в начальный момент первый кубит находится в состоянии $|\psi\rangle$, а второй и третий в состоянии $|00\rangle$, то указанное кодирование производится посредством двух вентилях CNOT с общим управляющим первым кубитом. После этого за некоторое время ожидается появление некоторой ошибки (на рис. 2.6 эта область обозначена прямоугольником). Декодирование состояния производится сначала с помощью опять двух вентилях CNOT и затем производится исправление ошибки с помощью вентиля Тоффоли (CCNOT).

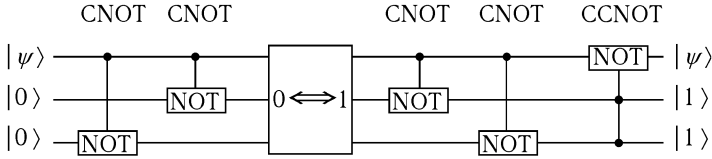


Рис. 2.6. Квантовая схема исправляющего квантовые ошибки кода с двумя вспомогательными кубитами. В схеме ошибки вносятся в области центрального прямоугольника.

Механизм действия этого кода рассмотрим на простом примере. Если никакой ошибки нет, то первый кубит $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ сохраняется полностью. Если же первый кубит после кодирования получает амплитудную ошибку, то есть происходит переход $0 \Leftrightarrow 1$, то после декодирования до действия вентиля Тоффולי состояние трех кубитов будет иметь вид $(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) \otimes |11\rangle$ (напомним, что действие вентиля CNOT сводится к инверсии состояний управляемого кубита только когда управляющий кубит имеет состояние $|1\rangle$). Ошибка в состоянии первого кубита приводит к изменению состояния вспомогательных второго и третьего кубитов. В рассматриваемом случае это состояния кубитов $|1\rangle \otimes |1\rangle = |11\rangle$, которые являются управляющими в вентиле Тоффולי (рис. 2.6) и, следовательно, в результате действия вентиля Тоффולי для первого кубита получим полностью исправленное состояние $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$.

Таким образом, мы видим, что отдельная амплитудная ошибка может быть исправлена, если использовать дополнительную информацию о влиянии окружения, запаасаемую во вспомогательных кубитах, при этом знать саму информацию не требуется. Заметим, что процесс исправления ошибок является *необратимым*, так как состояния вспомогательных кубитов не возвращаются к исходному $|00\rangle$. Соответствующая рассеиваемая энергия будет передана от квантовой системы к окружению.

Помимо амплитудных ошибок существенную роль играют *фазовые* ошибки, для исправления которых может быть предложена схема [2.45], в которой дополнительно в правой части схемы рис. 2.6 после вентиля CNOT и в левой части до вентиля CNOT для каждого кубита используются еще преобразования Адамара, благодаря которым фазовая ошибка преобразуется в амплитудную.

Шор и Стин (см. обзор [2.37]) предложили исправляющие коды, основанные на использовании кодов с более чем тремя кубитами, удовлетворяющие, в отличие от только что рассмотренного простого примера, всем перечисленным выше требованиям, в которых также используются распараллеливание сигнальной информации по блокам-кластерам основных и вспомогательных кубитов.

В работе [2.43] было показано, что существует такой *порог точности* работы компьютера, что при вероятности ошибок на один кубит меньше некоторого критического значения квантовые вычисления могут выполняться как угодно долго с пренебрежимо малой вероятностью ошибок. В частности, как показывают оценки, квантовый компьютер, способный размещать $\sim 10^6$ кубитов, может надежно работать, если вероятность ошибок на один кубит не превышает порядка 10^{-6} [2.37].

2.3.2. Универсальные помехоустойчивые квантовые вычисления

Выше кратко были рассмотрены способы коррекции квантовых ошибок, основанные на кодировании *логических* кубитов в гильбертовом пространстве нескольких *физических* кубитов (двухуровневых квантовых элементов) и предполагается, что большинство ошибок относится к таким, которые возникают независимо в кластере из нескольких кубитов в течение ограниченного интервала времени. Такой метод кодирования называется *активным*. К активным методам относятся и различные варианты подавления декогерентизации, использующие многоимпульсные методы, которые мы рассмотрим ниже на примере квантовых компьютеров на ядерных спинах (см. гл. 4).

При другом весьма перспективном *пассивном* подходе логический кубит кодируется в гильбертовом подпространстве состояний с определенной симметрией, нечувствительной к основным для рассматриваемой системы источникам диссипации и декогерентизации, обеспечивая тем самым *универсальность* помехоустойчивого кодирования. При изложении принципа такого подхода, следуя [2.44–2.46], рассмотрим модель, в которой система S из L кубитов, взаимодействующих с бозонными возбуждениями окружения B , описывается гамильтонианом более общего, чем в спин-бозонной модели (1.80), вида:

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{H}_S \otimes \hat{\mathbf{1}}_B + \hat{\mathbf{1}}_S \otimes \hat{H}_B + \hat{\mathbf{H}}_{SB}, \quad (2.68)$$

где

$$\widehat{H}_S = \sum_{i=1}^L \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{1}{2} \varepsilon_\alpha \widehat{\sigma}_{\alpha i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \widehat{\sigma}_i^+ \widehat{\sigma}_j^-, \quad \widehat{\sigma}^\pm = (\widehat{\sigma}_x^\pm \widehat{\sigma}_y^\pm)/2 \quad (2.69)$$

оператор системы из L взаимодействующих между собой кубитов.

Гамильтониан окружения, как и в (1.80), запишем в виде

$$\widehat{H}_B = \sum_k \hbar \omega_k \widehat{b}_k^+ \widehat{b}_k, \quad (2.70)$$

а гамильтониан взаимодействия кубитов с окружением — в виде

$$\widehat{H}_{SB} = \sum_{\alpha=x,y,z} \widehat{F}_\alpha \otimes \widehat{B}_\alpha, \quad (2.71)$$

где

$$\widehat{F}_\alpha = \hbar \widehat{S}_\alpha = (1/2) \sum_{i=1}^L \hbar \widehat{\sigma}_{\alpha i} \quad (2.72)$$

— «генераторы ошибок», обусловленные взаимодействием кубитов и окружения, операторы

$$\widehat{B}_\alpha = \sum_k \widehat{B}_{\alpha k}$$

определяются бозонными модами:

$$\begin{aligned} \widehat{B}_{zk} &= g_{zk} \widehat{b}_k^+ + g_{zk}^* \widehat{b}_k, \\ \widehat{B}_{xk} &= g_{xk} \widehat{b}_k^+ + g_{xk}^* \widehat{b}_k, \\ \widehat{B}_{yk} &= g_{yk} \widehat{b}_k^+ - g_{yk}^* \widehat{b}_k. \end{aligned} \quad (2.73)$$

При наличии этого взаимодействия происходит утечка закодированной информации из 2^L -мерного гильбертова пространстве \mathcal{H} в гильбертово пространство окружения, то есть происходит декогерентизация квантового состояния.

Рассмотрим подпространство $\widetilde{\mathbf{H}}_n$ размерностью 2^n для кластера из $n \leq L$ кубитов, принадлежащее гильбертовому пространству \mathbf{H} .

Пусть состояния $|\tilde{j}\rangle$, на которые натянуто подпространство $\widetilde{\mathcal{H}}_n$, имеют следующие свойства [2.45]:

а) Состояния $|\tilde{j}\rangle$ являются собственными для операторов \widehat{S}_α , появляющихся в операторе взаимодействия $\widehat{\mathbf{H}}_{SB}$ (2.71),

$$\widehat{S}_\alpha|\tilde{j}\rangle = c_\alpha|\tilde{j}\rangle, \quad (2.74)$$

где c_α — соответствующие комплексные собственные значения.

Преобразования, описывающие эволюцию матрицы плотности, определенную на этих состояниях, являются унитарными для всех возможных состояний окружения B .

б) Состояния систем S и B в начальный момент некоррелированы $\widehat{\rho}(0) = \widehat{\rho}_S(0) \otimes \widehat{\rho}_B(0)$.

в) Состояния, определяемые $\widehat{H}_S|\tilde{j}\rangle$, не смешиваются с состояниями другого подпространства, ортогонального $\widetilde{\mathcal{H}}_n$ и имеющего состояния i , то есть для всех \tilde{j} $\langle i|\widehat{H}_S|\tilde{j}\rangle = 0$.

Подпространство с такими свойствами было названо *свободным от декогерентизации подпространством* $\widetilde{\mathcal{H}}_n$ (decoherence-free subspace — DFS). Строгий анализ свойств DFS, однако, требует привлечения математического аппарата теории представлений групп. Его можно найти в работах [2.44, 2.46].

Остановимся здесь подробнее на важной модели *сильной коллективной декогерентизации*, когда все n кубитов в кластере взаимодействуют с одной и той же модой окружения \widehat{B}_α . Это взаимодействие описывается гамильтонианом \widehat{H}_{SB} в форме (2.71) [2.45]. Реально это может соответствовать, например, взаимодействию при достаточно низких температурах только с акустической ветвью длинноволновых бозонов.

По аналогии с одно- и двухкубитовыми логическими операциями над физическими кубитами, при универсальных вычислениях на состояниях DFS необходимы логические операции, которые производятся над логическими состояниями, закодированными в одном и двух кластерах. Для помехоустойчивости логической операции, выполняемой на состояниях DFS требуется, чтобы состояние системы оставалось в DFS в течение всего времени действия оператора.

Необходимым и достаточным условием для свободной от декогерентизации динамики в некотором подпространстве является принадлежность всех базисных состояний $|\tilde{j}\rangle$ к вырожденным собственным

состояниям всех генераторов ошибок \widehat{F}_α , то есть $\widehat{F}_\alpha|\tilde{j}\rangle = 0, \forall \alpha, \tilde{j}$. Это означает принадлежность их к *одномерным* неприводимым представлениям группы Паули P_L , относящейся к классу групп Ли $SU(2)$. Иначе говоря, это *синглетные* базисные состояния с $c_\alpha = 0$.

Наименьшее число физических кубитов n для кодирования двух логических состояний $|0\rangle_L$ и $|1\rangle_L$ в DFS равно *четырем*. Этими двумя состояниями являются состояния четырех кубитов с нулевым полным моментом:

$$\begin{aligned} |0\rangle_L &= (1/2)(|01\rangle - |10\rangle) \otimes (|01\rangle - |10\rangle) = \\ &= (1/2)(|0101\rangle + |1010\rangle - |1001\rangle - |0110\rangle), \end{aligned} \quad (2.75)$$

$$\begin{aligned} |1\rangle_L &= (1/3)^{1/2}(|11\rangle \otimes |00\rangle + |00\rangle \otimes |11\rangle - \\ &\quad - (1/2)(|01\rangle + |10\rangle) \otimes (|01\rangle + |10\rangle) = \\ &= (1/12)^{1/2}(2|1100\rangle + 2|0011\rangle - |0101\rangle - |1010\rangle - |0110\rangle - |1001\rangle), \end{aligned} \quad (2.76)$$

которые соответствуют состояниям, построенным на синглетных и триплетных состояниях пар физических кубитов.

Для таких состояний гильбертово пространство $\widetilde{\mathcal{H}}_n$ оказывается защищенным от всех ошибок, определяемых коллективными операциями поворота спинов кластера. Однако оно остается еще незащищенным от ошибок, связанных с возмущениями состояний отдельных физических кубитов, при необходимости исправления которых следует использовать активные методы QECC.

В случае, когда принцип работы квантового компьютера основан на использовании взаимодействия между кубитами, описываемого гамильтонианом гайзенберговского типа (ниже будут рассмотрены такие примеры)

$$\widehat{H}_H = (1/2) \sum_{i,j} J_{ij} \widehat{S}_i \widehat{S}_j, \quad (2.77)$$

который коммутирует с \widehat{F}_α , на DFS достигается естественная помехоустойчивость в наиболее сильной форме, поскольку система никогда не покидает DFS во время выполнения логических операций.

В работе [2.46] были детально рассмотрены также способы формирования помехоустойчивых одно- и двухкубитовых логических операций, способы приготовления помехоустойчивых состояний и их измерения. Там же были рассмотрены случаи коллективной декогерентизации

с более общим гамильтонианом взаимодействия и с произвольным числом кубитов, относящихся к DFS.

В литературе активно обсуждаются и другие динамические подходы к проблемам подавления декогерентизации (например, [2.47, 2.48]), основные принципы которых мы обсудим ниже при рассмотрении ЯМР квантовых компьютеров.

2.3.3. Помехоустойчивые квантовые вентили с телепортацией квантовых состояний

Для обеспечения помехоустойчивости квантовых вычислений возможен и другой подход, при котором создаются такие операции на логических кубитах, когда распространение ошибок среди физических кубитов было бы ограничено настолько, чтобы можно было использовать соответствующие корректирующие коды. Этого можно добиться путем построения специальных перекрестных (transversal) вентилях, которые осуществляли бы взаимодействие кубитов одного кодируемого кластера только с соответствующими кубитами в другом кластере.

Квантовая телепортация (см. разд. 2.2.3), используемая в качестве некоторой базисной составляющей в квантовой схеме, открывает заманчивые возможности для решения этой и ряда других экспериментальных проблем, возникающих при реализации квантовых компьютеров, она позволяет осуществлять целый ряд квантовых логических операций, невозможных при использовании прямых унитарных операций [2.11, 2.12]. Формирование помехоустойчивых квантовых логических вентилях сводится в этом случае к приготовлению соответствующего вспомогательного запутанного состояния в схеме однокубитовой телепортации.

С помощью использования однокубитовой телепортационной схемы возможно также осуществлять различные квантовые операции с участием *удаленных друг от друга* элементов. Формирование таких квантовых операций связано с созданием помехоустойчивых вентилях, выполняющих запрещающие (prohibit) квантовые операции внутри одного и того же кодируемого блока-кластера и квантовых вентилях, выполняющих запрещающие операции между удаленными (remote) частями системы.

Весьма интригующей представляется возможность создания такой архитектуры квантового компьютера, в которой некоторый ансамбль

вспомогательных запутанных базисных составляющих, используемых для универсальных квантовых вычислений и дополняющих обычные квантовые состояния, может рассматриваться как расходуемый коммерческий ресурс.

Схема квантового компьютера на оптических кубитах в квантовых электродинамических полостях (cavity quantum electrodynamics), в котором квантовое состояние *надежно* передается на макроскопические расстояния, как своего рода *квантовый Интернет*, рассматривалась в статье [2.49]. В ней, в частности, утверждается, что необходимое для телепортации запутывание квантовых состояний, может охватывать расстояния до сотен километров. При этом для этого не потребуются высококачественные квантовые нити. Связь между оптическими различными электродинамическими полостями может осуществляться по оптическим волоконным каналам.

Затронутые здесь вопросы находятся в самой начальной фазе своего развития и поэтому, к сожалению, не могут быть изложены здесь в достаточно полной мере.

Приложение П.2. Квантовое вейвлет-преобразование

П.2.1. Некоторые общие сведения

Недостатком фурье-преобразования является одинаковая величина модуля амплитуд базисных функций фурье-преобразования $\exp(2\pi i x k/N)$ при всех значениях x и широкий набор значений их фаз. В результате фурье-преобразование состояния, локализованного в конечной области на x -шкале, содержит набор фурье-амплитуд для всех значений k , то есть является нелокализованным на шкале k .

В качестве одного из альтернативных подходов для представления функций, локализованных в ограниченной области одновременно как на x -, так и на k -шкале, то есть на двухмерном массиве параметров $N \times N$, может быть рассмотрено так называемое *вейвлет-преобразование*¹ (wavelet transform) [2.50–2.52], которое в последнее время получило весьма широкое практическое применение в самых разных областях науки и техники [2.53].

¹ Дословный русский перевод термина wavelet — малая волна, волночка. Авторы статьи [2.52] предлагают для него термин «всплеск».

Для квадратично интегрируемой функции $f(x)$ непрерывной переменной, заданной на интервале $[0, N]$, то есть в линейном пространстве $L_2([0, N])$, амплитуды вейвлет-преобразования имеют вид:

$$w_n(m) = \int_0^N \psi_n(x, m) f(x) dx, \quad (\text{П.1})$$

где $\psi_n(x, m)$ — базисные функции — *вейвлеты*, заменяющие функции $\exp(2\pi i x k/N)$ в фурье-преобразовании и отображающие $f(x)$ в отличие от фурье-преобразования не на одномерный непрерывный массив параметров k , а на *двумерный массив* целых параметров n, m .

Функции $\psi_n(x, m)$, отличающиеся значениями параметров n и m , вообще говоря, не являются независимыми, и их совокупность образует *переполненную* систему. Поэтому вейвлет-представление сигнала содержит определенный произвол при выборе формы «*материнской*» функции $\psi(x) = \psi_n(x, m)$, которым и пользуются для устранения переполнения.

Вейвлет-преобразование становится обратимым при определенных ограничениях на вид материнской функции $\psi(x) \equiv \psi_0(x, 0)$. К таким ограничениям относятся условия [2.54]:

$$\int_0^N |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad \int_0^N x^\alpha \psi(x) dx = 0, \quad \alpha = 0, 1, \dots M. \quad (\text{П.2})$$

Ортонормированный набор базисных функций для вейвлет-преобразования строится из одной материнской нормированной функции $\psi(x)$.

Совокупность полученных при этом квадратично суммируемых «*дочерних*» базисных функций — вейвлетов представляется в следующем виде [2.54]:

$$\psi_n(x, m) = 2^{n/2} \psi(2^n x - m). \quad (\text{П.3})$$

При выполнении условий (П.2) они образуют *полную ортонормированную* систему, то есть

$$\int_0^N \psi_n(x, m) \psi_{n'}^*(x, m') dx = \delta_{nn'} \delta_{mm'}, \quad (\text{П.4})$$

и поэтому могут быть базисом для унитарного преобразования состояний.

Из выражения (П.3) следует, что роль пространственных частот k теперь играют параметры 2^n . С увеличением параметра n уменьшается масштаб или *увеличивается* разрешение функции $\psi_n(x, t)$ на шкале x по сравнению с разрешением дочерней функции $\psi(x)$ в 2^n раза и происходит на $2^{-n}t$ ее *сдвиг*. С каждым шагом итерации $n \Rightarrow n + 1$ в два раза, то есть на октаву, изменяется частота отсчетов (рис. П.2.1).

В результате двумерная область параметров разбивается на отдельные прямоугольные области, определяемые *диадными* (dyadic) интервалами $(2^{-n}t, 2^{-n}(t + 1))$, координаты этих областей определяются параметрами t, n (рис. П.2.1).

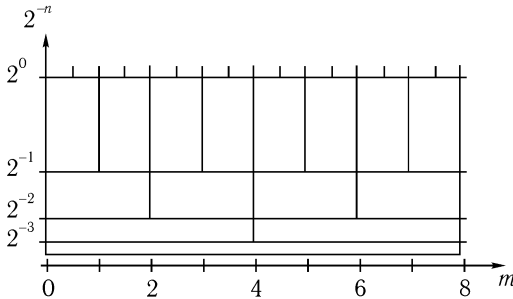


Рис. П.2.1. Разбиение $x - k$ плоскости при вейвлет-преобразовании для значений $0 \leq t < N = 2^3 = 8$, $-3 \leq n \leq 0$.

Существует много типов вейвлетов с различным характером локализации. Наиболее интересные из них удовлетворяют условию компактности (compact support), то есть они равны нулю вне некоторого конечного интервала длины. Алгоритм построения полной совокупности произвольных типов базисных вейвлетов был развит в *теории многоуровневого разрешения* (multiresolution analysis) [2.50, 2.51]. Приведем далее основные положения этой теории, опуская доказательства.

П.2.2. Построение ортонормированного вейвлет-базиса

Рассмотрим последовательность линейных подпространств V_n натянутых на совокупность вспомогательных квадратично интегрируе-

мых функций, соответствующих отдельным 2^n -м уровням разрешения [2.51, 2.54]. Базисом для подпространства V_n с масштабом, определяемым параметром n , является полная ортонормированная совокупность таких функций, задаваемых выражением

$$\varphi_n(x, m) = 2^{n/2} \varphi(2^n x - m) \quad (\text{П.5})$$

и условием ортонормированности

$$\int_0^N \varphi_n(x, m) \varphi_n(x, m') dx = \delta_{mm'}. \quad (\text{П.6})$$

Они называются *функциями масштабирования* (scaling functions). Далее будет удобно рассматривать функции $\varphi_n(x, m)$ как периодические на множестве целых чисел m , то есть в зависимости от $m \bmod N$.

В теории многоуровневого разрешения предполагается, что функциональное подпространство более низкого уровня разрешения V_n вложено в подпространство с более высоким уровнем: $V_n \subset V_{n+1}$. При этом каждая «отцовская» функция масштабирования $\varphi(x) \equiv \varphi_0(x, 0)$, определенная в V_0 , выражается через функцию $\varphi_1(x, m)$, определенную в подпространстве V_1 посредством линейного соотношения:

$$\varphi(x) = \sqrt{2} \sum_{m \bmod N} h(m) \varphi(2x - m), \quad (\text{П.7})$$

где вид импульсного отклика $h(m)$ зависит от вида функции $\varphi(x)$:

$$\sqrt{2} \int_0^1 \varphi(x) \varphi(2x - m) dx = h(m). \quad (\text{П.8})$$

Для дочерних функций масштабирования получим уравнения

$$\varphi_{n-1}(x, m) \equiv \varphi(2^{n-1} x - m) = \sum_{m' \bmod N} h(m' - 2m) \varphi_n(x, m'). \quad (\text{П.9})$$

В отличие от функций масштабирования вейвлеты являются ортогональными базисными функциями другого функционального подпространства W_n , которое представляет собой ортогональное дополнение к V_n в подпространстве V_{n+1} : $V_{n+1} = V_n \oplus W_n$. Поскольку

$W_n \subset V_{n+1}$, то материнский вейвлет $\psi(x)$ может быть выражен через функцию масштабирования $\varphi_1(x, m)$ [2.54, 2.55] с помощью выражения, аналогичного (П.7):

$$\psi(x) = \sum_{m \bmod N} g(m) \varphi(2x - m), \quad (\text{П.10})$$

где

$$g(m) = (-1)^m h(1 - m). \quad (\text{П.11})$$

И, соответственно, получим

$$\begin{aligned} \psi_{n-1}(x, m) &= \sum_{m' \bmod N} g(m' - 2m) \varphi_n(x, m') = \\ &= \sum_{m' \bmod N} (-1)^{m'} h(2m + 1 - m') \varphi_n(x, m'). \end{aligned} \quad (\text{П.12})$$

Пары импульсных откликов $h(m)$ и $g(m)$, называемых фильтрами Добеши (I. Daubechies), обладают свойствами:

$$\sum_{m \bmod N} h(m) h(m - 2k) = \delta_{k,0}, \quad (\text{П.13})$$

а также удовлетворяют условию

$$\sum_{m \bmod N} h(2m) = \sum_{m \bmod N} h(2m + 1) = \sqrt{1/2}. \quad (\text{П.14})$$

П.2.3. Дискретное вейвлет-преобразование

Для дискретизации функции $f(x)$ далее воспользуемся итерационным алгоритмом Добеши (I. Daubechies) и Меллата (S. Mallat) [2.54, 2.55], основанным на теории многоуровневого разрешения.

Производя преобразование масштабирования функции $f(x)$ с помощью функций $\varphi_n(x, m)$, получим ее дискретное представление как функцию дискретной переменной m для каждого заданного уровня разрешения (параметр n):

$$f_n(m) = \int_0^N \varphi_n(x, m) f(x) dx, \quad (\text{П.15})$$

а учитывая (П.9), найдем уравнение, связывающее амплитуды разного уровня разрешения $f_{n-1}(2m)$ и $f_n(m)$:

$$f_{n-1}(2m) = \int_0^N \varphi_{n-1}(x, m) f(x) dx = \sum_{m' \bmod N} h(m' - 2m) f_n(m'). \quad (\text{П.16})$$

Амплитуду $f_n(m)$ будем рассматривать теперь как амплитуду состояния m -го кубита для n -го разрешения в квантовом регистре из $L = \log_2 N$ кубитов.

Аналогичным образом, учитывая (П.12), найдем выражение для связи дискретных вейвлет-преобразований разного уровня разрешения

$$\begin{aligned} w_{n-1}(2m+1) &= \int_0^N \psi_{n-1}(x, m) f(x) dx = \sum_{m' \bmod N} g(m' - 2m) f_n(m') = \\ &= \sum_{m' \bmod N} (-1)^{m'} h(1 + 2m - m') f_n(m'). \end{aligned} \quad (\text{П.17})$$

В обозначениях здесь явно учтено, что, как следует из выражений (П.16) и (П.17), f_{n-1} является функцией $2m$, а w_{n-1} функцией $2m+1$.

Таким образом, в результате действия фильтров Добешьи $h(m)$ и $g(m)$ дискретные функции $f_n(m)$ на каждом шаге перехода к более низкому уровню разрешения расщепляются на две «зеркальные» функции $f_{n-1}(2m)$ и $w_{n-1}(2m+1)$. Линейное пространство квадратично суммируемых функций $l_2([0, N-1])$, в котором определены $f_n(m)$, расщепляется на два замкнутых подпространства с единым ортонормированным базисом с удвоенной размерностью $l_2([0, 2N-1])$.

Совокупность операций, осуществляемых парами фильтров, получило название банка *квадратурных зеркальных фильтров* (quadrature mirror filters — QMF). Число значений m , при которых $h(m) = 0$, называется *длиной фильтра* S .

Рассмотрим в качестве примера унитарное преобразование Добешьи (D^4) для случая, когда длина фильтров $S = N = 4$, $L = 2$, $m = 0, 1, 2, 3$. Введем для удобства обозначения: $f_n(m) = f_{n,m}$, $f_{n-1}(2m) = f_{n-1,2m}$ и $w_{n-1}(2m+1) = w_{n-1,2m+1}$. Для системы урав-

нений (П.16), (П.17) получим

$$f_{n-1,2m} = \sum_{m' \bmod 4} h(m' - 2m) f_{n,m'}, \quad (\text{П.18})$$

$$w_{n-1,2m+1} = \sum_{m' \bmod 4} (-1)^{m'} h(2m + 1 - m') f_{n,m'}. \quad (\text{П.19})$$

В матричной форме преобразование Добешьи имеет вид [2.56, 2.57]:

$$\begin{pmatrix} f_{n-1,0} \\ w_{n-1,1} \\ f_{n-1,2} \\ w_{n-1,3} \\ f_{n-1,4} \\ w_{n-1,5} \\ f_{n-1,6} \\ w_{n-1,7} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & -h_0 & h_3 & -h_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_1 & -h_0 & h_3 & -h_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_1 & -h_0 & h_3 & -h_2 \\ h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ h_3 & -h_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_1 & -h_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_{n,0} \\ f_{n,1} \\ f_{n,2} \\ f_{n,3} \\ f_{n,0} \\ f_{n,1} \\ f_{n,2} \\ f_{n,3} \end{pmatrix}, \quad (\text{П.20})$$

где матричные элементы $h(m) = h_m$ имеют четыре значения:

$$h_0 = \frac{1 - \sqrt{3}}{4\sqrt{2}}, \quad h_1 = \frac{1 + \sqrt{3}}{4\sqrt{2}}, \quad h_2 = \frac{3 + \sqrt{3}}{4\sqrt{2}}, \quad h_3 = \frac{3 - \sqrt{3}}{4\sqrt{2}}. \quad (\text{П.21})$$

Соответствующее квантовое преобразование может быть произведено с помощью *двух* однокубитовых операторов поворота $\widehat{Y}(\vartheta)$ (см. далее гл. 4) вокруг оси y на угол ϑ и двухкубитовой операции \widehat{S}_2 , определяющей циклическую перестановку состояний в квантовом регистре из двух кубитов $|x_0, x_1, x_2, x_3\rangle \Rightarrow |x_3, x_0, x_1, x_2\rangle$, которая осуществляется с помощью однокубитовой операции NOT, двухкубитовой операции CNOT и одной трехкубитовой операции Тоффоли [2.30, 2.56]: Полное число элементарных операций, если учесть, что операция Тоффоли может быть выполнена посредством пяти двухкубитовых операций [2.1], равно *девяти*:

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\widehat{S}_2} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} = (\widehat{I}_4 \otimes \widehat{Y}(7\pi/6) \cdot \widehat{S}_2 \cdot (\widehat{I}_4 \otimes \widehat{Y}(5\pi/3)))|_{\leftarrow}. \quad (\text{П.22})$$

П.2.4. Вейвлет-преобразование Хаара

Простейшим преобразованием является преобразование Хаара (А. Наар), недостатком которого является то, что хотя его базисные функции удовлетворяют условию компактности, но не удовлетворяет условию плавности и потому недостаточно хорошо локализованы на шкале k . Однако это преобразование полезно в том отношении, что оно позволяет наглядно продемонстрировать особенности и преимущества вейвлет-преобразования, а также указать принципы построения соответствующих квантовых схем. Выберем отцовскую функцию масштабирования в виде $\varphi(x) = 1$ в интервале $[0, 1)$ и равной нулю в остальной области, тогда дочерняя функция масштабирования будет отлична от нуля, если

$$0 \leq m2^{-n} \leq x \leq (m+1)2^{-n} \leq N-1, \quad (\text{П.23})$$

откуда следует, что параметры m и n лежат в конечных интервалах:

$$0 \leq m \leq (N-1)2^n \leq N-1, \quad -L \leq n \leq 0. \quad (\text{П.24})$$

Из (П.8) получим

$$h(m) = \sqrt{1/2}(\delta_{m,0} + \delta_{m,1}), \quad (\text{П.25})$$

то есть длина фильтров Хаара $S = 2$. Пользуясь далее (П.15), найдем

$$f_n(m) = 2^{n/2} \int_{m2^{-n}}^{(m+1)2^{-n}} f(x) dx = \sqrt{1/2}(f_{n+1}(2m) + f_{n+1}(2m+1)), \quad (\text{П.26})$$

где

$$f_{n+1}(2m) = 2^{(n+1)/2} \int_{2m2^{-(n+1)}}^{(2m+1)2^{-(n+1)}} f(x) dx, \quad (\text{П.27})$$

$$f_{n+1}(2m+1) = 2^{(n+1)/2} \int_{(2m+1)2^{-(n+1)}}^{(2m+2)2^{-(n+1)}} f(x) dx.$$

С помощью (П.12) для вейвлет-преобразование Хаара получим

$$w_n(m) = \sqrt{1/2}(f_{n+1}(2m) - f_{n+1}(2m+1)). \quad (\text{П.28})$$

Соответственно, дочерняя вейвлет-функция $\psi_n(x, m)$ принимает вид

$$\psi_n(x, m) = \begin{cases} -2^{n/2} & m2^{-n} \leq x < (m+1/2)2^{-n}, \\ -2^{n/2} & (m+1/2)2^{-n} \leq x < (m+1)2^{-n}, \end{cases} \quad (\text{П.29})$$

что соответствует материнской функции $\psi(x)$, являющейся давно известной функцией Хаара (А. Наар) [2.58], которая соответствует $M = 0$ и отлична от нуля для $x = [0, 1)$:

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x < 1/2, \\ -1 & 1/2 \leq x < 1. \end{cases} \quad (\text{П.30})$$

Из (П.28) мы видим, что при вейвлет-преобразовании Хаара происходит дискретизация преобразуемой непрерывной функции и расщепление на две части, относящиеся к подпространству более высокого уровня решения V_{n+1} .

Квантовое однокубитовое ($L = 1$, $N = 2$, $m = 0, 1$, $n = 0, -1$) вейвлет-преобразование Хаара QWTH_1 осуществляется с помощью *одного* оператора Адамара \hat{H} , преобразующего исходные состояния кубита с амплитудами $f_1(m)$

$$|\psi\rangle = f_0(0)|0\rangle + f_0(1)|1\rangle = \begin{pmatrix} f_0(0) \\ f_0(1) \end{pmatrix} \quad (\text{П.31})$$

к состоянию, в котором два состояния кубита имеют амплитуды $f_{-1}(0)$ и $w_{-1}(0)$:

$$\begin{aligned} \text{QWTH}_1 \cdot |\psi\rangle &= \hat{H}|\psi\rangle = \hat{H} \begin{pmatrix} f_0(0) \\ f_0(1) \end{pmatrix} = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} f_0(0) + f_0(1) \\ f_0(0) - f_0(1) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} f_{-1}(0) \\ w_{-1}(0) \end{pmatrix} = f_{-1}(0)|0\rangle + w_{-1}(0)|1\rangle. \end{aligned} \quad (\text{П.32})$$

Для двухкубитового преобразования ($L = 2$, $m \bmod 4 = 0, 1, 2, 3$, $n = 0, -1, -2$) потребуется более сложная квантовая схема. Двухкубитовые состояния $|0_A 0_B\rangle$, $|0_A 1_B\rangle$, $|1_A 0_B\rangle$ и $|1_A 1_B\rangle$ будем использовать

в качестве базисных. Квантовая схема и матрица преобразования принимают вид [2.56]:

$$\begin{aligned}
 \text{QWTH}_2 = & \begin{array}{c} A \text{ ————— } \boxed{H} \text{ ————— } \\ | \\ B \text{ — } \boxed{H} \text{ — } \boxed{\text{NOT}} \text{ — } \bullet \text{ — } \boxed{\text{NOT}} \text{ — } \end{array} = \\
 & = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (П.33)
 \end{aligned}$$

где

$$\text{CH} = \begin{array}{c} \text{— } \boxed{H} \text{ —} \\ | \\ \text{— } \bullet \text{ —} \end{array} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1/2} & 0 & \sqrt{1/2} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1/2} & 0 & -\sqrt{1/2} \end{pmatrix} \quad (П.34)$$

— контролируемый оператор Адамара. Последовательность операций в квантовой схеме производится как обычно слева направо, а результирующая матрица умножается на преобразуемые состояния слева. Двухкубитовая операция Хаара осуществляется тремя однокубитовыми операциями и одной двухкубитовой операцией, то есть всего *четырьмя* элементарными операциями.

Например, состояние

$$|\psi\rangle = f_n(0)|0_A0\rangle + f_n(1)|01\rangle + f_n(2)|10\rangle + f_n(3)|11\rangle \quad (П.35)$$

преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \text{QWTH}_2 \cdot |\psi\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_n(0) \\ f_n(1) \\ f_n(2) \\ f_n(3) \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} 1/2(f_n(0) + f_n(1) + f_n(2) + f_n(3)) \\ \sqrt{1/2}(f_n(0) - f_n(1)) \\ 1/2(f_n(0) + f_n(1) - f_n(2) - f_n(3)) \\ \sqrt{1/2}(f_n(2) - f_n(3)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{n-1}(0) \\ w_{n-1}(0) \\ f_{n-1}(1) \\ w_{n-1}(1) \end{pmatrix}, \quad (П.36)
 \end{aligned}$$

то есть для двухкубитового регистра при заданном уровне разрешения мы получаем две вейвлет-амплитуды

$$w_{n-1}(0) = \sqrt{1/2}(f_n(0) - f_n(1)), \quad w_{n-1}(1) = \sqrt{1/2}(f_n(2) - f_n(3)). \quad (\text{П.37})$$

Число элементарных квантовых операций, необходимых для реализации вейвлет-преобразования для всего диапазона уровней разрешения, определяется длиной используемых на операции расщепления фильтров S и числом кубитов L в квантовом регистре и оказывается порядка SL^2 [2.30], тогда как быстрое классическое вейвлет-преобразование потребовало бы порядка $L2^L$ операций [2.59]. Если S , как в случае преобразования Хаара, порядка единицы, то квантовые вейвлет-преобразования имеют ту же сложность, что и квантовые фурье-преобразования. Однако преимущество квантовых вейвлет-преобразований появляется в случае, когда достаточно ограничиться определенным диапазоном разрешения $|n| \ll L$, и потребуется всего $|n|SL$ операций [2.60].

П.2.5. Квантовое вейвлет-преобразование как альтернатива фурье-преобразованию в алгоритме факторизации Шора

Алгоритм факторизации Шора основан на нахождении периода r определенным образом сформированных амплитуд состояния квантового регистра. Для этих целей используется квантовое дискретное фурье-преобразование, которое для регистра из L кубитов строится из L операторов Адамара \hat{H} и $L(L-1)/2$ операторов контролируемого изменения фазы $\hat{B}_{j,k}$, то есть требует $L(L+1)/2$ элементарных операций (см. раздел 2.2.6).

Представим квазипериодическую дискретную функцию, характеризующуюся конечным числом равных по амплитуде отсчетов, отстоящих на расстояниях r друг от друга ($x = jr$), в виде:

$$f(x) = \sqrt{r/N} \cdot \delta_{x,jr}, \quad j = 0, 1, \dots [N/r - 1]. \quad (\text{П.38})$$

Амплитуда фурье-преобразования такой функции (2.55)

$$\tilde{f}(k) = (\sqrt{r}/N) \sum_{j=0}^{N/r-1} \exp\left(\frac{2\pi i j r k}{N}\right) \quad (\text{П.39})$$

имеет конечное число равновероятных дискретных отсчетов на одномерной шкале при $k = \nu N/r$, $\nu = 0, 1, \dots, r - 1$. Существенным недостатком дискретного фурье-преобразования, как уже отмечалось выше, является то, что при его выполнении имеют место значительные вычислительные затраты, особенно при учете амплитуд с большими значениями k , которые обычно по разным причинам не достаточно четко известны или имеют сильно отличающуюся временную цену, связанную с выполнением операций контролируемого изменения фазы. Если искомый период r значительно больше расстояния 2^{-L} между кубитами регистра, что соответствует сравнительно малым значениям параметра k , то вычислительные затраты, учитывающие при фурье-преобразовании в равной мере все амплитуды, оказываются излишне большими.

Найдем амплитуду вейвлет-преобразования Хаара периодической функции (П.40)

$$w_n(m) = \int_0^N \psi_n(x, m) f(x) dx = \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^{N/r-1} 2^{n/2} \psi(2^n jr - m), \quad (\text{П.40})$$

откуда следует, что для положений на шкале m , она отлична от нуля при значениях j , лежащих в интервале $2^{-n}m/r \leq j \leq 2^{-n}(m+1)/r$. Поскольку $-n > 0$, то для этого достаточно, чтобы $2^{-n}m$ было кратно периоду r . Каждой паре значений n и m будет соответствовать небольшая группа таких амплитуд вейвлет-преобразования, если $2^{-n}m/r = \nu$ равно небольшой группе целых чисел. Эта группа амплитуд не будет перекрываться с другой группой, если для нее при тех же значениях n , параметр m отличается в несколько раз. Во столько же будут отличаться и числа ν .

Поскольку вейвлет-амплитуды $w_n(m)$ уменьшаются с ростом отрицательных значений n , то следует ограничиться лишь их малыми отрицательными значениями, скажем, $n = 0, -1, -2$. Тогда положение наиболее интенсивных вейвлет-амплитуд будет соответствовать значениям $2^{-n}m = \nu r$. Используя набор произведений $2^{-n}m$, соответствующих различным вейвлет-амплитудам, найдем период функции r как их общий множитель.

Замечательным здесь является то, что при вейвлет-преобразованиях отсутствуют операции типа контролируемого фазового сдвига, ответственных за возрастание временной цены фурье-преобразования.

Кроме того, интенсивность вейвлетов экспоненциально увеличивается с увеличением разрешения по шкале x , что в результате проявляется в уменьшении разрешения по шкале k . При определении сравнительно большого периода функции r этого как раз достаточно. Основной вклад в сигнал дают лишь амплитуды с небольшими отрицательными значениями параметра n и в небольшом диапазоне параметров m .

Литература

- [2.1] *Barenco A., Bennett C.H., Cleve C., DiVincenzo D.P., Margolus N., Shor P., Sleater T., Smolin J.A., Weinfurter H.* Elementary Gates for Quantum Computation // *Phys. Rev.* 1995, v. A52, № 5, pp. 3457–3467.
- [2.2] *Gershenfeld N.A., Chuang I.L.* Bulk Spin-Resonance Quantum Computation // *Science*, 1997, v. 275, 17 Jan., pp. 350–356.
- [2.3] *Jones J.A., Hansen R.H., Mosca M.* Quantum Logic Gates and Nuclear Magnetic Resonance Pulse Sequences // 1998, LANL E-print quant-ph/9805070, 16 p.
- [2.4] *Loss D., DiVincenzo D.P.* Quantum Computation with Quantum Dots // *Phys. Rev.*, 1998, v. A57, № 1, pp. 120–126.
- [2.5] *Deutsch D.* Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer // *Proc. Roy. Soc., Lond.* 1985, v. A400, № 1818, pp. 97–117. / *Дойч Д.* Квантовая теория принципа Чёрча–Тьюринга и универсальный квантовый компьютер. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 157–189.
- [2.6] *Vedral V., Plenio M.B.* Basics of Quantum Computation // *Progr. Quant. Electr.* 1998, v. 22, № 1, pp. 1–40.
- [2.7] *Deutsch D., Jozsa R.* Rapid Solution of Problems by Quantum Computation. // *Proc. Roy. Soc., Lond.* 1992, v. A439, № 1907, pp. 553–558. / *Дойч Д., Джозса Р.* Быстрое решение задач с помощью квантовых вычислений. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 191–199.
- [2.8] *Cleve R., Ekert A., Macchiavello C., Mosca M.* Quantum Algorithms Revisited // *Proc. Roy. Soc. Lond.*, 1998, v. A454, pp. 339–354.
- [2.9] *Bouwmeester D., Pan J. W., Mattle K., Eibl M., Weinfurter H., Zeilinger A.* Experimenteal Quantum Teleportation // *Nature*, 1997, v. 390, № 6660, Dec., pp. 575–579.

-
- [2.10] *Plenio M.B., Vedral V.* Teleportation, Entanglement and Thermodynamics in the Quantum World // Contemporary Phys., 1998, v. 39, №6, p. 431–446.
- [2.11] *Gottesman D., Chuang I.L.* Quantum Teleportation is a Universal Computational Primitive // Nature, 1999, v. 402, pp. 390.
- [2.12] *Zhou X., Leung D.W., Chuang I.L.* Quantum Logic Gate Construction with One-Bit «Teleportation» // 2000, LANL E-print LANL arXiv: quant-ph/0002039, 11 p.
- [2.13] *Jonathan D., Plenio M.B.* Entanglement-Assisted local Manipulation of Pure Quantum States. // Phys. Rev. Lett., 1999, v. 83, pp. 3566–3570.
- [2.14] *Nielsen M.F.* Conditions for a Class of Entanglement Transformations // Phys. Rev. Lett., 1999, v. 83, №2, pp. 436–439.
- [2.15] *Jonathan D., Plenio M.B.* Minimal Conditions for Local Pure-State Entanglement Manipulation // Phys. Rev. Lett., 1999, v. 83, №7, pp. 1455–1458.
- [2.16] *Vidal G.* Entanglement of Pure States for a Single Copy // Phys. Rev. Lett., 1999, v. 83, №5, pp. 1046–1049.
- [2.17] *Schumacher B.* Quantum coding // Phys. Rev., 1995, v. A51, №4, pp. 2738–2747.
- [2.18] *Wootters W.K., Zurek W.H.* A Single Quantum Cannot Be Cloned // Nature, 1982, v. 299, №1982, pp. 802–803.
- [2.19] *Mor T.* No-Cloning of Orthogonal States in Composite Systems // 1998, LANL E-print LANL quant-ph/9802036, 4 p.
- [2.20] *Westmoreland M.D., Schumacher B.* Quantum Entanglement and the Nonexistence of Superluminal Signals // 1998, LANL E-print quant-ph/9801014, 7 p.
- [2.21] *Кадомцев Б. Б.* Динамика и информация. — М.: Изд. ред. УФН, 1999, 2 изд., 400 с.
- [2.22] *Ekert A., Jozsa R.* Quantum computation and Shor’s factoring algorithm // Rev. Mod. Phys., 1996, v. 68, №3, pp. 733–753.
- [2.23] *Cooley J.W., Tukey J.W.* An Algorithm for Machine Calculation and Complex Fourier Series // Math. Comput., 1965, v. 19(90), Apr., pp. 297–301.
- [2.24] *Saito A., Kioi K., Akagi Y., Hashizume N., Ohta K.* Actual Computational Time-Cost of the Quantum Fourier Transform in a Quantum Computer Using Nuclear Spins // 2000, LANL, E-print arXiv: quant-ph/0001113, p. 4.

- [2.25] *Barenco A., Ekert A., Suominen K. – A., Törmä P.* Approximate Quantum Fourier Transform and Decoherence // *Phys. Rev.*, 1996, v. A54, pp. 139.
- [2.26] *Shor P.* Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer // *SIAM Jour. Comp.*, 1997, v. 26, № 5, pp. 1484–1509. / *Шор П.* Полиномиальные по времени алгоритмы разложения числа на простые множители и нахождения дискретного логарифма для квантового компьютера. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 200–247.
- [2.27] *Bennett C. H.* Quantum Information and Computation // *Phys. Today*, 1995, v. 47, № 10, pp. 24–30.
- [2.28] *Lenstra A. K., Lenstra H. W.* The Development of the Number Field Sieve // *Lecture Notes in Mathematics*. — Berlin: Springer-Verlag, 1993, v. 1554.
- [2.29] *Gea-Banacloche J.* Qubit-Qubit Interaction in Quantum Computers // *Phys. Rev.*, 1998, v. A57, № 1, pp. R1–R4.
- [2.30] *Klappenecker A.* Wavelets and Wavelet Packets on Quantum Computers // 1999, LANL, E-print quant-ph/9909014, p. 11.
- [2.31] *Kitaev A.* Quantum Measurements and the Abelian Stabiliser Problem // 1995, LANL, E-print quant-ph/951102.
- [2.32] *Preskill J.* Lecture Notes for Physics 229: Quantum Information and Computation // 1998, <http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph229>.
- [2.33] *Grover L. K.* Quantum Mechanics Help in Searching for a Needle in a Haystack / *Phys. Rev. Lett.* 1997, v. 78, № 2, pp. 325–328. / *Гровер Л. К.* Квантовая механика помогает найти иголку в стоге сена. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» I. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 101–109.
- [2.34] *Ожигов Ю. И.* Квантовый компьютер и его возможности. — М.: МГТУ «Станкин», 1999, 57 с.
- [2.35] *Ожигов Ю. И.* Время и память квантовых и недетерминистических вычислений. Докт. диссертация. Москва, МГУ, 1999.
- [2.36] *Ozhigov Y.* Speedup of Iterated Quantum Search by Parallel Performance // 1999, LANL, E-print quant-ph/9904039, 20 p.
- [2.37] *Preskill J.* Reliable Quantum Computers // *Proc. Roy. Soc. Lond.*, 1998, v. A454, № 1969, pp. 385–410.
- [2.38] *Shor P.* Scheme for Reducing Decoherence in Quantum Memory // *Phys. Rev.*, 1995, v. A52, № 4, pp. R2493–R2496.

- [2.39] *Steane A. M.* Error Correction Codes in Quantum Theory // Phys. Rev. Lett., 1996, v. 77, № 5, pp. 793–797.
- [2.40] *Shor P.* Fault-Tolerant Quantum Computation // 1996, LANL, E-print quant-ph/9605011, 11 p.
- [2.41] *Кумаев А. Ю.* Квантовые вычисления: алгоритмы и исправление ошибок // УМН, 1996, т. 52, вып. 6(318), с. 54–111.
- [2.42] *Kitaev A.* Fault-Tolerant Quantum Computation by Anyone // 1997, LANL, E-print quant-ph/9707021, 27 p.
- [2.43] *Knill E., Laflamme R., Zurek W.* Resilient Quantum Computation: Error Models and Thresholds // Science, 1998, v. 279, pp. 342–345.
- [2.44] *Lidar D. A., Bacon D., Kempe J., Whaley K. B.* Universal Fault-Tolerant Quantum Computation on a Class of Decoherence-Free Subspaces without Spatial Symmetry // 1999, LANL, E-print quant-ph/9908064, 20 p.
- [2.45] *Bacon D., Kempe J., Lidar D. A., Whaley K. B.* Universal Fault-Tolerant Quantum Computation on Decoherence-Free Subspaces // 1999, LANL, E-print quant-ph/9909058, 5 p.
- [2.46] *Kempe J., Bacon D., Lidar D. A., Whaley K. B.* Theory of Decoherence-Free Fault-Tolerant Universal Quantum Computation // 2000, LANL, E-print arXiv: quant-ph/0004064, 40 p.
- [2.47] *Viola L., Lloyd S.* Dynamical Suppression of Decoherence in Two-State Quantum Systems // 1998, LANL E-print quant-ph/9803057, 18 p.
- [2.48] *Viola L., Knill E., Lloyd S.* Dynamical Generation of Noiseless Quantum Subsystems // 2000, LANL, E-print arXiv: quant-ph/0002072, 4 p.
- [2.49] *Lloyd S., Shahriar V. S., Hemmer P. R.* Teleportation and the Quantum Internet // 2000, LANL, E-print arXiv: quant-ph/0003147, 11 p.
- [2.50] *Daubechies I.* Ten Lectures on Wavelets. — Philadelphia: SIAM, 1992. / *Добичи И.* Десять лекций по вейвлетам. Перевод с англ.: — Ижевск: НИЦ «РХД», 2000.
- [2.51] *Meyer Y.* Wavelets and Operators. — Cambridge: Univ. Press, 1992, 224 p.
- [2.52] *Новиков И. Я., Стечкин С. Б.* Основы теории «всплесков» // УМН, 1998, т. 53, № 6(324), с. 53–128.
- [2.53] The Special Issue on Wavelets / Ed. by J. Kovačević, I. Daubechies // Proc. IEEE. 1996. v. 84. № 4. 688 p.
- [2.54] *Daubechies I.* Orthonormal Bases of Compactly Supported Wevelets // Commun. Pure Appl. Math. 1988, v. 41, № 7, pp. 909–996.
- [2.55] *Cohen A., Kovačević.* Wavelets: The mathematical background // Proc. IEEE. 1996. v. 84. № 4. pp. 514–522.

- [2.56] *Klappenecker A., Beth T., Grassl M.* Wavelettransformation auf Quantenrechnern // Magdeburg: Logisch-GmbH, 1998, Information und Information — und Mirrosystemtechnir, 25-27 März. pp. 145–152.
- [2.57] *Høyer P.* Efficient Quantum Transform // 1997, LANL, E-print arXiv: quant-ph/9702028, 30 p.
- [2.58] *Haar A.* Zur Theorie der Orthogonalen Funktionensysteme // *Mathemat. Annal.* 1910, v. 69, pp. 331–371.
- [2.59] *Beylkin G., Coifman R., Rokhlin V.* Fast Wavelet Transforms and Numerical Algorithms I // *Commun. Pure Appl. Math.* 1991, v. 44, № 2, pp. 141–183.
- [2.60] *Fjany A., Williams C.P.* Quantum Wawelet Transforms: Fast Algorithms and Complete Circuits // 1998, LANL, E-print arxiv: quant-ph/9809004, 22 p.

ГЛАВА 3

КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТЕР НА ИОНАХ В ЛОВУШКАХ

«Глядя на мир, нельзя не удивляться!»

Козьма Прутков

3.1. Основные требования, выполнение которых необходимо для реализации любого полномасштабного квантового компьютера

В процессе интенсивных поисков возможностей реализации идеи квантовых вычислений был предложен целый ряд самых разнообразных физических систем в качестве кандидатов на роль кубитов. Рассматривались ионы в электромагнитных ловушках, ядерные спины в магнитном поле, квантовые точки с электронными орбитальными и спиновыми состояниями, оптические фотоны в электромагнитных полостях, сверхпроводниковые структуры с переходами Джозефсона и некоторые другие системы.

Независимо от выбранного варианта физических систем, предназначенных для создания полномасштабного квантового компьютера, превосходящего по своим возможностям любой классический компьютер, во всех случаях должны быть выполнены следующие *пять основных требований* [3.1]:

- 1) Для физической реализации квантового компьютера требуется выделение и фиксирование в пространстве двухуровневых частиц-кубитов, на которые можно было бы в ходе вычислений избирательно воздействовать поодиночке или попарно и таким образом организовать их квантовую эволюцию, соответствующую выполняемому алго-

ритму. Физическая система, представляющая полномасштабный квантовый компьютер, должна содержать достаточно большое число таких контролируемых *кубитов*, а именно $L > 10^3$.

2) Необходимо обеспечить возможность приготовления L кубитов входного регистра в исходном основном базисном состоянии $|0_1, 0_2, 0_3, \dots, 0_L\rangle$, то есть возможность *процесса инициализации*.

3) Необходимо обеспечить помехоустойчивость вычислительных процессов и максимальное *подавление эффектов декогерентизации* квантовых состояний, обусловленных взаимодействием системы кубитов с окружающей средой. Для выполнения этого требования время декогерентизации должно по крайней мере в 10^4 раз превышать время выполнения основных квантовых операций (время такта). Ошибка при выполнении отдельной квантовой операции должна быть менее 10^{-4} , что считается приемлемым для работы многокубитового компьютера с использованием соответствующих корректирующих кодов.

4) Поскольку любая унитарная квантовая операция может быть выполнена с помощью определенной совокупности только *однокубитовых* и *двухкубитовых* операций, то при выборе физической системы существенно, чтобы между управляемыми кубитами имели место определенные нелинейные взаимодействия, обеспечивающие выполнение двухкубитовых операций. Управляющие операциями импульсы должны контролироваться с точностью не хуже, чем 10^{-4} .

5) Необходимо обеспечить с достаточно высокой надежностью *измерение* состояния квантовой системы на выходе. Проблема изменения конечного квантового состояния является одной из основных проблем в любых вариантах квантовых компьютеров.

Дальнейшее изложение мы начнем с рассмотрения тех вариантов квантовых компьютеров, которые были не только предложены, но в реализации которых были достигнуты определенные успехи. К ним относятся прежде всего квантовые компьютеры, в которых в качестве кубитов используются ионы в ловушках, а также ядерные спины в молекулах органических жидкостей. Для них будут проанализированы выявленные преимущества и недостатки и проведена оценка перспектив с точки зрения выполнения всех пяти перечисленных требований. Далее, в последующих главах будут описаны другие предложенные и пока нереализованные твердотельные и некоторые другие варианты квантовых компьютеров и также обсуждены их потенциальные преимущества и возможности.

3.2. Ловушки для ионов и нейтральных атомов

Одним из наиболее прямых способов, позволяющих выполнить второе и третье требования, является замораживание теплового движения частиц, представляющих кубиты, и изоляция их от макроскопического окружения. Реализацией такой идеи является «подвешивание» частиц-кубитов в свободном пространстве (сверхвысоком вакууме) и удержание их в фиксированных точках внешними силами. В современной физике разработаны средства для такого удержания как заряженных, так и нейтральных частиц. К этим средствам следует отнести так называемые *силовые ловушки* для ионов или атомов и лазерные методы их охлаждения. Последние имеют своей целью воспрепятствование «убеганию» их из ловушки и переходу в возбужденные состояния.

Идея использования в качестве физической системы для реализации квантового компьютера совокупности ионов в ловушке в условиях лазерного охлаждения была высказана в 1995 году австрийскими физиками И. Цираком (J. I. Cirac) и П. Цоллером (P. Zoller) [3.2]. А первые эксперименты были выполнены уже в том же году группой американских физиков [3.3].

Научной основой создания ловушек для заряженных частиц служит ионная оптика, развивавшаяся в связи с разработкой ускорителей заряженных частиц, масс-спектрометров, ионно-лучевых и электронно-лучевых технологических систем и микроскопов, систем для удержания плазмы. В случае квантовых компьютеров разработанные методы нашли применение для того, чтобы фиксировать в определенных точках пространства частицы, по возможности лишенные кинетической энергии, то есть охлажденные до температур, близких к абсолютному нулю.

Поэтому прежде чем описывать достижения в области квантовых компьютеров на ионах в ловушках, начнем эту главу с изложения интересной самой по себе физики электромагнитных ловушек и способов охлаждения захваченных ими ионов и атомов.

3.2.1. Электромагнитная ловушка Пеннинга

В ловушке Пеннинга (F. Penning) силы удержания заряженной частицы обусловлены постоянным магнитным полем $B_0 \parallel 0_z$ и слабым электрическим квадрупольным полем с потенциалом $\Phi(x, y, z) = A(r^2 - 3z^2)$, $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$. Продольное магнитное поле создается током в солено-

иде. Сила Лоренца в этом поле $F = q[V \times B_0]$ принуждает заряженную частицу с зарядом q и массой m вращаться по круговой орбите с угловой частотой qB_0/m в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, то есть стремится удержать ее вблизи оси z . Электростатическое же поле создает возвращающую силу $F_z = -6Az$, тем большую, чем больше удалится частица от начала координат $z = 0$. Глубина потенциальной ямы определяется расстоянием Z_0 до электрода на оси z : $qU_0 = q(\Phi(0, 0, 0) - \Phi(0, 0, Z_0)) = 2qAZ_0^2$ и составляет несколько эВ.

Ловушка Пеннинга была впервые использована для длительного удержания одного единственного электрона и прецизионных экспериментов по квантовой эволюции электрона в ловушке с целью определения его констант [3.4]. Электрон в ловушке Пеннинга получил название атома геония (geonium), которое отражало тот факт, что аппаратура ловушки располагается на Земле [3.5]. Позитрон, удерживающийся в ловушке Пеннинга в течение нескольких месяцев, получил собственное имя Прискилла (Priscilla) [3.4].

Электрон в ловушке образует волновой пакет размером порядка 1 мкм вдоль оси z и 30 нм в диаметре. Охлаждение электрона происходит путем передачи его энергии радиочастотному полю. Приведем для ориентировки значения характерных частот для электронов в ловушке Пеннинга: частота циклотронного движения электрона в поле $B_0 = 5$ Тл $\nu_c = eB_0/2\pi m_e = 141$ ГГц, частота прецессии спина электрона $\nu_s \cong \nu_c$, частота колебаний электрона вдоль оси z при $U_0 = 4,5$ В и $Z_0 = 0,4$ см, $\omega_z/2\pi = qU_0/2\pi m_e Z_0^2 = 64$ МГц, магнетронная частота $\nu_m = 14,5$ кГц [3.4].

3.2.2. Ловушка Пауля

В качестве ловушек для квантовых компьютеров на ионах используются так называемые ловушки Пауля (W. Paul) [3.6], удержание иона в которых обеспечивается только электрическими силами.

Рассмотрим параболический электростатический потенциал следующего вида

$$\Phi(x_1 y_1 z) = \frac{\Phi_0}{2r_0^2} (\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2), \quad (3.1)$$

где Φ_0 , α , β , γ , r_0 — некоторые постоянные коэффициенты. Поскольку потенциал должен удовлетворять уравнению Лапласа $\Delta\Phi = 0$, то между

коэффициентами в (3.1) имеет место соотношение $\alpha + \beta + \gamma = 0$, которое можно удовлетворить двумя простыми способами:

$$а) \alpha = -\gamma = 1, \quad \beta = 0 : \quad \Phi(x, y) = \frac{\Phi_0}{2r_0^2}(x^2 - z^2), \quad (3.2)$$

$$б) \alpha = \beta = 1, \quad \gamma = -2 : \quad \Phi(x, y, z) = \frac{\Phi_0}{2r_0^2}(r^2 - 2z^2). \quad (3.3)$$

При этом в обоих случаях одна из компонент силы оказывается дефокусирующей, то есть, в частности, $F_z = -\frac{\partial \Phi}{\partial z} > 0$ при $z > 0$. Поэтому устойчивая статическая конфигурация зарядов в электростатическом поле является неустойчивой, как и утверждает известная теорема Ирншоу (S. Earnshaw) [3.7].

Для создания устойчивой конфигурации в ловушке Пауля используется комбинация статического и переменного электрических полей. Наличие переменной высокочастотной компоненты поля обеспечивает динамическую стабилизацию конфигурации ионов в полях двумерной и трехмерной квадрупольной симметрии [3.6]. Первоначальной целью создания этих ловушек было удержание одного иона, используемого для прецизионных спектрометрических измерений в атомных стандартах частоты и времени. В дальнейшем были разработаны линейные ловушки, способные удерживать систему ионов в форме *одномерного ионного кристалла* [3.8]. Эти ловушки устроены таким образом, что устойчивая конфигурация линейной цепочки ионов обеспечивается сложением трех типов сил:

1) кулоновского отталкивания одноименно заряженных ионов друг от друга;

2) статического электрического поля, создаваемого двумя электродами, которое сжимает цепочку ионов вдоль оси z , так что расстояния на оси z между ионами в результате определяются из условия равновесия кулоновских сил отталкивания и сжимающих сил поля. Схема расположения электродов в линейной ловушке Пауля приведена на рис. 3.1;

3) радиальных (в плоскости Oxy) сил, возникающих в результате воздействия переменного электрического поля квадрупольной симметрии, создаваемого приложенным к двум расположенным по диагонали параллельно оси z металлическим электродам высокочастотным напряжением при заземленных двух других диагонально расположенных электродах.

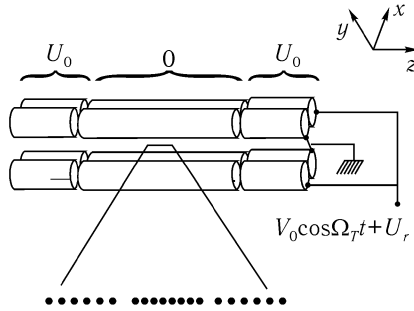


Рис. 3.1. Схематическое изображение системы электродов в линейной ловушке Пауля [3.9].

Конечные сегменты каждого цилиндрического электрода соединены емкостными связями (на рисунке не показано), в результате чего высокочастотное напряжение оказывается приложенным ко всему электроду в целом, тогда как постоянное напряжение только к конечным сегментам. Диаметр цилиндрических электродов и расстояние между электродами составляют ~ 1 мм, а расстояние между сегментами $2Z_0 \sim 10$ мм.

Потенциал U_0 , приложенный к конечным сегментам цилиндрических электродов при $z = \pm Z_0$, создает в области пространства в центре симметрии поле [3.9]

$$\Phi_s = \frac{kU_0}{Z_0^2} \left[z^2 - (x^2 + y^2)/2 \right] \equiv \frac{M}{2q} \omega_z^2 \left(z^2 - (x^2 + y^2)/2 \right), \quad (3.4)$$

где $\omega_z = \left(2kqU_0/Z_0^2 M \right)^{1/2}$ — круговая частота колебаний иона с массой M и зарядом q вдоль оси z центра масс цепочки ионов в поле Φ_s , геометрический фактор $k \cong 1$ зависит от геометрии ловушки.

Потенциал поля квадрупольной симметрии, обеспечивающий радиальное сжатие одномерного кристалла, имеет вид

$$\Phi_r = \frac{\left(V_0 \cos \Omega_T t + U_r \right)}{2} \left(1 + \frac{x^2 - y^2}{R^2} \right), \quad (3.5)$$

где R — расстояние от оси z до поверхности электрода, U_r — постоянный потенциал.

В центре симметрии поля, создаваемого электродами, имеет место минимум потенциальной энергии для положительно заряженных ионов; здесь и образуется линейный (одномерный) ионный кристалл. В нижней части рис. 3.1 приведено увеличенное изображение кристалла; полученного путем детектирования резонансно рассеянных фотонов. Два пропускания в кристалле содержат ионы другого изотопа, имеющие другую резонансную частоту (или ионы другого элемента). Видно, как изменяются расстояния между ионами: они минимальны в центре и возрастают к «поверхности» (краю) кристалла.

Поскольку ионы сильно охлаждены, амплитуды колебаний близки к амплитудам нулевых колебаний, так что выражения (3.4) и (3.5) достаточно точно описывают поля, создаваемые электродами в области расположения ионов.

Движение ионов в плоскости $Oxy \perp Oz$ под действием электрических потенциалов Φ_s и Φ_r описывается уравнениями

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x}{d\zeta^2} + [a_x + 2q_x \cos(2\zeta)] x &= 0, \\ \frac{d^2 y}{d\zeta^2} + [a_y + 2q_y \cos(2\zeta)] y &= 0, \end{aligned} \quad (3.6)$$

где

$$\begin{aligned} a_x &= \left(4q/M\Omega_T^2\right) \left(\frac{U_r}{R^2} - \frac{kU_0}{Z_0^2}\right), \quad a_y = -\left(4q/M\Omega_T^2\right) \left(\frac{U_r}{R^2} + \frac{kU_0}{Z_0^2}\right), \\ q_x &= -q_y = \frac{2qV_0}{\Omega_T^2 MR^2}; \quad \zeta = \Omega_T t/2. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Уравнения типа (3.6) носят название *уравнений Матье*, свойства которых хорошо изучены [3.10]. Поскольку в условиях эксперимента $a_i < q_i^2 \ll 1$, то приближенное решение уравнений [3.6] с точностью до членов порядка a_i и q_i^2 имеет вид ($i = x, y$):

$$\begin{aligned} u_i(t) &= A_i \left(\cos(\omega_i t + \varphi_i) \left[1 + \frac{q_i}{2} \cos(\Omega_T t) + \frac{q_i^2}{32} \cos(2\Omega_T t) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \beta_i \frac{q_i}{2} \sin(\omega_i t + \varphi_i) \sin(\Omega_T t) \right), \end{aligned} \quad (3.8)$$

где $u_x = x$, $u_y = y$, A_i определяется начальными условиями, а

$$\omega_i = \frac{\beta_i}{2} \Omega_T, \quad \beta_i = \left(a_i + q_i^2/2 \right)^{1/2}. \quad (3.9)$$

Из условий $a_i < q_i^2 \ll 1$ вытекает, что $\beta_i \ll 1$ и $\omega_i \ll \Omega_T$. Следовательно, колебания ионов в плоскости Oxy складываются из «секулярного» движения в форме низкочастотных колебаний ($\omega_x, \omega_y \ll \Omega_T$) с большой амплитудой ($A_i \gg A_i q_i$) и высокочастотной «ряби» ($\Omega_T, 2\Omega_T$) с малой амплитудой (микродвижение). Из (3.7) и (3.9) следует, что потенциал $U_r \neq 0$ обеспечивает снятие вырождения частот ω_x и ω_y . Если отвлечься от микродвижения (оно усредняется к нулю за время порядка периода $2\pi\omega_x^{-1}$ секулярного движения), то оказывается, что секулярное движение происходит как гармоническое колебание в радиальном направлении в гармоническом псевдопотенциале $\Phi_p(x, y)$ (3.9):

$$q\Phi_p(x, y) = \frac{1}{2} M \omega_r^2 (x^2 + y^2), \quad (3.10)$$

где

$$\omega_r \approx \frac{qV_0}{\sqrt{2}MR^2\Omega_T} = \frac{q_x}{2\sqrt{2}}\Omega_T \quad (3.11)$$

— частота радиальных секулярных колебаний ионов, $\omega_r \ll \Omega_T$.

Интересная наглядная механическая модель динамической стабилизации ионной конфигурации в электрических полях приведена в [3.6]. Потенциал иона в ловушке изображается седловидной поверхностью (рис. 3.2). Шарик, помещенный на седловину, будет неустойчив. Однако если потенциал закрутить с большой частотой ω , то падение шарика в любую плоскости (например, Oyz) будет предотвращаться многократным появлением в этой плоскости поднимающегося склона потенциала за время скольжения шарика вниз. По какому бы направлению не начал спуск шарик, в этом месте много раз появляется «подъем» седла.

Математический анализ выявляет область значений параметров a и q , при которых ионная конфигурация обладает динамической устойчивостью в плоскости Oxy [3.6].

Рассмотрим теперь строение линейной конфигурации ионов вдоль оси z . В [3.11] была описана простая модель линейного ионного кристал-

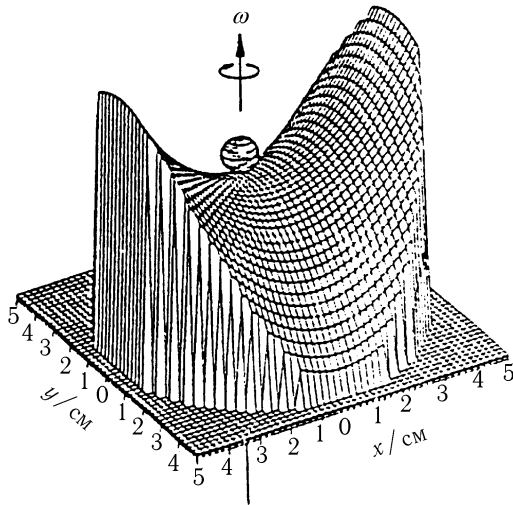


Рис. 3.2. Механическая аналогия электрической ловушки Пауля в высокочастотном переменном поле [3.6]. Шарик в поле сил тяжести на седловидной поверхности имеет неустойчивое положение и скатывается. Если же седловидное тело быстро вращается (период вращения гораздо меньше времени скатывания шарика), позиция шарика становится устойчивой.

ла в виде заряженной непрерывной струны. Кулоновская сила, действующая на ион в точке z струны со стороны ближайших соседей равна

$$F = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} (s_-^{-2} - s_+^{-2}) \cong 2 \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} s^{-2} \frac{ds}{dz}, \quad (3.12)$$

где ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, s_- , s_+ — расстояния до ближайших соседей слева (s_-) и справа (s_+), и

$$(s_-^{-2} - s_+^{-2}) = \frac{(s_+ + s_-)(s_+ - s_-)}{s_+^2 s_-^2} \cong \frac{2\Delta s}{s^3(z)} \cong \frac{2 \frac{ds}{dz} s(z)}{s^3(z)}. \quad (3.13)$$

Вклады от следующих пар соседей убывают в 4, 9, 16 и т. д. раз, так что полная кулоновская сила увеличивается в $\sum_{n=1}^{\infty} n^{-2} = \frac{\pi^2}{6}$ раз:

$$F = \frac{\pi^2}{3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{s^2} \frac{ds}{dz}. \quad (3.14)$$

Кулоновская сила отталкивания ионов уравновешивается сжимающей силой поля электродов $F_z = M\omega_Z^2 z$:

$$M\omega_Z^2 z = \frac{\pi^2}{3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{s^2} \frac{ds}{dz}, \quad (3.15)$$

что дает дифференциальное уравнение для неизвестной функции $s(z)$

$$\frac{\pi^2}{3} \frac{ds}{s^2} = \frac{z dz}{d_0^3}, \quad d_0 = (q^2/4\pi\epsilon_0 M\omega_Z^2)^{1/3}. \quad (3.16)$$

Положим длину цепочки равной $2l < 2Z_0$, а центр цепочки примем за начало координат оси z . Тогда

$$\frac{1}{s(l)} - \frac{1}{s(z)} = -\frac{3}{2\pi^2 d_0^3} (l^2 - z^2). \quad (3.17)$$

На краю цепочки расстояние $s(l)$ можно также оценить из равновесия сил

$$\frac{\pi^2}{6} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 s^2(l)} = M\omega_Z^2 l, \quad (3.18)$$

откуда следует

$$\frac{1}{s(l)} = \frac{1}{\pi} \left(6l/d_0^3 \right)^{1/2}. \quad (3.19)$$

Поскольку при $l \gg d_0 \frac{1}{s(l)} \ll \frac{3l^2}{2\pi^2 d_0^3}$, то в (3.17) слагаемым $1/s(l)$ можно пренебречь, и мы получим

$$s(z) = s_0 \left(1 - \frac{z^2}{l^2} \right)^{-1}, \quad (3.20)$$

где $s_0 \equiv s(0) = \frac{2\pi^2 d_0^3}{3l^2}$ — минимальное расстояние между ионами; которое достигается в центре цепочки (центр максимально сжат). По мере приближения к краю цепочки расстояния между ионами быстро возрастают, в соответствии с выражением (3.20).

Найдем взаимозависимость длины цепочки $2l$ и числа ионов L . Если обозначить номер иона в точке z через $n(z)$, то $dn = \frac{1}{s(z)} dz$, и можно записать уравнение

$$\int_0^{L/2} dn = \int_0^l \frac{dz}{s(z)}. \quad (3.21)$$

Интегрирование (3.21) дает результат

$$l = d_0 \left(\pi^2 / 2 \right)^{1/3} L^{1/3}, \quad (3.22)$$

и, следовательно, минимальное расстояние между ионами изменяется по закону

$$s_0(L) = \frac{4}{3} \left(\frac{\pi^2}{2} \right)^{1/3} d_0 L^{-2/3}. \quad (3.23)$$

Полученные формулы (3.20)–(3.22) лишь приближенно описывают конфигурацию зарядов в линейном ионном кристалле в ловушке Пауля. Более точные численные расчеты зависимости $s(z)$ и минимального расстояния между ионами были выполнены в [3.12, 3.13]. Приводятся следующие зависимости $s_0(L)$:

$$s_0(L) = 2,018 d_0 L^{-0,559}, \quad s_0(L) = 2,29 d_0 L^{-0,596}. \quad (3.24)$$

Для типичных параметров ловушки расстояние s_0 имеет значение порядка нескольких мкм, а амплитуды колебаний ионов — порядка 10 нм. Такие расстояния между ионами достаточны для индивидуального обращения к отдельным ионам с помощью лазерных импульсов. Однако перекрытие волновых функций электронов соседних ионов при этом оказывается пренебрежимо малым и поэтому обменное взаимодействие между соседними ионами отсутствует. Необходимая для выполнения операций CNOT связь между ионами, и при том не обязательно только между соседними, обеспечивается посредством возбуждения определенной коллективной колебательной моды линейного кристалла (см. ниже).

Однако эти расчеты не дают ответа на вопрос, важный с точки зрения конечной цели построения полномасштабного квантового компьютера: будет ли устойчив линейный ионный кристалл при числе ионов в кристалле $L = 10^3 \div 10^4$, то есть возможно ли выполнение

первого требования? Экспериментально был получен кристалл из 33 ионов $^{199}\text{Hg}^+$ [3.8]. Процесс разрушения линейного ионного кристалла с образованием зигзагообразной конфигурации наблюдался уже при 11 ионах $^{199}\text{Hg}^+$. Задача получения кристалла с числом ионов $10^3 \div 10^4$ усложняется еще тем, что с точки зрения возможности селективного управления квантовой эволюцией каждого иона — кубита в отдельности (четвертое требование), минимальное расстояние между ионами z_0 ограничено снизу: оно должно быть больше значения, позволяющего фокусировать лазерный пучок на любом отдельно взятом ионе в кристалле.

Хотя нет общего решения поставленной задачи, был получен ряд частных результатов (см. литературу в обзоре [3.9]). Было показано, что для достижения устойчивости кристалла необходимо, чтобы эффективный радиальный динамический гармонический потенциал превышал осевой потенциал: $\omega_r > \omega_z$, причем тем в большей степени, чем больше ионов:

$$\begin{aligned} \omega_r/\omega_z &> 1 \quad \text{для } L = 2; \\ \omega_r/\omega_z &> 1,55 \quad \text{для } L = 3; \\ \omega_r/\omega_z &> 0,73L^{0,86} \quad \text{для произвольного } L. \end{aligned} \quad (3.25)$$

3.2.3. Ловушки для нейтральных атомов. Оптические решетки

Как мы видели выше, относительно легко можно сконструировать ловушки для заряженных атомов (ионов), используя действие электрических и магнитных сил на заряд иона. Сложнее создать ловушки для нейтральных атомов. В этом случае приходится опираться на значительно более слабые силы взаимодействия постоянного магнитного момента нейтрального атома (если таковой момент у атома есть) с постоянным внешним магнитным полем соответствующей конфигурации, или на взаимодействие индуцированного внешним электрическим полем $E(t)$ электрического дипольного момента атома $p = \alpha E(t)$, где α — поляризуемость атома, с этим полем.

Если атом обладает магнитным моментом μ , его энергия во внешнем магнитном поле $B(r)$ $E_{\text{магн.}} = -\mu \cdot \mathbf{B}(r)$, а магнитная сила, действующая на атом, равна

$$F_{\text{магн.}} = -\left(\mu_x \text{grad } B_x(r) + \mu_y \text{grad } B_y(r) + \mu_z \text{grad } B_z(r)\right), \quad (3.26)$$

в частности,

$$F_x = -\left(\mu_x \frac{\partial B_x}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial B_y}{\partial x} + \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial x}\right). \quad (3.27)$$

Пусть минимум магнитного поля достигается в начале координат; тогда $\frac{\partial B_i}{\partial x_j} > 0$, где $i, j = x, y, z$. Если $\mu_i > 0$, $F_x, F_y, F_z < 0$, т. е. компоненты силы направлены к началу координат, и атомы удерживаются в области минимума магнитного поля. При $\mu_i < 0$ атомы выталкиваются из области минимума магнитного поля. Если спин атома $S = 1/2$, то проекции магнитного момента атома на направления магнитного момента имеют различные знаки: $\mu_z^{(1)} = -\mu_z^{(2)}$; атомы в состоянии с $\mu_z^{(1)} > 0$ будут втягиваться в ловушку и скапливаться там, а атомы в состоянии с $\mu_z^{(2)} < 0$ будут выталкиваться из ловушки. На основе магнитных сил, действующих на магнитный момент, строятся ловушки для нейтронов [3.6]. В магнитно-оптических ловушках для атомов оптическое излучение используется также для управления магнитным состоянием атомов [3.14].

Для целей построения квантовых компьютеров на нейтральных атомах значительно большее значение приобретают ловушки типа оптических решеток. Коснемся здесь этих вопросов в самых общих чертах [3.14–3.16]. В стоячей волне, образованной тремя парами встречных лазерных пучков, обнаруживается трехмерная решетка точек, в которых электрическая потенциальная энергия нейтрального атома

$$E_{э.л} = -\frac{1}{2}\alpha|E(r)|^2 \quad (3.28)$$

имеет минимум. Очевидно, что если $\alpha < 0$, то минимум энергии соответствует точкам $E(r) = 0$, то есть узлам стоячей волны. Знак α определяется соотношением частоты перехода ω_0 в атоме и частоты лазера ω : при $\omega - \omega_0 < 0$ $\alpha < 0$, и при $\omega - \omega_0 > 0$ $\alpha > 0$. Если частота лазера отстроена в красную область ($\omega - \omega_0 < 0$), ловушками для атомов служат узлы стоячей волны. Глубина потенциальных ям для атома в этих точках невелика. Однако используя так называемое сизифово охлаждение (см. ниже), атомы можно охладить настолько, что они уверенно захватываются в минимумы потенциальной энергии в оптической решетке.

Если лазер отстроен от атомного перехода в голубую сторону, $\omega - \omega_0 > 0$, индуцированный дипольный момент p оказывается в противофазе с полем лазера, энергия $E_{э.л} = -p \cdot E$ соответствует отталкиванию атома от света дипольной силой. На этой основе работает атомное зеркало [3.14–3.16]. Представим себе призму, на поверхности которой происходит полное внутреннее отражение лазерной волны. Выше границы призмы, в вакууме, существует проникающее поле оптической волны, затухающее по экспоненциальному закону $E(z) = E \exp(-z/z_0)$; тогда дипольная энергия атома экспоненциально возрастает по мере приближения атома к поверхности призмы ($z \rightarrow 0$):

$$eE_{э.л} = \alpha |E(z)|^2 = \alpha E_0^2 \exp(-2z/z_0). \quad (3.29)$$

Таким образом, световое поле образует энергетический барьер, от которого отражается холодный атом. Атомные зеркала послужили основой многих точных физических экспериментов.

3.3. Лазерное охлаждение ионов

Локализация (пленение) атомов и ионов в ловушках должна предотвращаться (сопровождаться) устранением их теплового движения или, другими словами их охлаждением. Более того в соответствии со вторым основным требованием, охлаждение должно быть настолько сильным, чтобы кубиты в начальный момент находились в основном состоянии. Охлаждение атомов и ионов может быть достигнуто непосредственно с помощью лазерного излучения, поскольку радиационное давление, оказываемое лазерным излучением на атомы, тормозит их движение. Обычно принято связывать лазерное излучение с высокой концентрацией энергии, а значит, с высокими температурами и давлениями. Однако в методах лазерного охлаждения излучение, в силу высокой монохроматичности и когерентности, выступает как низкотемпературная среда с низкой энтропией, атомы которой могут отдавать свою тепловую энергию [3.17]. При этом процесс можно организовать так, что лазерному излучению передается энергия и энтропия как поступательного теплового движения атомов (ионов) в газах или пучках, так и теплового колебательного движения (ионные кристаллы, атомы в ловушках). За работы по лазерному охлаждению С. Чу (S. Chu), К. Коэн – Тануджи (C. Cohen–Tannoudji) и У. Д. Филлипс (W. D. Phillips) были удостоены

Нобелевской премии в 1997 году [3.18]. Важный вклад в раннее развитие этих методов был сделан В. С. Летоховым с сотрудниками [3.19]. Мы здесь рассмотрим только основные идеи и результаты метода лазерного охлаждения атомов.

Известны несколько различных механизмов лазерного охлаждения. Оно может осуществляться в результате:

- 1) радиационного давления,
- 2) возбуждения боковых полос, возникших из-за теплового движения атомов (motional sideband excitation),
- 3) оптической накачки,
- 4) спонтанного антистоксовского комбинационного (рамановского) рассеяния и эффекта Допплера.

Последний механизм является основным в рассматриваемом варианте квантового компьютера на ионах с лазерным охлаждением.

Рассмотрим сначала процесс лазерного *охлаждения* свободных атомов [3.20]. Выберем два уровня энергии E_g и E_e (основной и возбужденный), между которыми разрешен дипольный электрический переход на частоте ν_0 . Радиационная ширина спектральной линии перехода равна $\gamma/2\pi$. Скорость (вероятность в единицу времени) термолизующих столкновений в газе $\gamma_c \ll \gamma$; а скорость оптического поглощения $\gamma_0 \gg \gamma_c$. В явлении лазерного охлаждения существенную роль играет *эффект Допплера*. Частота лазера ν выбирается несколько *ниже* частоты перехода ν_0 : $\nu < \nu_0$. Благодаря эффекту Допплера те атомы, которые движутся навстречу фотону, «видят» более высокую частоту фотона и оказываются в условиях сильного резонансного рассеяния, в отличие от противоположного случая, когда условие резонанса не выполняется. В результате доминирует процесс поглощения фотонов с спонтанным переизлучением их в произвольном направлении в пространстве, сопровождающийся торможением движущихся атомов.

В каждом акте рассеяния атом получает от поглощенного фотона импульс $\hbar\mathbf{k}$; при этом средний импульс переизлученных фотонов $\hbar\langle\mathbf{k}'\rangle = 0$. Таким образом, в одном акте рассеяния скорость атома изменяется на величину

$$\Delta\mathbf{V} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{M}; \quad |\mathbf{V} + \Delta\mathbf{V}| = \left| \mathbf{V} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{M} \right| \cong \left(V^2 + \frac{2\hbar}{M}\mathbf{k}\mathbf{V} \right)^{1/2}, \quad (3.30)$$

то есть атом замедляется, если \mathbf{V} и \mathbf{k} антипараллельны ($\mathbf{k}\mathbf{V} < 0$). При более точном описании процесса необходимо учесть энергию отда-

чи $R = (\hbar k)^2/2M$, которую атом получает при излучении фотона, а также эффект Доплера второго порядка (релятивистский эффект). С учетом этих эффектов резонансные частоты поглощаемых (*abs*) и спонтанно излучаемых (*em*) фотонов определяются выражениями [3.20]

$$\begin{aligned}\omega_{abs} &= \omega_0 + k_{abs}V - \frac{1}{2}\beta^2\omega_0 + R/\hbar, \\ \omega_{em} &= \omega_0 + k_{em}V' - \frac{1}{2}\beta^2\omega_0, -R/\hbar,\end{aligned}\quad (3.31)$$

где

$$\omega_0 = 2\pi\nu_0, \quad |k_{abs}| = \omega_{abs}/c, \quad |k_{em}| = \omega_{em}/c, \quad \beta = |V|/c, \quad (3.32)$$

а V, V' — скорости атома в основном и возбужденном состояниях.

Вторые слагаемые в (3.31) представляют собой доплеровское смещение 1-го порядка, третьи слагаемые — доплеровское смещение 2-го порядка, четвертые — смещение из-за отдачи. Разность энергий излученного и поглощенного фотонов положительна:

$$\hbar(\omega_{em} - \omega_{abs}) = -\hbar k_{abs}V - 2R > 0, \quad (3.33)$$

она «заимствуется» от энергии теплового движения атома:

$$\Delta E_k = \hbar kV + 2R < 0. \quad (3.34)$$

Для численных оценок примем: $M = 100$ а.е.м., $\nu_0 = 5 \cdot 10^{14}$ Гц ($\lambda = 600$ нм), $T = 300$ К; тогда $V = 2.2 \cdot 10^2$ м/с, $\hbar|kV| = 2,5 \cdot 10^{-25}$ Дж. В результате получим, что в каждом акте рассеяния атом охлаждается на величину $\Delta T = 2\Delta E_k/(3k_B) = 0.072$ К; для существенного охлаждения атома нужно порядка 104 актов рассеяния. Вычислив скорость охлаждения dE_k/dt и приравняв ее нулю, можно найти предел охлаждения [3.20]:

$$\langle E_k \rangle_{\min} = \frac{3}{2}k_B T_{\min} = \frac{1}{4}\hbar\gamma. \quad (3.35)$$

То есть минимальная температура при лазерном охлаждении не зависит от параметров лазерного излучения, а определяется характеристикой охлаждаемых атомов — радиационной шириной перехода γ . Если, например, $\gamma/2\pi = 10$ МГц, то $T_{\min} = 2,4 \cdot 10^{-4}$ К, $\hbar\gamma = 0,7 \cdot 10^{-26}$ Дж $\gg \gg R \approx 4 \cdot 10^{-30}$ Дж.

Перейдем теперь к полуклассическому описанию процесса лазерного охлаждения *связанных* атомов (ионов) в ловушке. Пусть ион находится в ловушке Пауля в трехмерном гармоническом потенциале с частотами $\Omega_i \ll \omega_0$, $i = x, y, z$. Пленение называется сильным, если $\Omega_i \gg \gamma$. Рассмотрим процесс охлаждения одномерного движения иона вдоль оси x . Пусть лазерное поле распространяется в направлении оси x и в точке $x = x_a \sin(\Omega_x t + \varphi_x)$, где находится атом, амплитуда поля имеет значение

$$E_{atom} = E_0 \sin(kx - \omega t) = E_0 \sin[kx_a \sin(\Omega_x t + \varphi_x) - \omega t]. \quad (3.36)$$

Таким образом, электрическое поле лазера на атоме является частотно-модулированным с частотой колебаний атома в ловушке. Спектр такого сигнала, как известно, имеет *боковые полосы* на частотах $\omega \pm m\Omega_x$, $m = \pm 1, \pm 2, \dots$ с интенсивностями, пропорциональными $J_m^2(kx_a)$, J_m — функции Бесселя. Все компоненты спектра имеют ширину γ . Если $\gamma \ll \Omega_x$, частоту лазера ω можно выбрать в резонансе с боковой полосой $\omega_0 + m\Omega_x = \omega$, (m — отрицательно), так что поглощаются фотоны с энергией $\hbar(\omega_0 - |m|\Omega_x)$, а излучаются с энергией $\hbar\omega_0$. Скорость охлаждения будет равна

$$\frac{dE}{dt} = -\hbar|m|\Omega_x \frac{I\sigma_0}{\hbar\omega} J_m^2(kx_a), \quad (3.37)$$

где I — интенсивность лазерного излучения, σ_0 — сечение поглощения фотона. Выберем для численных оценок [3.20]: $M=100$ а.е.м., $\lambda = 2\pi/k = 600$ нм, $\Omega = 12,5$ МГц, $\gamma/2\pi = 1$ МГц, $\sigma_0 I/\hbar\omega_0 = 5$ МГц и учтем, что область боковых полос охватывает доплеровский профиль распределения тепловых скоростей ионов. Если колебание ионов происходит с амплитудой x_a , определяемой из соотношения (k_B — постоянная Больцмана)

$$\frac{1}{2}M\Omega_x^2 \langle x^2 \rangle = \frac{1}{4}M\Omega_x^2 x_a^2 = \frac{1}{2}k_B T, \quad (3.38)$$

то для комнатной температуры получим: $x_a = 2,8 \cdot 10^{-4}$ см, $kx_a = 30$. Полагая далее $kx_a \geq |m| = 28$, найдем $J_{28}^2(30) = 0,046$. Для усредненной по тепловому распределению результирующей скорости доплеровского охлаждения получим оценку [3.20]

$$\langle dE/dt \rangle = 0,057 \text{ эВ/с}. \quad (3.39)$$

При трехмерном лазерном охлаждении атомы охлаждаемого газа помещают в поле *попарно встречных* в направлениях трех координатных осей лучей лазеров (рис. 3.3) [3.16]. В области перекрытия лазерных пучков объемом около 1 см^3 атомы непрерывно поглощают и спонтанно переизлучают фотоны, случайным образом изменяя направление движения в каждом акте рассеяния фотона из-за случайного направления импульса отдачи. Замечательной особенностью метода лазерного охлаждения является то, что движение атомов приобретает характер случайного блуждания. Длина свободного пробега атома в этом случае составляет величину порядка 10 микрон. Поле лазеров в этих условиях было названо *оптической патокой* (molasses) [3.16]. В результате время жизни атома в объеме «оптической патоки» оказывается много больше времени баллистического пролета через этот объем. Однако оптическая патока это не ловушка для атомов в полном смысле, так как поле лазеров не создает возвращающей силы, а только вязкую силу трения.

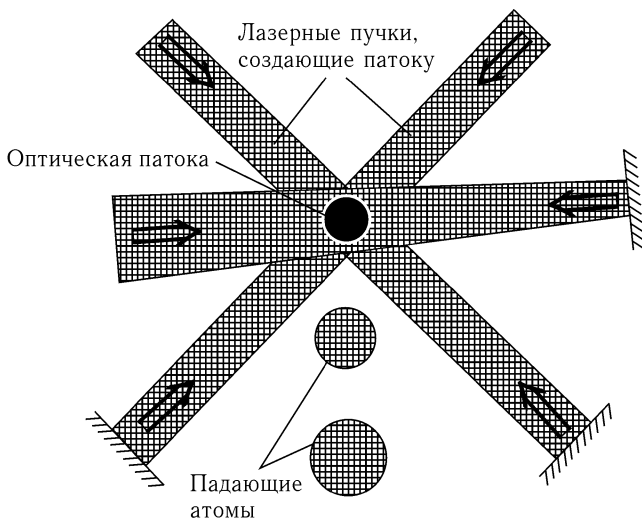


Рис. 3.3. Схема создания «оптической патоки» в объеме, где проходят шесть попарно встречных лазерных пучков.

Далее было достигнуто существенное усовершенствование указанных методов, которое позволило достичь температур порядка *микро-*

и даже *нанокельвинов*. Первое усовершенствование получило название *сизифова эффекта* (сизифово охлаждение) [3.14–3.16]. В этом случае стоячая волна встречных лазерных пучков образуется пучками, имеющими перпендикулярную линейную поляризацию. Поляризация суммарного электрического поля пространственно промодулирована с периодом $\lambda/2$. На каждом отрезке $\lambda/4$ она меняется от σ^- до σ^+ , и наоборот. Когда атом движется вдоль этой линии, зеэмановские подуровни энергии основного состояния атома $E_{-1/2}$ и $E_{1/2}$ благодаря пространственной модуляции поляризации света периодически изменяют положение относительно друг друга (рис. 3.4). Рассеивая фотоны в точках максимального расхождения зеэмановских уровней, атом каждый раз переходит на нижний зеэмановский уровень, и, двигаясь дальше, снова «взбирается», как Сизиф на гору, на вершину поверхности потенциальной (зеэмановской) энергии, и опять сбрасывается вниз. Однако чаще движущийся атом взбирается вверх, чем спускается вниз (волнистые стрелки на рисунке), в результате чего и происходит охлаждение иона. Режим *сизифова охлаждения* оказался очень эффективным. Замечательно, однако, то, что сизифово охлаждение сдвинуло достигнутый предел охлаждения $T_{\min} = \hbar\gamma/\sigma_0 k_B = 10^{-3}$ К, присущий доплеровскому методу, до значения $T_{\min} = E_R/k_B \cong 10^{-6}$ К, где $E_R = \hbar^2 k^2/2M$ — энергия отдачи атома при излучении фотона.

При дальнейшем усовершенствовании метода лазерного охлаждения был преодолен и так называемый предел *одnofотонной отдачи* [3.14]. Основная идея заключалась в том, чтобы создать такие условия, когда ультрахолодные атомы ($V \rightarrow 0$) перестают не только рассеивать фотоны но и получать энергию отдачи. Именно за счет этих методов удалось достичь охлаждения одномерного движения атома цезия до $T = 3$ нК.

3.4. Колебательное движение ионов в линейном ионном кристалле

В динамике квантового компьютера на одномерном ионном кристалле одна из мод колебаний ионов рассматривается как дополнительный *вспомогательный* кубит, связывающий *внутренние* кубиты, построенные на внутренних степенях свободы ионов [3.13]. Выше мы рассмотрели как определяются равновесные положения ионов в линейном

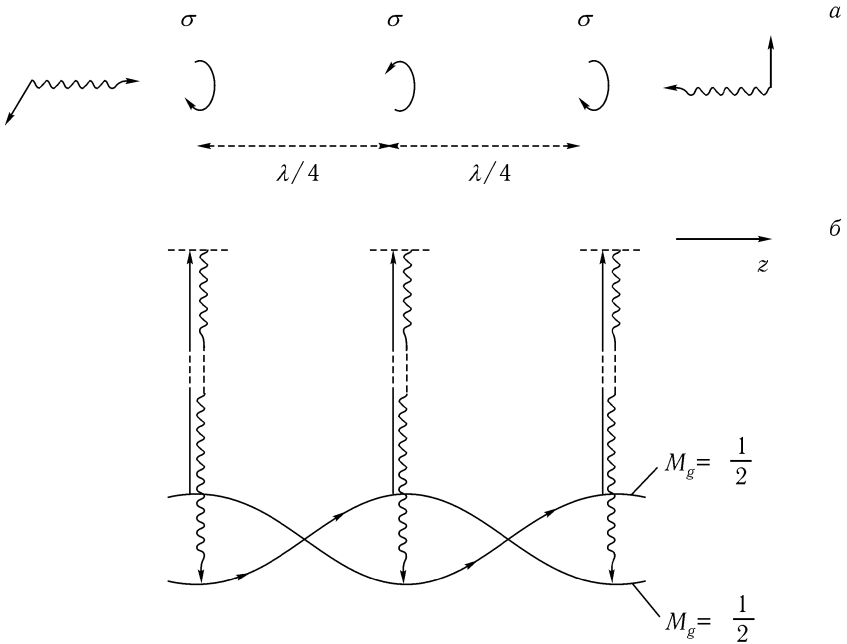


Рис. 3.4. Принцип сизифова охлаждения: а) Поле, формируемое двумя встречными плоскими волнами, распространяющимися вдоль оси z и линейно поляризованными в перпендикулярных направлениях. б) Два зеемановских подуровня основного состояния атома с проекциями спина $M_g = \pm 1/2$ и схема коррелированной пространственной модуляции световых сдвигов этих подуровней и оптической накачки между ними.

кристалле. Относительно положения равновесия ионы имеют смещения, обусловленные колебательными движениями:

$$\begin{aligned}
 x_m(t) &= x_m^0 = q_m^{(x)}(t), \\
 y_m(t) &= y_m^0 = q_m^{(y)}(t), \\
 z_m(t) &= z_m^0 = q_m^{(z)}(t).
 \end{aligned}
 \tag{3.40}$$

В линейной ловушке Пауля ионный кристалл гораздо сильнее сжат внешними силами в радиальных направлениях x и y , чем в направлении оси кристалла (направление z). Поэтому амплитуда колебаний $q_m^{(x)}$,

$q_m^{(y)} \ll q_m^{(z)} = q_m$ и можно приближенно считать $q_m^{(x)} = q_m^{(y)} = 0$. Остается, таким образом, рассмотреть колебания ионов только в направлении оси z кристалла. Общая схема вычисления соответствует известным из теории колебаний кристаллов этапам.

Потенциальная энергия кристалла для движения L ионов вдоль оси z с учетом их кулоновского отталкивания имеет вид [3.13]:

$$V = \sum_{m=1}^L \frac{1}{2} M \omega_z^2 z_m^2(t) + \sum_{\substack{n,m=1 \\ n \neq m}}^L \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 |z_n(t) - z_m(t)|}, \quad (3.41)$$

где ω_z — круговая частота, характеризующая гармонический потенциал.

Равновесные положения ионов определяются системой L уравнений

$$\left(\frac{\partial V}{\partial z_m} \right)_0 = 0, \quad m = 1, \dots, L. \quad (3.42)$$

В безразмерных координатах $U_m = z_m^{(0)}/d_0$ уравнения (3.42) имеют вид

$$U_m - \sum_{n=1}^{m-1} \frac{1}{|U_m - U_n|^2} + \sum_{n=m+1}^L \frac{1}{|U_m - U_n|^2} = 0, \quad m = 1, \dots, L. \quad (3.43)$$

Для функции Лагранжа, связанной с колебаниями ионов, имеем

$$L = \frac{M}{2} \sum_{m=1}^L (\dot{q}_m)^2 - \frac{M\omega_z^2}{2} \sum_{n,m=1}^L A_{nm} q_n q_m, \quad (3.44)$$

где использовано обозначение

$$\left[\frac{\partial^2 V}{\partial z_n \partial z_m} \right]_0 = M\omega_z^2 A_{nm}. \quad (3.45)$$

Из (3.42) для A_{nm} следует

$$A_{nm} = \begin{cases} 1 + 2 \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq m}}^L \frac{1}{|U_m - U_p|^3}, & n = m, \\ -\frac{2}{|U_m - U_n|^3}, & n \neq m. \end{cases} \quad (3.46)$$

Амплитуды колебаний ионов могут быть выражены через амплитуды L нормальных мод колебаний $Q_p(t)$ с характерными для них частотами $\omega_p = \sqrt{\mu_p}\omega_z$

$$q_m(t) = \sum_{p=1}^L b_m^{(p)} Q_p(t), \quad (3.47)$$

где собственные векторы $b_m^{(p)}$ и соответствующие им собственные значения μ_p определяются из равенства нулю определителя системы лагранжевых уравнений:

$$\sum_{n=1}^L [A_{nm} b_n^{(p)} - \mu_p b_m^{(p)}] = 0, \quad p = 1, \dots, L. \quad (3.48)$$

Ряд частных решений ($L = 2 \div 10$) этой системы приведено в [3.13]. Наиболее низкочастотная мода колебаний с амплитудой $Q_1(t)$ ($p = 1$) соответствует синхронным колебаниям «жесткой» цепочки ионов в гармоническом «осевом» потенциале, имеющем вид

$$V = \sum_{m=1}^N \frac{1}{2} M \omega_z^2 z_m^2 \quad (3.49)$$

с частотой ω_z ($\mu_1 = 1$), и собственным вектором $b^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{L}}(1, \dots, 1)$, определяющим положение центра масс цепочки ионов. Таким образом, эта мода описывает колебания центра масс цепочки ионов; отсюда и название (center of mass mode = COM mode). Для второй моды $Q_2(t)$ с частотой $\sqrt{3}\omega_z$ ($\mu_2 = 3$) отклонения q_m пропорциональны расстояниям ионов z_m от центра цепочки, а сама мода $Q_2(t)$ называется «дышащей» (breathing) модой. В качестве вспомогательного кубита (связывающего внутренние кубиты) в компьютере выбирается COM мода с двумя нижними энергетическими состояниями [3.13].

Можно также перейти к квантовому представлению колебаний в ионной цепочке, выражая смещения ионов через операторы уничтожения \hat{a}_p и рождения \hat{a}_p^+ фононов соответствующих мод колебаний Q_p [3.13]:

$$\hat{q}_m(t) = \sum_{p=1}^L b_m^{(p)} \hat{Q}_p(t) = i \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_p}} \sum_p^L b_m^{(p)} (\hat{a}_p e^{-i\omega_p t} - \hat{a}_p^+ e^{i\omega_p t}). \quad (3.50)$$

3.5. Внутренние кубиты на ионах в ловушке

В качестве состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ внутреннего кубита должны быть выбраны основное и метастабильное возбужденные электронные состояния иона, который находится в линейной ловушке в условиях лазерного охлаждения. Долгоживущая двухуровневая система требуется для того, чтобы обеспечить возможность выполнения необходимых квантовых операций в соответствии с четвертым основным требованием. В качестве таких систем рассматривались ионы Ca^+ , Ba^+ , Sr^+ , Hg^+ [3.21]. Между термами S и P , P и D этих ионов разрешены дипольные электрические переходы; времена соответствующих спонтанных переходов исчисляются наносекундами. Между основным S -термом и возбужденным D -термом разрешен только *квадрупольный электрический переход*; поэтому время жизни электрона на уровне D по отношению к переходу $D \rightarrow S$ составляет величину порядка 1 с. (D -терм метастабильен по отношению к переходу $D \rightarrow S$). В качестве состояния $|1\rangle$ кубита поэтому целесообразно избрать уровень энергии ${}^2D_{5/2}$ [3.21].

Есть и другой вариант выбора состояний внутреннего кубита. Основное состояние иона ${}^2S_{1/2}$ является вырожденным по спину и во внешнем постоянном магнитном поле B_0 расщепляется на два состояния $|\pm 1/2\rangle$, характеризующиеся проекциями спина $+1/2$ и $-1/2$ на направление магнитного поля. Разность энергии этих состояний $E_{1/2} - E_{-1/2} = \hbar\omega_0$ лежит в СВЧ области. Состояния иона $|\pm 1/2\rangle$ можно также выбрать в качестве состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ кубита. Если ион имеет ненулевой ядерный спин, каждое из состояний $|\pm 1/2\rangle$ будет иметь сверхтонкое расщепление; тогда возможны и другие варианты выбора состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ кубита.

Переходы между магнитными подуровнями могут выполняться под действием переменного магнитного поля на частоте перехода (частота магнитного резонанса). Однако в случае ионов в ловушке селективная адресация СВЧ излучения к отдельным кубитам (ионам) будет возможной только в случае подстройки частоты перехода данного иона под частоту переменного магнитного поля. Методы создания локальных магнитных полей на ловушках пока не разработаны и использование методов электронного магнитного резонанса (ЭПР) для управления кубитами квантового компьютера на ионах в ловушках в литературе не обсуждается. Однако можно управлять переходами между состояниями $|M_z = \pm 1/2\rangle$ с помощью совокупного действия поля

двух лазеров, настроенных для работы по так называемой рамановской схеме (рис. 3.5). Разность частот лазеров в рамановской схеме равна частоте перехода между подуровнями: фотон большей частоты (лазера накачки) поглощается при переходе с уровня $|0\rangle$ на промежуточный виртуальный уровень с энергией вблизи вспомогательного уровня $|2\rangle$, а на меньшей частоте стоксовского лазера происходит вынужденное излучение фотона с переходом с виртуального уровня на уровень $|1\rangle$.

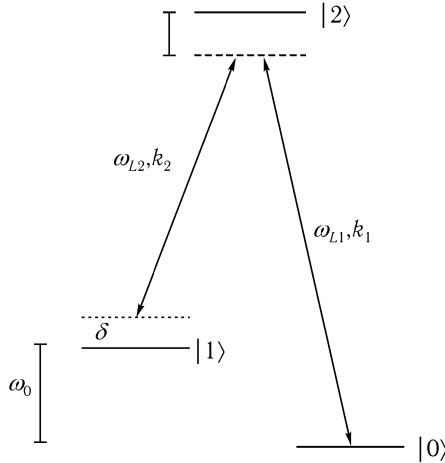


Рис. 3.5. Схема уровней энергии иона и переходов между ними в рамановской схеме управления состоянием иона [3.9]. Состояния магнитных (зеemanовских) подуровней энергии $|1\rangle$ и $|0\rangle$ разделены интервалом $\hbar\omega_0$, соответствующим переходу под действием СВЧ излучения. Уровень состояния $|2\rangle$ находится от уровней состояний $|1\rangle$ и $|0\rangle$ на «оптическом» расстоянии, Δ , δ — отстройка частоты лазеров от частоты соответствующих переходов.

Рассмотрим несколько подробнее физику управляемых лазерными импульсами переходов между уровнями энергии иона. Гамильтониан взаимодействия \hat{H}_I электрического дипольного момента перехода \hat{p} с электрическим полем лазера $\mathbf{E}(r, t)$ имеет вид

$$\hat{H}_I = -\hat{p} \cdot \mathbf{E}(r, t). \quad (3.51)$$

Поле $\mathbf{E}(r, t)$ может быть создано разными способами: оно может быть

полем бегущей волны или иметь форму стоячей волны; оно может быть суммой полей двух лазеров на разной частоте (рамановская схема).

В случае бегущей волны, распространяющейся вдоль оси z (оси ионного кристалла),

$$E(r, t) = E_1 x \cos(kz - \omega t + \varphi), \quad (3.52)$$

где x — направление поляризации, E_1 — амплитуда волны, $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число лазера. Вводя комплексную частоту Раби (I. Rabi) Ω с помощью равенства $\hbar\Omega = -pE_1/4$ и эффективный спин $S = 1/2$, описывающий два состояния кубита, с помощью соотношения $\hat{p} = p\hat{S}$, для гамильтониана \hat{H}_1 запишем:

$$\hat{H}_1 = \hbar\Omega(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)(e^{i(kz - \omega t + \varphi)} + e^{-i(kz - \omega t + \varphi)}), \quad (3.53)$$

где

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y. \quad (3.54)$$

Волновая функция $|\psi(t)\rangle$ электронного состояния иона в поле лазера определяется уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}_I |\psi(t)\rangle. \quad (3.55)$$

Для кубита с базисными состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$ функцию $|\psi(t)\rangle$ будем искать в виде суперпозиции

$$|\psi(t)\rangle = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle. \quad (3.56)$$

Решая уравнение (3.56) при начальном условии $|\psi(0)\rangle = a(0)|0\rangle + b(0)|1\rangle$, для простейшего случая точного резонанса, когда отстройка $\Delta = \omega_0 - \omega = 0$, получим

$$\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Theta/2) & -ie^{i\varphi} \sin(\Theta/2) \\ -ie^{-i\varphi} \sin(\Theta/2) & \cos \Theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix}, \quad (3.57)$$

где $\Theta = |\Omega|t$, $\varphi = \arg \Omega$. При $\Delta \neq 0$ матрица преобразования в (3.57) имеет более сложную форму [3.9].

Операцию, производимую лазерным импульсом, действующим на внутренний кубит иона в кристалле и совершающую преобразование

состояния кубита m согласно (3.57), обозначим $V_m(\Theta, \varphi)$. Под действием этой операции состояния $|0\rangle_m$ и $|1\rangle_m$ преобразуются следующим образом:

$$V_m(\Theta, \varphi) \begin{pmatrix} |0\rangle_m \\ |1\rangle_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Theta/2)|0\rangle_m - ie^{i\varphi} \sin(\Theta/2)|1\rangle_m \\ \cos(\Theta/2)|1\rangle_m - ie^{-i\varphi} \sin(\Theta/2)|0\rangle_m \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

В частности, импульс $V_m(\pi, \pi/2)$ совершает отображение $|0\rangle_m \rightarrow |1\rangle_m$, $|1\rangle_m \rightarrow -|0\rangle_m$, то есть операцию NOT (НЕ) с изменением фазы на π ; аналогично, импульс $V_m(\pi/2, \pi/2)$ определяет операцию, близкую к операции Адамара, но также с изменением фазы. «Чистые», без изменения фазы, *однокубитовые операции* NOT и Адамара Н выполняются *двумя* лазерными импульсами с участием вспомогательного (auxiliary) состояния иона $|aux\rangle$. Состояние $|aux\rangle$ должно быть выбрано так, чтобы оно взаимодействовало с $|0\rangle$ также, как $|1\rangle$ с $|0\rangle$, но при этом $|aux\rangle$ не должно взаимодействовать с $|1\rangle$. Например, если выбрать в случае иона Ca^+ состояния $|0\rangle = |4^2S_{1/2}, M_J = 1/2\rangle$, $|1\rangle = |3^2D_{5/2}, M_J = 3/2\rangle$, и $|aux\rangle = |3^2D_{5/2}, M_J = -1/2\rangle$, то эти условия будут выполнены. Тогда

$$V_m^{(aux)}(\Theta, \varphi) \begin{pmatrix} |0\rangle_m \\ |aux\rangle_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Theta/2)|0\rangle_m - ie^{i\varphi} \sin(\Theta/2)|aux\rangle_m \\ \cos(\Theta/2)|aux\rangle_m - ie^{-i\varphi} \sin(\Theta/2)|0\rangle_m \end{pmatrix}. \quad (3.59)$$

С помощью (3.58) и (3.59) легко проверить, что однокубитовые операции NOT $_m$ и Адамара Н $_m$ для m -го кубита выполняются парами импульсов

$$\begin{aligned} \text{NOT}_m &= V_m^{(aux)}(2\pi, \pi/2)V_m(\pi/2, \pi/2), \\ \text{H}_m &= V_m^{(aux)}(2\pi, \pi/2)V_m(3\pi/2, \pi/2). \end{aligned} \quad (3.60)$$

3.6. Взаимодействие между кубитами через посредство фононного кубита. Двухкубитовые операции

Гамильтониан взаимодействия m -го внутреннего кубита с лазерным полем \hat{H}_1 (3.53) описывает также и взаимодействие с фононным кубитом. Действительно, в выражении (3.53) координата $z = z_0 + q(t)$ содержит смещение иона в результате его колебательного движения. Разлагая гамильтониан (3.53) по малому параметру q до линейных членов и опуская нерезонансные члены, содержащие

произведения $\widehat{S}_+\widehat{a}^+$ и $\widehat{S}_-\widehat{a}$ (так называемое приближение вращающейся волны [3.22]), для приращения \widehat{H}_1 получим:

$$\delta\widehat{H}_1 = i\hbar\Omega'_m \left(\widehat{S}_+\widehat{a}e^{i(kz_0 - \omega_z t - \omega t + \varphi)} - \widehat{S}_-\widehat{a}^+ e^{-i(kz_0 - \omega_z t - \omega t + \varphi)} \right), \quad (3.61)$$

где обусловленная взаимодействием с фононами комплексная частота Раби Ω'_m имеет следующий вид

$$\Omega'_m = \frac{\eta}{\sqrt{L}} \Omega_m, \quad (3.62)$$

где $\eta = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_z}} k e_z$ — так называемый *параметр Лэмба–Дика* (G. Lamb, R. Dicke), равный, по существу, отношению амплитуды нулевых колебаний СОМ моды $Q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_z}}$ к длине волны лазерного излучения. Так как $k_z = \frac{2\pi}{\lambda} \cos \delta$, где δ -угол между k и направлением поляризации лазерного излучения (ось z); то $\eta = 2\pi \frac{Q_0}{\lambda} \cos \delta$. Для оптического излучения при $\lambda = 500$ нм, $Q_0 = 10$ нм получим $\eta \cong 0, 1$, а для СВЧ излучения с $\lambda = 1$ см = 10^7 нм — $\eta \cong 6 \cdot 10^{-6}$. Величина параметра Лэмба–Дика характеризует интенсивность модуляции поля колебаниями ионов: эта модуляция тем слабее, чем однороднее лазерное поле (больше длина волны). Количественно это выражается тем, что связанная с фононами частота Раби меньше в η/\sqrt{L} раз, чем частота Раби для соответствующих электронных переходов.

Пусть в символе $|i, j\rangle$ значения $i = 1, 0$ определяют состояние внутреннего кубита m , а значения j — состояния колебательного кубита. Тогда лазерный импульс длительностью t будет вызывать переход из состояния $|\psi(0)\rangle = a(0)|0, 1\rangle + b(0)|1, 0\rangle$ в состояние $|\psi(t)\rangle = a(t)|0, 1\rangle + b(t)|1, 0\rangle$, описывающийся соответствующей матрицей преобразования:

$$U_m(\Theta', \varphi) \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Theta'/2) - ie^{i\varphi'} \sin(\Theta'/2) \\ -ie^{-i\varphi'} \sin(\Theta'/2) \cos(\Theta'/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix}, \quad (3.63)$$

где

$$\Theta' = |\Omega'_m|t, \quad \varphi' = \arg \Omega'_m. \quad (3.64)$$

Соответствующие лазерные импульсы назовем импульсами U -типа. Состояния $|0, 1\rangle_m$ и $|1, 0\rangle_m$ под воздействием импульсов $U_m(\Theta', \varphi)$ переходят в суперпозиции:

$$\begin{aligned} |0, 1\rangle_m &\rightarrow \cos(\Theta'/2)|0, 1\rangle_m - ie^{i\varphi'} \sin(\Theta'/2)|1, 0\rangle_m, \\ |1, 0\rangle_m &\rightarrow \cos(\Theta'/2)|1, 0\rangle_m - ie^{-i\varphi'} \sin(\Theta'/2)|0, 1\rangle_m. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Легко видеть, что операция обмена состояниями (SWAP) внутреннего кубита $|i\rangle_m$ и вспомогательного колебательного кубита $|i\rangle_v$, а именно: $|1\rangle_m|0\rangle_v \leftrightarrow |0\rangle_m|1\rangle_v$, осуществляется с помощью только одного оператора $U_m(\pi, 3\pi/2)$.

Далее обратимся снова к вспомогательному состоянию иона m $|aux\rangle_m$ и лазерному импульсу, выполняющему переходы, соответствующие следующим преобразованиям [3.21]

$$\begin{aligned} U_m^{(aux)}(\Theta', \varphi) \begin{pmatrix} |0, 1\rangle_m \\ |aux, 0\rangle_m \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} \cos(\Theta'/2)|0, 1\rangle_m - ie^{i\varphi'} \sin(\Theta'/2)|aux, 0\rangle_m \\ \cos(\Theta'/2)|aux, 0\rangle_m - ie^{-i\varphi'} \sin(\Theta'/2)|0, 1\rangle_m \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Теперь выберем такую последовательность лазерных импульсов и соответствующих им переходов, чтобы выполнялась операция CNOT. Пусть кубит с номером c будет контролирующим, а кубит с номером t — контролируемым кубитом, контроль осуществляется благодаря взаимодействию основных кубитов через дополнительный вспомогательный кубит v , состояниями которого являются два состояния COM моды. Если, например, начальное состояние трех кубитов $\psi_0 = |t\rangle_v = |100\rangle$, то результатом *двухкубитовой операции* CNOT $_{ct}$ должно быть состояние $|110\rangle$:

$$\text{CNOT}_{ct}|100\rangle = |110\rangle. \quad (3.67)$$

Этот результат получается после применения к ионам c и t шести лазерных импульсов (операторы действуют последовательно справа налево):

$$\begin{aligned} \text{CNOT}_{ct} = V_t^{(aux)}(2\pi, \pi/2)V_t(3\pi/2, \pi/2)U_c(\pi, 0)U_t^{(aux)} \times \\ \times (2\pi, 0)U_c(\pi, 0)V_t(\pi/2, \pi/2). \end{aligned} \quad (3.68)$$

Действительно, результат действия отдельных импульсов сводится к следующим преобразованиям:

$$\begin{aligned}
 V_t(\pi/2, \pi/2)|100\rangle &= |1\rangle_c \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_t + |1\rangle_t)|0\rangle_v, \\
 U_c(\pi, 0)|1\rangle_c|0\rangle_v &= -i|0\rangle_c|1\rangle_v, \\
 U_t^{(aux)}(2\pi, 0)(-i|0\rangle_c)(|0\rangle_t|1\rangle_v + |1\rangle_t|1\rangle_v) &= (-i|0\rangle_c)(-|0\rangle_t|1\rangle_v + |1\rangle_t|1\rangle_v), \\
 U_{ct}(\pi, 0)\frac{1}{\sqrt{2}}(-i|0\rangle_c)(-|0\rangle_t|1\rangle_v + |1\rangle_t|1\rangle_v) &= |1\rangle_c \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_t|0\rangle_v - |1\rangle_t|0\rangle_v), \\
 V_t^{(aux)}(2\pi, \pi/2)V_t(3\pi/2, \pi/2)\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_t - |1\rangle_t) &= |1\rangle_t. \tag{3.69}
 \end{aligned}$$

Окончательно получим:

$$\psi_{final} = |1\rangle_c|1\rangle_t|0\rangle_v = \text{CNOT}_{ct}|1\rangle_c|0\rangle_t|0\rangle_v. \tag{3.70}$$

Последовательности преобразований, подобных приведенным выше, не удастся представить как переходы между уровнями энергии иона и фононов из-за участия в них суперпозиции состояний. Это в некоторой степени лишает наглядности процесс выполнения вентиля CNOT.

Таким образом, мы показали возможность выполнения однокубитовых и двухкубитовых операций, из которых складываются вычисления в квантовом компьютере, построенном на ионном кристалле в ловушке (четвертое основное требование).

В случае рамановской схемы переходов между *зеemanовскими* подуровнями энергии внутреннего кубита частота Раби выражается формулой [3.21]

$$\Omega_{Raman} = \beta \frac{|p_{12}|^2 E_p E_s^*}{4\hbar^2 \delta}, \tag{3.71}$$

где E_p, E_s — напряженности поля лазера накачки и стоксовского лазера, p_{12} — матричный элемент электрического дипольного момента с основного на уровень $|2\rangle$, Δ — отстройка частоты лазеров от уровня $|2\rangle$ (рис. 3.5), β — множитель порядка единицы, зависящий от поляризации и квантовых чисел уровней энергии. Квантовая динамика кубита в рамановской схеме выражается теми же матрицами, что и в случае кубита на оптических уровнях (формулы (3.58), (3.59), (3.65)–(3.69)), при измененной согласно (3.74) частоте Раби. Обе схемы примерно равнозначны по достоинствам и недостаткам; в литературе пока нет ясно выраженных мнений в пользу той или другой схемы переходов. Ниже будут приведены некоторые суждения по этому поводу.

3.7. Считывание результатов вычислений в квантовом компьютере на ионах в ловушке

Одним из больших преимуществ квантового компьютера на ионах в ловушке является относительная легкость реализации процесса считывания (пятое основное требование). Этот процесс физически сводится к измерению населенностей состояний кубитов по завершении процесса вычислений. Такие измерения должны быть выполнены на одном единственном атоме, и в этом их главная трудность. До последнего времени измерения состояний выполнялись на *макроскопических ансамблях* частиц. В предельных по точности измерениях спектров атомов (ионов) для целей построения атомных стандартов частоты, а теперь и в связи с разработкой квантовых компьютеров, впервые возникла задача об измерении состояний отдельных атомных частиц — ионов, электронов, спинов электронов и ядер. Посмотрим здесь, как это можно выполнить для кубитов на оптических уровнях [3.21].

Выберем в качестве состояния $|0\rangle$ кубита подуровень основного состояния $4^2S_{1/2}$ иона Ca^+ и в качестве $|1\rangle$ — подуровень возбужденного метастабильного состояния $3^2D_{5/2}$ (рис. 3.6). «Опрос» иона о состоянии его кубита может быть осуществлен с помощью лазера с длиной волны $\lambda = 397$ нм, соответствующей дипольному переходу $4^2S_{1/2} \rightarrow 4^2P_{1/2}$. Если кубит был в состоянии $|0\rangle = |4^2S_{1/2}\rangle$, то после фокусировки лазерного пучка на ионе он перейдет в состояние $4^2P_{1/2}$. При возвращении в состояние $4^2S_{1/2}$ произойдет излучение фотона, что и дает информацию о том, что кубит в начальный момент находился в состоянии $|0\rangle$. Если же перед измерением ион был в состоянии $|1\rangle = |3^2D_{5/2}\rangle$, то лазер с $\lambda = 397$ нм не будет возбуждать перехода и излучения фотона не будет. Однако из состояния $4^2P_{1/2}$ ион может спонтанным образом также перейти на метастабильный уровень $3^2D_{3/2}$. Чтобы не происходило «пленения» иона в этом состоянии, при измерении включается еще один лазер на частоте перехода $3^2D_{3/2} \rightarrow 4^2P_{1/2}$, ($\lambda = 866$ нм), в результате действия которого ион возвращается в состояние $4^2P_{1/2}$.

Детектор фотонов имеет малый угловой размер и поэтому квантовая эффективность детектирования единичного фотона $\eta_d \ll 1$. Легко видеть, что рассматриваемые нами переходы цикличны: после возвращения иона в состояние $|0\rangle = |4^2S_{1/2}\rangle$ лазер $\lambda = 397$ нм снова переводит его в состояние $4^2P_{1/2}$, с последующим излучением фотона и переходом

вниз, в состояние $4^2S_{1/2}$. Если в ходе измерения будет излучено (рассеяно) N фотонов, на детекторе будет «зафиксировано» среднее число $n_d = \eta_d N$ фотонов. Вероятность того, что из N фотонов ни один не зафиксируется детектором равна $P_N(0) = (1 - \eta_d)^N = \exp(-n_d)$. Например, при $n_d = 10$ получим $P_N(0) = 4,5 \cdot 10^{-5}$, то есть вероятность «ложного» измерения состояния $|0\rangle$ (когда при $n_d = 0$ состояние $|0\rangle$ будет принято за $|1\rangle$) уже при $n_d > 10$ очень мала.

В случае использования рамановской схемы процедура измерения оказывается несколько более сложной [3.21]. Пусть в качестве состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ внутреннего кубита иона выбраны соответственно магнитные подуровни $M_J = -1/2$ и $M_J = 1/2$ состояния $4^2S_{1/2}$, в этом случае, например, можно поступить следующим образом. Воздействуем на ион π -импульсом, переводящим ион с подуровня $M_J = -1/2$ основного состояния иона $4^2S_{1/2}$ на подуровень $M_J = -1/2$ метастабильного состояния $3^2D_{5/2}$, затем подействуем лазерным излучением с длиной волны $\lambda = 397$ нм, возбуждающим переход $|0\rangle \rightarrow 4^2P_{1/2}$. Если перед измерением ион был в состоянии $|0\rangle$, мы будем наблюдать поляризованную по кругу флюоресценцию; если же он был в $|1\rangle$ — флюоресценции не будет. С другой стороны, поляризованное по кругу (σ^-) излучение лазера с длиной волны 393 нм может возбудить подуровень состояния $4^2P_{3/2}$ с $M_J = -3/2$, с которого разрешены переходы в состояние $|0\rangle$. Для предотвращения аналогичного возбуждения из состояния $|1\rangle$, подуровень $M_J = -1/2$ состояния $4^2P_{3/2}$ сдвигается относительно резонанса магнитным полем порядка 0,02 Тл.

Состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ кубита, построенного на фононных состояниях СОМ моды колебаний ионного кристалла $|0\rangle = |n_{ph} = 0\rangle$ и $|1\rangle = |n_{ph} = 1\rangle$, могут быть измерены путем обмена (SWAP) состояний между колебательным и внутренним кубитами, и последующего измерения состояния внутреннего кубита по описанной выше процедуре.

3.8. Лазерные системы квантового компьютера на ионах в ловушке

В квантовом компьютере лазеры используются для выполнения следующих четырех процессов:

- 1) охлаждение ионов в ловушке на основе использования эффекта Доплера, с целью образования одномерного ионного кристалла,
- 2) охлаждение ионов в ионном кристалле путем возбуждения боко-

вых полос с целью приведения коллективного движения цепочки ионов к основному состоянию (процесс инициализации),

3) выполнение квантовых логических вентилей (операций),

4) считывания результатов вычислений, то есть измерения состояния внутренних кубитов ионов.

Эти процедуры были описаны выше в основном с физической точки зрения; здесь же приведем сведения о необходимых параметрах лазеров, выполняющих эти процедуры на ионах Ca^+ [3.21].

Для охлаждения ионов в ловушке необходимы лазеры с длинами волн $\lambda = 397 \text{ нм}$ (переход $4^2S_{1/2} \rightarrow 4^2P_{1/2}$) и $\lambda = 866 \text{ нм}$ (переход $3^2D_{3/2} \rightarrow 4^2P_{1/2}$) (см. рис. 3.9). В экспериментах в Лос-Аламосе [3.21] для этого использовался титан-сапфировый лазер с длиной волны $\lambda = 866$ и он же, с удвоением частоты, как лазер с $\lambda = 397$. Интенсивность насыщения перехода $4^2S_{1/2} \rightarrow 4^2P_{1/2}$ составляла $\sim 10 \text{ мВт/см}^2$ при ширине линии лазера $\sim 10 \text{ МГц}$.

В процессе первого доплеровского охлаждения ион может из состояния $4^2P_{1/2}$ перейти на метастабильный уровень $3^2D_{3/2}$; а чтобы не происходило «пленения» иона в этом состоянии использовался второй титан-сапфировый лазер с длиной волны $\lambda = 866 \text{ нм}$ (переход $3^2D_{3/2} \rightarrow 4^2P_{1/2}$).

Второй процесс оптического охлаждения колебательного движения ионов в ионном кристалле выполняется с помощью лазеров с $\lambda = 732 \text{ нм}$ (переход $4^2S_{1/2} \rightarrow 3^2D_{3/2}$) и с $\lambda = 866 \text{ нм}$ (переход $3^2D_{3/2} \rightarrow 4^2P_{1/2}$) (рис. 3.6). Лазер с длиной волны $\lambda = 732 \text{ нм}$ должен быть настроен на боковую антистоксовскую линию $\omega_0 - \omega_z$, ω_0 — круговая частота перехода, ω_z — частота СОМ моды колебаний кристалла. Из значения $\omega_z/2\pi \cong 200 \text{ кГц}$ вытекает требование к ширине линии лазера γ , то есть $\gamma < 200 \text{ кГц}$. Для возбуждения этой боковой линии требуется также повышенная мощность лазера, так как переход на частоте ω_0 является квадрупольным. Согласно [3.21], необходимым требованием может удовлетворить титан-сапфировый лазер при контроле его частоты с помощью эталонного резонатора, при мощности $\sim 25 \text{ мВт}$. Второй лазер с $\lambda = 866 \text{ нм}$ используется с целью связывания состояний $4^2P_{1/2}$ и $3^2D_{3/2}$ для того, чтобы уменьшить эффективное время жизни состояния $3^2D_{3/2}$ и уменьшить время охлаждения.

Квантовые вентили и измерения могут быть выполнены, используя лазеры с описанными выше параметрами. Применение диодных лазеров могло бы упростить лазерную часть аппаратуры квантового компьюте-

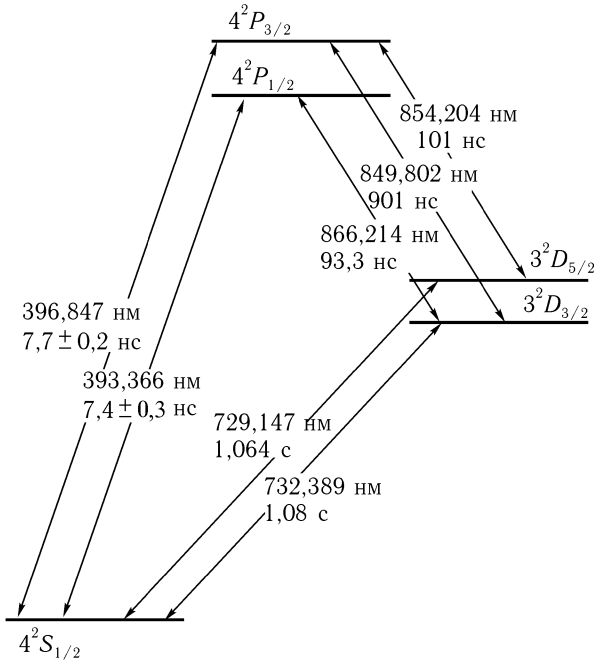


Рис. 3.6. Схема уровней энергии иона Ca⁺. Приведены времена спонтанных переходов «сверху вниз». Для электрических дипольных переходов время составляет 10–100 нс; для квадрупольного перехода гораздо больше — порядка 1 с [3.21].

ра. Длительные квантовые вычисления на компьютере требуют, чтобы время когерентности лазера было сравнимо с временем вычислений. Требование большого времени когерентности может быть легче удовлетворено при работе на кубите по рамановской схеме, так как в этом случае исключается дрейф фазы лазеров.

3.9. Оптическая система адресации к отдельным ионам в кристалле

В составе квантового компьютера должна быть оптическая система, управляющая лазерами с целью достижения следующих целей:

- 1) исполнения квантовых операций с точностью не хуже 0,1%;
- 2) быстрой переадресации лазерного пучка с одного иона на другой в кристалле, фиксации пучка на ионе, обеспечивая при этом минимальное «накрывание» (cross-talk) соседних ионов.

Схема используемой в Лос-Аламосе оптической системы приведена на рис. 3.7.

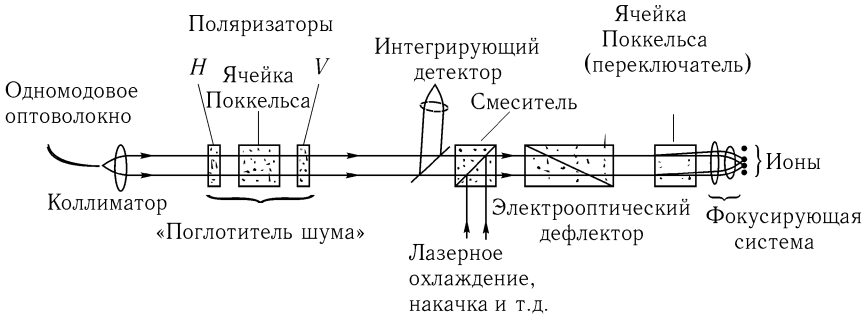


Рис. 3.7. Схема управления квантовой динамикой ионов в кристалле посредством фокусированных на отдельном ионе лазерных импульсов [3.21].

Помимо соблюдения уже рассмотренных выше ограничений, касающихся частоты и поляризации лазерного излучения, при выполнении квантовых логических операций необходимо обеспечить точный контроль за площадью (произведение интенсивности лазерного пучка на длительность импульса) используемых лазерных импульсов ($\pi/2$, π , 2π -импульсы). Для этого мощность лазера поддерживается постоянной в пределах 0,1% с помощью устройства, называемого *поглопителем шума* (noise-eater), которое представляет собой электрооптическую ячейку Поккельса, помещенную между двумя поляризаторами H и V. С помощью сигнала обратной связи от проходящего луча на выходе интегрирующего детектора производится поворот плоскости поляризации луча лазера, посредством которого регулируется коэффициент прохождения поля лазера через поляризатор V (рис. 3.7) и тем самым регулируется мощность лазерного импульса. Аналогичное устройство может служить для включения и выключения лазерного излучения за время порядка наносекунды, что определяет ширину фронта импульсов. Такая техника позволяет контролировать площадь импульсов с точностью около 0,1%.

Система адресации строится на основе электрооптического дефлектора, представляющего собой призму, коэффициент преломления которой управляется с помощью напряжения, изменяющегося в интервале ± 3000 В. Напряжение переключается за время ~ 10 нс, полный диапазон отклонения пучка лазера составляет ± 9 мрад; в пределах этого интервала можно легко достигнуть $\sim 10^2$ сфокусированных и не накрывающихся положений пучка.

Фокусирующая система с эффективной длиной фокуса 30 мм обеспечивает фокусировку пучка шириной 3 мм в пятно диаметра 10 мкм. При этом лазерный пучок должен быть наклонен под углом $\sim 10^\circ$ к нормали оси цепочки ионов для того, чтобы он имел продольную к оси кристалла составляющую. Иначе он не будет взаимодействовать с продольными колебаниями кристалла (СОМ модой). Из этого обстоятельства вытекает требование к фокусирующей системе: точки фокусирования должны лежать на наклонной линии к оптической оси системы [3.21]. Это достигается введением в систему клина с углом около 2° . Схема фокусирования в точках наклонной линии и распределение мощности лазера в различных точках фокусирования (эксперимент) показаны на рис. 3.8.

Рассмотренная схема позволяет контролировать не только интенсивность, но и поляризацию лазерного пучка.

Важной частью оптической системы является подсистема визуализации ионного кристалла. Она выводит на экран изображение отдельных ионов в кристалле, полученное путем *детектирования люминесцентных фотонов* (рис. 3.9) [3.21]. Эта система одновременно является системой считывания результатов вычислений на квантовом компьютере. Она состоит из двух линз. Линза 1 с фокусным расстоянием 15 мм, помещенная непосредственно в вакуумную камеру, собирает люминесцентное излучение ионного кристалла в телесный угол 0,25 ср. Через шлюз вакуумной камеры поток фотонов следует через узкополосный фильтр; линза 2 с фокусным расстоянием 110 мм направляет поток на вход двухуровневого усилителя изображения на основе микроканальной пластинки (МКП). С выхода микроканальной пластинки изображение воспринимается видеокамерой; далее, информация накапливается и обрабатывается компьютером.

В другом варианте лазерной адресации к индивидуальным ионам вместо МКП был использован акусто-оптический дефлектор, что позволило производить быстрое переключение лазерного пучка с отдельного

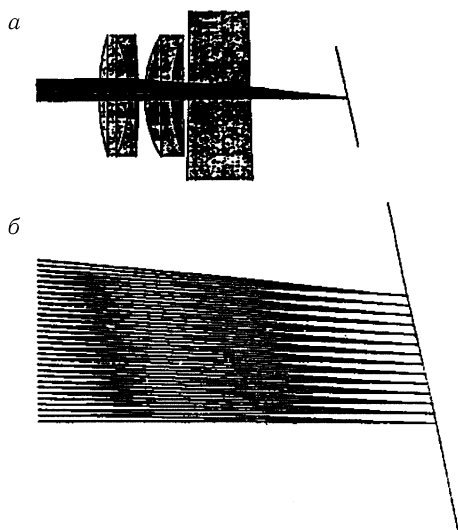


Рис. 3.8. а) Элементы оптической системы, позволяющие фокусировать лазерный луч на отдельных ионах, расположенных (в ионном кристалле) вдоль наклонной линии (ось кристалла) [3.21]. Оптический клин (справа) обеспечивает этот результат. б) Лучевое изображение фокусировки.

иона на другой с малой ошибкой для цепочек в пределах мкс, содержащих вплоть до 10 ионов [3.23].

3.10. Декогерентизация состояний в квантовом компьютере на ионах в ловушке

Благодаря взаимодействию квантовой системы квантового компьютера с «окружением» возникают процессы разрушения квантовых когерентных состояний кубитов или декогерентизация состояний квантовой системы. В ходе квантовых вычислений производится воздействие на кубиты, в результате которых они совершают управляемую квантовую эволюцию. При этом образуются различные сложные квантовые суперпозиции состояний кубитов (см. также гл. 1). Процессы декогерентизации, разрушая суперпозиции, разрушают сам процесс и результат квантовых вычислений. Поэтому декогерентизация является

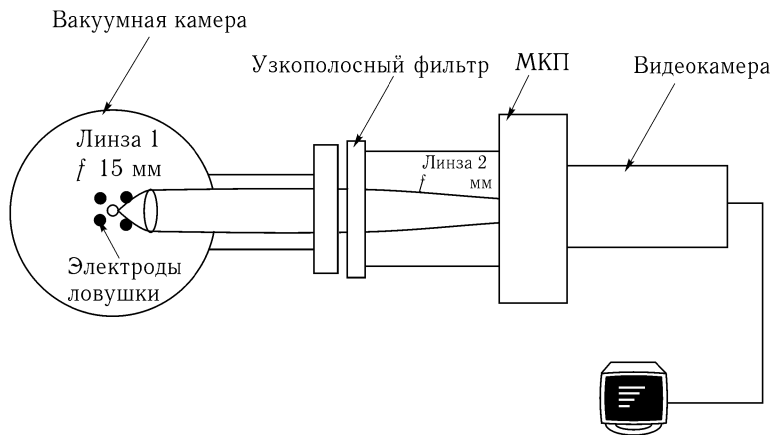


Рис. 3.9. Оптическая система для измерения квантового состояния отдельных ионов в ионном кристалле и получения изображения ионного кристалла [3.21].

одним из существенных препятствий к созданию квантового компьютера. Отсюда вытекает важность задачи исследования процессов декогерентизации в каждой квантовой системе, избранной для построения квантового компьютера.

Декогерентизация под воздействием окружения квантовой системы, происходящая в ходе вычислений, приводит к накоплению погрешностей в искомом решении. Однако погрешности в решении возникают также из-за неточного выполнения самих управляемых квантовых операций (вентилей), т. к. параметры этих операций задаются только с некоторой «физической» точностью. Поэтому целесообразно отнести к явлениям декогерентизации также и процессы, возникающие из-за отклонения от идеальности управляющих внешних полей. (По существу, это означает, что к «окружению» квантовой системы мы причисляем и самого экспериментатора с его аппаратурой, предназначенной для управления квантовой эволюцией в компьютере).

Число элементарных операций, необходимых для выполнения практически важных алгоритмов на квантовом компьютере (например, алгоритма Шора) составляет величину 109 и более. В предложенных до сего времени вариантах реализации квантовых компьютеров число элементарных операций за время декогерентизации составляет $10^3 \div 10^4$.

Поэтому необходимо, чтобы когерентность состояний в полномасштабном квантовом компьютере сохранялась в течение времени, эквивалентном превышению времени декогерентизации в 10^6 раз и более. Выход был найден в разработке специальных методов *кодирования* квантовой информации и квантовой *коррекции ошибок* (см. [3.24] и гл. 2). Оценка порогового значения погрешности при выполнении элементарных квантовых логических операций вычисления приводит к значению $\sim 10^{-5}$; при погрешности меньше порогового значения квантовые вычисления могут продолжаться сколь угодно долго, так как с помощью методов коррекции ошибок из компьютера удаляется больше ошибок чем вносится. По существу, этот вывод, следующий из теории квантовой коррекции ошибок, *является теоремой существования квантовых компьютеров*.

Очевидно, что выполнение операций кодирования квантовой информации и квантовой коррекции ошибок требуют дополнительных физических ресурсов: число кубитов должно быть увеличено примерно на порядок величины, а число выполняемых операций может возрасти в 10^2 раз [3.25]. Это означает, например, необходимость иметь в квантовом компьютере 10^4 кубитов вместо 10^3 . Как видно, при выборе физической реализации кубитов возрастают требования к возможности их *масштабируемости*, то есть увеличению их числа.

С точки зрения реализации квантового компьютера на ионах в ловушке далее рассмотрим раздельно процессы декогерентизации состояний в трех случаях: 1) декогерентизация, обусловленная не идеальностью управления кубитами с помощью лазерных импульсов, 2) декогерентизация внутренних кубитов, 3) декогерентизация колебательного кубита.

3.10.1. Декогерентизация состояний, обусловленная не идеальностью управления кубитами с помощью лазерных импульсов

Наличие возможности измерения состояния кубита по люминесцентному излучению фотонов позволяет наблюдать процесс декогерентизации кубита. Если кубит при $t = 0$ был в состоянии $|0\rangle$, то вероятность найти его в этом состоянии через время t равна

$$P_0(t) = \cos^2 \Omega t = \frac{1}{2} [1 + \cos 2\Omega t]. \quad (3.72)$$

$\Omega = PE/4\hbar$ — модуль частоты Раби осцилляций состояния кубита под воздействием резонансного лазера. Если параметры лазера флуктуируют, то наблюдаются и флуктуации частоты Раби. Усредним выражение [3.72] по распределению флуктуаций частоты Раби $D(\Omega - \Omega_0)$:

$$\langle P_0(t) \rangle = \frac{1}{2} \int [1 + \cos(2\Omega t)] D(\Omega - \Omega_0) d(\Omega - \Omega_0). \quad (3.73)$$

Для гауссовского распределения флуктуаций найдем:

$$\langle P_0(t) \rangle = \frac{1}{2} \left[1 + \cos(2\Omega_0 t) e^{-2(\Delta\Omega_{rms} t)^2} \right], \quad (3.74)$$

где $\Delta\Omega_{rms} = \langle [\Omega - \Omega_0]^2 \rangle^{1/2}$ — среднеквадратичное значение флуктуаций Ω .

За время $t = 1/\Delta\Omega_{rms}$ амплитуда осцилляций Раби уменьшится в e^{-2} раз. Это уменьшение можно трактовать как проявление декогерентизации из-за флуктуаций управляющего лазерного поля. На рис. 3.10 представлена экспериментальная кривая, полученная путем измерений вероятности нахождения ионов ${}^9\text{Be}^+$ в ловушке в состоянии $|0\rangle$ $P_0(t)$ (3.9). Затухание колебаний с частотой Раби свидетельствует о процессе декогерентизации.

3.10.2. Декогерентизация состояний внутренних кубитов на ионах в ловушке

Фундаментальный предел времени декогерентизации состояний внутреннего кубита определяется процессом радиационного распада. В качестве состояния $|0\rangle$ кубита избирается основной оптический уровень иона; время жизни иона на этом уровне равно бесконечности в условиях отсутствия внешних резонансных или флуктуирующих полей. Состоянием $|1\rangle$ кубита служит возбужденный оптический уровень иона. Если ион находится на этом уровне, имеется конечная вероятность γ спонтанного перехода иона на основной уровень иона $|0\rangle$. Причиной этих переходов являются флуктуирующие электрические поля нулевых колебаний вакуума. Эти процессы изучены очень хорошо в физике. Если между уровнями энергии $|1\rangle$ и $|0\rangle$ разрешен электрический дипольный переход, вероятность радиационного распада уровня $|1\rangle$ за 1 с равна $\gamma_{dip} = 7,5 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$. Она определяет радиационную ширину

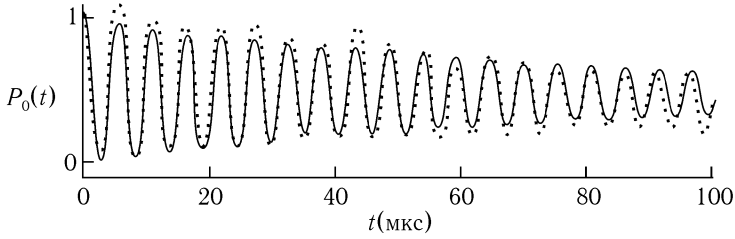


Рис. 3.10. Экспериментальное наблюдение процессов декогерентизации [3.9]. Ион в начальный момент $t = 0$ находится в состоянии $|0\rangle$. В этот момент включается резонансное лазерное поле и начинаются колебания Раби — переходы между уровнями $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Благодаря декогерентизации с течением времени к состояниям $|0\rangle$ и $|1\rangle$ примешиваются другие состояния.

линии в оптическом спектре иона. В этом случае время декогерентизации состояния $\tau_{dc} \cong 10^{-8}$ с, то есть очень коротко. Поэтому, в качестве состояния $|1\rangle$ внутреннего кубита избирают метастабильный уровень энергии, с которого на уровень $|0\rangle$ разрешены радиационные переходы только квадрупольного типа.

Вероятность квадрупольного перехода меньше вероятности дипольного перехода в $(a_0/\lambda)^2 \cong 10^{-8}$ раз, где a_0 — боровский радиус. Это означает, что время декогерентизации состояния $|1\rangle$ будет составлять примерно 1 с, если избрать в качестве состояния $|1\rangle$ кубита метастабильный уровень энергии с квадрупольным переходом $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$.

Наконец, рассмотрим радиационный распад в системе магнитных подуровней основного оптического состояния иона, избираемых в качестве состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ кубита (рамановская схема управления лазерными импульсами). В этом случае вероятность перехода содержит матричный элемент магнитного момента иона:

$$\gamma = \omega_0^3 |\langle 1 | \vec{\mu} | 0 \rangle|^2 / (3\pi\epsilon_0 \hbar^5). \quad (3.75)$$

Приняв $\omega_0/2\pi = 10$ ГГц, $|\langle 1 | \vec{\mu} | 0 \rangle| = \mu_B$ (магнетон Бора), найдем $\gamma = 10^{-12} \text{ с}^{-1}$. Как видим, радиационной декогерентизацией в этом случае можно пренебречь из-за слабости этого процесса.

Параллельно с процессом радиационной декогерентизации идут процессы декогерентизации, обусловленные флуктуирующими магнитными и электрическими полями внешних источников на ионе. Эти поля вызывают дополнительные сдвиги уровней энергии иона (зеemanовс-

кий и штарковские эффекты), обуславливая флуктуации частоты перехода [3.9]:

$$\omega_0 + \delta\omega_B = \omega_0 + \left[\frac{\partial\omega}{\partial B} \right]_{B_0} (B - B_0) + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2\omega}{\partial B^2} \right]_{B_0} (B - B_0)^2, \quad (3.76)$$

$$\omega_0 + \delta\omega_E = \omega_0 + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2\omega}{\partial E^2} \right]_{E=0} E^2. \quad (3.77)$$

Флуктуирующие магнитные и электрические поля могут быть обусловлены флуктуациями токов и зарядов на электродах ловушки, на других элементах оборудования. Для зеемановских сдвигов уровней $\partial\omega/\partial B \cong \mu_B/\hbar = 2\pi 10^{10}$ Гц/Тл, и $\delta\omega/2\pi = 10^6$ Гц при $(B - B_0)/B_0 \cong 10^{-4}$, $B_0 = 1$ Тл. Таким образом, магнитный (зеемановский) кубит оказывается очень чувствительным к флуктуациям магнитного поля. Можно выбрать магнитный переход $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ так, чтобы эффект Зеемана первого порядка был равен нулю: $\partial\omega/\partial B = 0$. Однако в процессах вычислений участвуют также переходы с уровней кубита на вспомогательный уровень $|aux\rangle$. Реализовать для двух (или более) переходов одновременно условие $\partial\omega/\partial B = 0$ невозможно. Очевидным остается способ тщательной магнитной *экранировки* ионов. Однако и этого нельзя сделать в отношении полей, создаваемых токами на электродах ловушки.

Анализ показывает, что декогерентизация благодаря флуктуирующим электрическим полям менее эффективна, чем декогерентизация благодаря флуктуирующим магнитным полям. Штарковские смещения специфичны для каждого уровня; поэтому оценки их влияния следует делать для каждого уровня иона отдельно [3.9].

3.10.3. Декогерентизация состояний колебательного кубита на ионах в ловушке

С колебательной СОМ модой связан большой электрический дипольный момент. Действительно, продольные (вдоль оси z) колебания цепочки заряженных ионов эквивалентны колебательному току в проволочной антенне; такой диполь излучает электромагнитные волны на длине волны $\lambda = \lambda/v = 5 \cdot 10^4$ см, при $v = 500$ кГц. Как мы видели, в логических операциях квантового компьютера используются со-

стояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ с числом колебательных фононов $n_{ph} = 0$ и 1 соответственно. Поэтому неуправляемые переходы $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ и переходы с этих уровней на другие, возбужденные уровни с $n_{ph} > 1$, будут представлять собой декогерентизацию. Переходы $|0\rangle \rightarrow |n_{ph}1\rangle$ можно рассматривать как *нагревание* колебательного движения.

Благодаря неравенству $\lambda \gg 2Z_0$, где λ — длина электромагнитной волны излучения на частоте СОМ моды, электрический дипольный осциллятор, соответствующий СОМ моде, можно выразить с помощью эквивалентной электрической схемы [3.9]. Из анализа затухания в такой схеме можно получить:

$$t^* = \frac{1}{\pi\gamma} = \frac{4m\hbar\omega_z}{q^2 S_E(\omega_z)}, \quad (3.78)$$

где

$$S_E(\omega_z) = 4k_B T r \cdot (\alpha/2Z_0)^2, \quad (3.79)$$

t^* — время затухания электрического осциллятора СОМ моды; $4k_B T r = S_U(\omega_z)$ — *джонсоновский* тепловой шум (спектральная плотность шумового напряжения), связанный с эффективным сопротивлением системы электродов, создающих электрическое поле ловушки, α — геометрический безразмерный коэффициент порядка единицы. Вычисленное согласно (3.79) время t^* оказалось длиннее экспериментального значения в 10^2 раз [3.9]. Анализ ряда других механизмов декогерентизации (нагрев колебаний под действием радиочастотных токов на электродах ловушки, взаимодействие различных мод колебаний, полевая эмиссия с электродов, столкновения с молекулами остаточного газа) показал, что, вероятно, наиболее сильным механизмом декогерентизации колебаний СОМ моды является описанный выше формулой (3.78) механизм.

3.11. Точность воспроизведения квантовых логических операций и аккумулярование ошибок при квантовых вычислениях

При квантовых вычислениях вектор начального состояния $\psi(0)$ квантового регистра преобразуется в некоторый конечный вектор $\psi_f = \hat{U}\psi(0)$, где \hat{U} — унитарный оператор, выполняющий заданный алгоритм вычислений. Поскольку параметры лазерных управляющих им-

пульсов заданы не идеально, то есть не с абсолютной точностью, реальный оператор преобразования U отличается от идеального: $\widehat{U} \neq \widehat{U}_{ideal}$. Соответственно, будут отличаться от идеальных и результаты реальных вычислений.

Вероятность найти состояние, соответствующее двоичному L -битовому числу k , в идеальном случае имеет вид:

$$P_k^{ideal} = |A_k|^2 = |\langle k|U_{ideal}\psi(0)\rangle|^2. \quad (3.80)$$

Аналогичное выражение можно записать и для реального процесса вычисления:

$$P_k = |B_k|^2 = |\langle k|U\psi(0)\rangle|^2, \quad (3.81)$$

Комплексные числа A_k , B_k представляют собой амплитуды разложения вектора конечного состояния по собственным функциям $|k\rangle$ L -кубитного квантового регистра. Критерий *точности воспроизведения* (fidelity) квантовых вычислений определяется следующим образом [3.9] (см. также гл. 1):

$$F = \langle |\langle U_{ideal}\psi(0)|U\psi(0)\rangle|^2 \rangle = \left\langle \left| \sum_{k=0}^{2^L-1} A_k B_k^* \right|^2 \right\rangle, \quad (3.82)$$

где внешнее усреднение выполняется по распределению случайных переменных, содержащихся в матрице U . Если вычисление идеально, $F = 1$; в противном случае $F < 1$.

Рассмотрим идеальное квантовое вычисление, состоящее из M элементарных операций, представляющих повороты векторов состояния кубитов квантового компьютера в гильбертовом пространстве

$$O_{ideal} = R_{M0}R_{(M-1)0}\dots R_{20}R_{10}. \quad (3.83)$$

Соответственно, реальное вычисление описывается оператором

$$O_a = R_{Ma}R_{(M-1)a}\dots R_aR_{1a}. \quad (3.84)$$

Оператор поворота R_{ka} отдельной k -й элементарной вычислительной операции содержит амплитудные (ζ_k) и фазовые (φ_k) ошибки:

$$R_{ka}(\Theta_k + \zeta_k, \varphi_k) = \begin{pmatrix} \cos(\Theta_k + \zeta_k) & -ie^{-i\varphi_k} \sin(\Theta_k + \zeta_k) \\ -ie^{-i\varphi_k} \sin(\Theta_k + \zeta_k) & \cos(\Theta_k + \zeta_k) \end{pmatrix}. \quad (3.85)$$

Матрица преобразования O_a (3.84) отличается от O_{ideal} наличием набора малых погрешностей ζ_k , $\varphi_k \ll \pi$. Для точности воспроизведения F получим [3.9]

$$F \cong 1 - \sum_{k=0}^M [C_{k1}\zeta_k^2 + C_{k2}\zeta_k\varphi_k + C_{k3}\varphi_k^2], \quad (3.86)$$

где $C_{ki} \ll 1$, $i = 1, 2, 3$.

В случае сложных вычислений, включающих большое число M вентилей (операций) в большом гильбертовом пространстве, погрешности ζ и φ можно считать случайными (некоррелированными) величинами. Поэтому

$$F = 1 - M(F_{\zeta\zeta}\langle\zeta\rangle^2 + F_{\zeta\varphi}\langle\zeta\varphi\rangle + F_{\varphi\varphi}\langle\varphi\rangle^2), \quad (3.87)$$

где $F_{ij} \leq 1$.

Выражение (3.87) свидетельствует о том, что погрешность вычисления возрастает пропорционально числу M элементарных операций, то есть происходит *аккумуляция* погрешностей. Если, например, амплитудная ошибка ζ в элементарной операции составляет 10^{-4} , $\zeta^2 = 10^{-8}$, то максимальное значение числа элементарных операций $M_{\max} \sim 108$. Если ошибки складываются когерентно (коррелированно), уменьшение точности вычислений будет идти еще быстрее.

Угол поворота Θ и фаза φ зависят от частоты Раби $\Omega(t)$ и расстройки $\Delta(t) = \omega_0(t) - \omega$ частота лазера ω от частоты перехода ω_0 согласно формулам

$$\Theta(t) = 2 \int_0^t \Omega(t') dt', \quad (3.88)$$

$$\varphi(t) = \int_0^t \Delta(t') dt'. \quad (3.89)$$

Интегрирование в (3.88) и (3.89) выполняется в пределах длительности лазерного импульса. От формул (3.88) и (3.89) можно перейти к флуктуациям поля лазера, поскольку $\Omega(t) = PE(t)/4\hbar$ и именно флуктуации поля $E(t)$ определяют флуктуации частоты Раби. В схеме стабилизации лазерной мощности с помощью делителя пучка флуктуации

мощности на ионе определяются формулой [3.9]

$$\frac{\delta P_u}{P_u} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{P_u \tau_{op} \eta_{det} \varepsilon (1 - \varepsilon)}}, \quad (3.90)$$

где $\eta_{det} < 1$ — квантовая эффективность фотодетектора, воспринимающего мощность εP_0 лазера в схеме управления, $(1 - \varepsilon)P_0$ — мощность, посылаемая на ион. Для оценки примем: $\varepsilon = 0,5$, $\lambda = 313$, $\eta_{det} = 0,5$; тогда $\delta P_u/P_u = 2,3 \cdot 10^{-9} (P_u \tau_{op})^{-1/2} = 2,3 \cdot 10^{-5}$ при $P_u = 10$ мВт и $\tau = 1$ мкс. При практической реализации уровень шума лазерной мощности будет выше из-за дополнительных источников шума. В целом можно сделать вывод, что требования к параметрам лазерных систем, используемым в квантовых компьютерах, должен быть значительно выше достигнутого в лабораторной практике уровня.

3.12. Основные выводы

Как можно установить из изложенного выше, технология квантового компьютера на ионах в ловушке изучена весьма детально. Какие же выводы можно сделать в отношении возможности построения полномасштабного — $10^3 - 10^4$ кубитов — квантового компьютера на ионах в ловушке?

К сожалению, вывод приходится делать отрицательный.

1) *Главным препятствием* на пути построения полномасштабного квантового компьютера — $10^3 - 10^4$ кубитов — на ионах в ловушке Пауля, по-видимому, является *неустойчивость линейного ионного кристалла*. Как мы видели, число ионов в кристалле достигает только нескольких десятков (например, 33 иона Hg^+), что явно недостаточно для полномасштабного компьютера. Анализ литературы, посвященной вопросам устойчивости линейного ионного кристалла в ловушке Пауля, указывает на необходимость дальнейшего изучения этого вопроса. Можно задаться, например, вопросом: возможны ли трехмерные ионные кристаллы? Или, можно ли усовершенствовать ловушки так, чтобы существовали трехмерные ионные кристаллы?

2) *Другой* усложняющей построение квантового компьютера *особенностью* ионных кристаллов является электрическая *заряженность*

носителей кубитов-ионов. С одной стороны, заряженность ионов необходима, чтобы фиксировать в пространстве холодные ионы, воздействуя на них электрическими полями. С другой, наличие заряда ионов означает их сильное электрическое взаимодействие с окружением, то есть наличие сильных каналов декогерентизации.

3) *Третья особенность* квантового компьютера на ионах в ловушке — взаимодействие внутренних кубитов ионов через вспомогательный кубит, связанный с колебательной СОМ модой ионного кристалла. Этот вспомогательный кубит является, по-видимому, достаточно «хрупким» объектом; он подвержен сильной декогерентизации (колебательное движение ионного кристалла нагревается по многим каналам воздействия извне), так что при работе квантового компьютера неизбежно потребуется процедура лазерного охлаждения колебаний.

По-видимому, с перечисленными (и, возможно, еще и другими) сложностями в управлении квантовой эволюцией кубитов в компьютере на ионах в ловушке связано отсутствие быстрого прогресса в развитии экспериментальных работ по созданию этого компьютера.

С другой стороны, проект компьютера на ионах в ловушке имеет и большие *выигрышные особенности*. Он опирается на ряд высокоразвитых технологий: технологию высокого вакуума, технологию электрических ловушек, технологию лазерного замораживания поступательного и колебательного движения ионов, технологию лазерного селективного управления эволюцией кубитов. Все это было продемонстрировано выше. Наконец, выдающимся достижением этого проекта является разработка метода измерения состояния отдельных кубитов. Применение лазерных методов охлаждения освобождает от применения традиционных методов криогенной техники. По-видимому, трудно представить себе, как можно было бы охлаждать ионные «кристаллы», «висящие» в вакууме, «погружая» их в криогенные жидкости. Очевидно, каналом теплопередачи в такой ситуации может быть только радиационный теплоперенос.

Заметим, что на примере цепочки из двух кубитов была теоретически рассмотрена принципиальная возможность осуществления двухкубитовых квантовых операций на ионах в ловушках и при *ненулевой* температуре путем расщепления атомных волновых пакетов подобно тому как это делается в атомной интерферометрии. При определенных условиях в этом случае осуществление квантовых операций не зависит от состояния движения ионов и поэтому не требует нулевых темпера-

тур [3.25]. Однако обобщение этих результатов на цепочку из многих кубитов является проблематичным.

В литературе обсуждаются технологии, которые позволили бы увеличить число ионов и кубитов в квантовом компьютере на ионах в ловушке. Одной из возможностей является хранение ионов в большом числе ловушек (в ионных аккумуляторах), с тем чтобы последовательно перемещать их в «реактор», в котором выполняются операции над одним или двумя кубитами-ионами [3.26]. Перемещение ионов может совершаться с помощью электрических потенциалов на сегментированных электродах, изготовленных литографическими методами. Очевидным недостатком этого метода являются «непроизводительные» затраты времени на перемещение ионов [3.9]. Обсуждаются также возможности использования большего числа состояний в одном ионе (несколько кубитов на одном ионе) или использование водородоподобных ионов с большим зарядом Z [3.9]. В последнем случае величина сверхтонких расщеплений оказывается в оптической области: $\omega_{hfs} \sim Z^3$. Указано также на возможность настройки резонансной частоты кубитов с помощью электрических напряжений на секционированных электродах ловушки. В этом случае можно облучать лазером весь ионный кристалл; при этом только настроенный в резонанс ион совершает квантовую эволюцию [3.27]. Все эти предложения по совершенствованию квантового компьютера на ионах в ловушке пока остаются умозрительными.

Выше мы рассмотрели оптические методы пленения нейтральных атомов. Оптические решетки, созданные трехмерной стоячей волной, образованной шестью попарно взаимно-встречными лазерными пучками, образуют *трехмерную ловушку* для нейтральных атомов с периодом порядка длины волны лазерного излучения $\sim 0,5$ мкм. При 100% заполнении ловушки нейтральными лазерно-охлажденными атомами мы имеем подобие трехмерного атомного кристалла (с тем отличием, что в образовании этого квазикристалла межатомные силы не участвуют, как это имеет место в ионном кристалле). Трехмерная решетка из нейтральных атомов в оптической ловушке может служить квантовой системой для построения квантового компьютера [3.28–3.30]. Система нейтральных атомов взаимодействует с окружением более слабыми межатомными силами, чем ионный кристалл; поэтому процессы декогерентизации будут более слабыми. В работах [3.28–3.30] предлагается использовать индуцированные диполь-дипольные силы взаимодействия

между атомами для выполнения двухкубитных операций типа CNOT. При этом оказалось возможным обойтись без использования колебательных мод в качестве вспомогательного кубита.

Возможности построения полномасштабного квантового компьютера на нейтральных атомах в оптической решетке (ловушке) выглядят на сегодняшний день очень привлекательными. Это предложение в дальнейшем заслуживает самой тщательной разработки. В [3.31] выполнены эксперименты по использованию оптических решеток в качестве оптических масок в атомной литографии.

Литература

- [3.1] *DiVincenzo D. P., Burkhard G., Loss D., Sukhorukov E. V.* Quantum Computation and Spin Electronics // LANL E-print: 1999, cond-mat/9911245, 28 p.
- [3.2] *Cirac J. I., Zoller P.* Quantum Computations with Cold Trapped Ions // Phys. Rev. Lett. 1995, v. 74, № 20, pp. 4094–4097.
- [3.3] *Monroe C., Meekhof D. M., King B. E., Itano W. M., Wineland D. J.* Demonstration of a Fundamental Quantum Logic Gate // Phys. Rev. Lett. 1995, v. 75, № 25, pp. 4714–4717.
- [3.4] *Dehmelt H.* Experiments on the Structure of an Individual Elementary Particle // Science, 1999, v. 247, № 2, pp. 539–545.
- [3.5] *Brown L. S. Gabrielse G.* Geonium Theory: Physics of a Single Electron or Ion a Penning Trap // Rev. Mod. Phys., 1986, v. 58, № 1, pp. 233–311.
- [3.6] *Paul W.* Electromagnetic Traps for Charged and Neutral Particles // Rev. Mod. Phys. 1990, v. 62, № 3, pp. 531–540.
- [3.7] *Тамм И. Е.* Основы теории электричества. — М.: ГИТТЛ, 1954, 620 с.
- [3.8] *Raizen M. G., Gilligan J. M., Bergquist J. C., Itano W. M., Wineland D. J.* Ionic Crystals in a Linear Paul Trap // Phys. Rev. 1992, v. A45, № 9, pp. 6493–6501.
- [3.9] *Wineland D. J., Monroe C., Itano W. M., Leibfried D., King B. E., Meekhof D. M.* Experimental Issues in Coherent Quantum-State Manipulation of Trapped Atomic Ions // Jour. Res. Natl. Inst. Stand. Tech. 1998, v. 103, № 3, pp. 259–328.
- [3.10] *Янке Е., Эмде Ф.* Таблицы функций с формулами и кривыми / Перев. с немец. под ред. Л. И. Седова и Г. В. Толстовой — М.–Л.: ГИТТЛ, 1949. 429 с.

- [3.11] *Garg A.* Vibrational Decoherence in Ion-Trap Quantum Computers // LANL E-print: 1998, quant-ph/9803071.
- [3.12] *Meyrath T. D., James D. F. V.* Theoretical and Numerical Studies of the Positions of Cold Trapped Ions // *Physics Letters*, 1998, v. A240, pp. 37–42.
- [3.13] *James D. F. V.* Quantum Dynamics of Cold Trapped Ions with Application to Quantum Computation // *Appl. Phys.*, 1998, v. B66, pp. 181–190.
- [3.14] *Коэн-Тануджи К. Н.* Управление атомами с помощью фотонов // *УФН*, 1999, т. 169, № 3, с. 292–30.
- [3.15] *Чу С.* Управление нейтральными частицами // *УФН*, 1999, т. 169, № 3, с. 274–291.
- [3.16] *Филлипс У. Д.* Лазерное охлаждение и пленение нейтральных атомов // *УФН*, 1999, т. 169, № 3, с. 305–322.
- [3.17] *Филлипс У. Д., Меткалф Г. Дж.* Охлаждение и локализация ионов // *В мире науки*, 1987, № 5; *Scientific American*, 1987, v. 256, № 3.
- [3.18] Развитие методов охлаждения и пленения атомов с помощью лазерного света. Информация Нобелевского комитета // *УФН*, 1999, т. 169, № 3, с. 271–273.
- [3.19] *Балыкин В. И., Летохов В. С., Миногин В. Г.* Охлаждение атомов давлением лазерного излучения // *УФН*, 1985, т. 147, вып. 1, с. 117–156.
- [3.20] *Wineland D. J., Itano W. M.* Laser Cooling of Atoms // *Phys. Rev.*, 1979, v. A20, № 4, pp. 1521–1540.
- [3.21] *Hughes R. J., James D. F. V., Gomez J. J., Gulley M. S., Holzscheiter M., Kwiat P. G., Lomoreaux S. K., Peterson C. G., Sandberg V. D., Schauer M. M., Simmons C. M., Thorburn C. E., Tura D., Wang P. Z., White F. G.* The Los Alamos Trapped Ion Quantum Computer Experiment // *Fortschr. Phys.* 1998, v. 46, № 4–5, pp. 329–361.
- [3.22] *Allen L., Eberly J. H.* Optical Resonance and Two-Level Atoms // N.Y.-Lond.: John Wiley & Sons, 1975. / *Аллен Л., Эберли Дж.* Оптический резонанс и двухуровневые атомы. / Перев. с англ. под ред. В. Л. Стрижевского. — М.: Мир, 1978, 222 с.
- [3.23] *Nagerl H. C., Leibfried D., Thalhammer G., Escher J., Schmidt-Kaler F., Blatt R.* Laser Addressing of Individual Ions in a Linear Ion Trap // *Phys. Rev.* 1999, v. A60, № 1, pp. 145–148.
- [3.24] *Steane A. M.* Quantum Computing // *Rep. Progr. Phys.* 1998, v. 61, pp. 117–173.
- [3.25] *Poyatos J. F., Cirac J. I., Zoller P.* Quantum Gates with «Hot» Trapped Ions // *Phys. Rev. Lett.* 1998, v. 81, № 6, pp. 1322–1325.

- [3.26] *Leibfried Y. D.* Individual Addressing and State Readout of Trapped Ions Utilizing RF-Micromotion // LANL E-print: 1998, quant-ph/9812033.
- [3.27] *Brewer R., DeVoe R. G., Kallenbach R.* // Phys. Rev., 1992, v. A46, p. R6781.
- [3.28] *Brennen G. K., Caves C. M., Jessen S., Deutsch I. H.* Quantum Logic Gates in Optical Lattices // LANL E-print: 1998, quant-ph/9806021, v. 3, 9 p.
- [3.29] *Brennen G. K., Deutsch I. H., Jessen P. S.* Entangling Dipole-Dipole Interactions and Quantum Logic in Optical Lattices // LANL E-print: 1999, quant-ph/9910031, 43 p.
- [3.30] *Briegel H. J., Calarco T., Jackch D., Cirac J. I., Zoller P.* Quantum Computing with Neutral Atoms // LANL E-print: 1999, quant-ph/9904010, 21 p.
- [3.31] *Bell A. S., Bresger B., Drosdofsky U., Nowak S., Pfau T., Stuhler J., Schulze Th., Mlynek J.* // Surface Science, 1999, v. 433, № 43, pp. 40–47.

ГЛАВА 4

**ЖИДКОСТНЫЕ ЯДЕРНЫЕ
МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНЫЕ (ЯМР)
КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ**

«Пожалуй, ни один метод изучения магнитных свойств вещества не давал еще такую богатую информацию, как найденный Завойским резонансный».

П. Л. Капица

4.1. Общие принципы

Одними из наиболее естественных кандидатов на роль кубитов являются, пожалуй, *ядерные спины* $I = 1/2$. Эта глава посвящена изложению основных результатов, полученных к началу XXI века в направлении реализации ядерных магнитно-резонансных (ЯМР) квантовых компьютеров.

Поскольку практически трудно, хотя и не невозможно (см. последующую главу) осуществлять логические операции, обращаясь к отдельным ядерным спинам, прежде всего был использован наиболее простой подход, в котором логические операции производятся над макроскопическим образцом, представляющим собой *большой ансамбль* идентичных структур — молекул, содержащих ядерные спины.

Такой подход к реализации квантовых компьютеров на ядерных спинах, предложенный в 1997 году одновременно двумя группами американских физиков [4.1, 4.2] и затем подтвержденный ими экспериментально [4.3, 4.4], состоит в использовании непарамагнитных *органических жидкостей*. В качестве такой жидкости рассматривался, в частности, раствор хлороформа $^{13}\text{CHCl}_3$ в дейтерированном ацетоне $(\text{CD}_3)_2\text{CO}$ [4.3], где отдельные молекулы с *двумя* связанными между

собой неэквивалентными ядерными кубитами (ядро изотопа ^{13}C и протон ^1H) играют роль практически изолированных от влияния окружающей среды *независимых* квантовых компьютеров. Это свойство обусловлено тем, что ядерные спины $I = 1/2$ не взаимодействуют с электрическими полями, создаваемым окружением, а благодаря интенсивному вращательному и поступательному броуновскому движению молекул в жидкости происходит в значительной мере усреднение диполь-дипольных магнитных взаимодействий как внутри молекул, так и с молекулами окружения. Соответственно, время декогерентизации спиновых состояний в жидкости оказывается достаточно большим (секунды и более). Неусредненной остается лишь *скалярное взаимодействие* между ядерными спинами внутри молекул, описываемое гамильтонианом вида $2 \sum_{i < j} I_{ij} (\hat{I}_i \hat{I}_j)$, где I_{ij} — постоянная этого взаимодействия. В случае хлороформа такая связь существенна только для ядерных спинов протона ^1H и углерода ^{13}C . Наличие этого взаимодействия и обеспечивает возможность двухкубитовых квантовых операций.

В таком компьютере огромное число молекул-компьютеров действует параллельно, обеспечивая тем самым возможность управления ими с помощью хорошо известных в технике ядерного магнитного резонанса операций над всем макроскопическим *объемом* жидкости. Последовательности радиочастотных импульсов, выполняющие в этом случае роль определенных квантовых логических вентилях, осуществляют глобальные унитарные преобразования состояний соответствующих ядерных спинов для всех молекул-компьютеров большого ансамбля. Обращение к отдельным кубитам заменяется одновременным обращением к соответствующим кубитам во всех молекулах *большого ансамбля*. Компьютер такого рода получил название *ансамблевого* (bulk-ensemble quantum computer). Он может в принципе работать при комнатной температуре. Недостатком такого компьютера является доступность для измерения (считывания результата) наблюдаемых состояний не отдельных ядерных спинов, а лишь средних по ансамблю значений. Для магнитных полей, используемых в стандартных ЯМР-спектрометрах (десятки Тесла), относительная поляризация спинов, определяющая создаваемый сигнал, как будет видно из дальнейшего, оказывается очень малой даже при гелиевых температурах. Кроме того, число достаточно хорошо различимых по резонансной частоте ядерных спинов в молекуле ограничено, а интенсивность сигнала ЯМР быстро падает с числом кубитов. Поэтому вряд ли можно ожидать, что число куби-

тов L в ансамблевом квантовом компьютере на органической жидкости, работающем при комнатной температуре, будет больше 30. Ниже мы остановимся на этом вопросе подробнее.

Благодаря слабой связи ядерных спинов молекул с окружением в жидкости вместо рассмотрения всего большого ансамбля, состоящего из громадного числа ядерных спинов всех молекул жидкости, оказывается возможным перейти к рассмотрению *приведенного квантового ансамбля*, включающего лишь ядерные спины только отдельной молекулы. Характерным для указанного подхода является то, что этот ансамбль при конечных температурах неизбежно находится в *смешанном* состоянии, описываемом матрицей плотности с размерностью 2^L , у которой в отличие от матрицы плотности чистого состояния отличны от нуля не одно, а 2^L собственных значений, имеющих смысл *населенностей* соответствующих базисных состояний. Образование смешанного состояния для приведенного состояния обусловлено наличием слабого, но не отсутствующего совсем, взаимодействия отдельных молекул с окружающим резервуаром с очень большим числом степеней свободы. Это то взаимодействие, которое определяет в реальных системах процессы декогерентизации и диссипации.

Конечный результат на выходе ансамблевого компьютера описывается матрицей плотности $\hat{\rho}_{out}$, которую формально можно представить в виде следующего неунитарного преобразования начального смешанного состояния, описываемого матрицей плотности $\hat{\rho}_0$ [4.5]:

$$\hat{\rho}_{out} = \sum_{i,j} \hat{R}_i \hat{C} \hat{P}_j \cdot \hat{\rho}_0 \cdot \hat{P}_j^+ \hat{C}^+ R_i^+ = \hat{T} \hat{\rho}_0, \quad (4.1)$$

где $\hat{P}_j, \hat{C}, \hat{R}_i$ — соответственно, *неунитарный* оператор приготовления начального состояния, действующий на j -й спин-кубит (*инициализация*), оператор *унитарных* вычислительных процедур и *неунитарный* оператор измерения конечного состояния i -го кубита,

$$\hat{T} = \sum_{i,j} \hat{R}_i \hat{C} \hat{P}_j \cdot \hat{P}_j^+ \hat{C}^+ R_i^+ \quad (4.2)$$

— соответствующий неунитарный *супероператор*, преобразующий одну матрицу плотности в другую. В супероператор, вообще говоря, могут быть включены также неунитарные операторы, описывающие вклад шумов, диссипацию и декогерентизацию квантовых состояний.

Здесь уместно отметить работу Д. Ааронова, А. Китаева и Н. Нисана [4.6], в которой обсуждается возможность построения квантовых схем, работающих непосредственно со смешанными состояниями и использующих *обобщенные неунитарные* квантовые вентили, выполняющие логические операции, описываемые супероператорами. Это позволяет в принципе охватить *единым* описанием такие процессы, которые трудно или невозможно описать в рамках унитарной модели. Это, например, необратимые процессы измерения, а также процессы декогерентизации и квантовые шумы. Однако обсуждение этих вопросов требует привлечения специальных математических понятий и выходит за рамки данной книги.

Для простоты неунитарные операции измерения далее учитывать не будем и примем $\hat{R}_i = \hat{1}$.

4.2. Матрица плотности квазичистого состояния

4.2.1. Переход от смешанного равновесного состояния к квазичистому состоянию

Детальный обзор современного состояния работ по ЯМР квантовым компьютерам в жидкости был недавно опубликован Дж. Джонсом [4.7], в котором детально проанализированы основные трудности, встречающиеся на пути реализации таких компьютеров, и обсуждаются перспективы жидкостных ЯМР квантовых компьютеров. Некоторые положения и выводы этого обзора рассмотрены в этой главе.

Процесс инициализации, как уже отмечалось в гл.3, состоит в переводе состояния квантового регистра в исходное состояние вида $|0_1, 0_2, \dots, 0_L\rangle$. В случае квантового компьютера на ионах в ловушке это достигается путем охлаждения системы до микрокельвиновых температур. Смешанный характер квантового состояния спиновых кубитов в жидкости требует совершенно другого способа инициализации, поскольку сверхглубокое охлаждение заморозит любую жидкость. Таким способом оказалось преобразование смешанного состояния с помощью определенной неунитарной операции к так называемому эффективному или *квазичистому* (pseudo-pure)¹ состоянию, которое по отношению к логическим квантовым операциям ведет себя подобно чистому состоянию.

¹В литературе встречаются названия: effective pure states [4.1, 4.3, 4.5], pseudo-pure states [4.2, 4.4, 4.8].

Рассмотрим случай достаточно высоких температур, когда начальное смешанное состояние системы независимых молекул с N спинами описывается матрицей (оператором) плотности вида [4.1]:

$$\hat{\rho}_0 = 2^{-N} \cdot \hat{1} + \hat{\rho}_\Delta, \quad (4.3)$$

где $\hat{1}$ — 2^N -мерная единичная матрица, а $\hat{\rho}_\Delta$ — *девиация* матрицы плотности, которая представляет собой малое отклонение от матрицы плотности максимально смешанного состояния с однородным распределением населенностей, описываемого первым слагаемым в (4.3). Девиация матрицы плотности имеет след, равный нулю.

В простейшем случае при тепловом равновесии девиация матрицы плотности имеет вид

$$\hat{\rho}_\Delta = -\hat{H}/4kT, \quad (4.4)$$

где \hat{H} — гамильтониан спиновой системы молекулы.

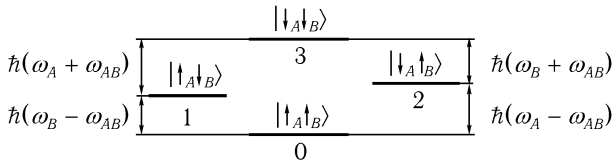


Рис. 4.1. Энергетическая диаграмма связанной двухспиновой системы при $\omega_{A,B}, \omega_{AB} > 0$.

Рассмотрим в качестве примера случай жидкости, состоящей из молекул с двумя неэквивалентными ядерными спинами I_A и I_B ($I = 1/2$). В результате усредняющего вращательного броуновского движения молекул между спинами остается только связь, определяемая скалярным произведением операторов спинов $2I_{AB}(\hat{I}_A \otimes \hat{I}_B)$. Гамильтониан системы двух спинов с резонансными частотами $\omega_{A,B} = \gamma_{A,B}B$, где $\gamma_{A,B}$ — гироманнитные отношения ядерных спинов, в поле B , направленном по оси z , в случае *слабой* связи, то есть при $\hbar|\omega|_{A,B} \gg I_{AB} \equiv \hbar\omega_{AB} > 0$, представляется в виде матрицы 4×4 , которая соответствует модели Изинга:

$$\hat{H} = -\hbar\omega_A(\hat{I}_{Az} \otimes 1_B) - \hbar\omega_B(1_A \otimes \hat{I}_{Bz}) + 2\hbar\omega_{AB}(\hat{I}_{Az} \otimes \hat{I}_{Bz}), \quad (4.5)$$

где $\hat{I}_z = 1/2\hat{\sigma}_z$ — z-компонента оператора спина. Схема расположения энергетических уровней такой молекулы с четырьмя разрешенными квантовыми переходами изображена на рис. 4.1.

В базисе собственных двухспиновых состояний $|\uparrow_A\uparrow_B\rangle \equiv |00\rangle$, $|\uparrow_A\downarrow_B\rangle \equiv |01\rangle$, $|\downarrow_A\uparrow_B\rangle \equiv |10\rangle$ и $|\downarrow_A\downarrow_B\rangle \equiv |11\rangle$ равновесная девиация (4.4) имеет отличные от нуля только диагональные элементы ($\alpha_{A,B} \approx \hbar\omega_{A,B}/2kT$, $\beta = \hbar\omega_{AB}/2kT$):

$$\hat{\rho}_\Delta = \frac{1}{4} =$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha_A + \alpha_B - \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_A - \alpha_B + \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha_A + \alpha_B + \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha_A - \alpha_B - \beta \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} |00\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Формирование квазичистого состояния, описываемого матрицей плотности $\hat{\rho}_\varepsilon$, осуществляется с помощью неунитарной операции выделения из исходной матрицы плотности смешанного состояния $\hat{\rho}_0$ одного или нескольких диагональных блоков типа $|\psi\rangle\langle\psi| = \text{Diag}(1, 0, 0, \dots)$ с той же или меньшей размерностью и с только одним отличным от нуля *солным* диагональным элементом, как это имеет место в матрице плотности чистого состояния (см. гл. 1), и в преобразовании оставшейся части к виду, пропорциональному единичной матрице.

В частности, имеет место следующее преобразование к квазичистому состоянию с выделением одного блока с той же размерностью ($N = L$):

$$\hat{\rho}_0 \Rightarrow \hat{\rho}_\varepsilon = \sum_j \hat{P}_j \hat{\rho}_0 \hat{P}_j^+ = (1 - \varepsilon)2^{-L} \cdot \hat{1} + \varepsilon|\psi\rangle\langle\psi|. \quad (4.7)$$

Именно второе слагаемое в (4.7) описывает динамическое поведение неравновесной системы, преобразуется при унитарных вычислительных операциях и определяет в конечном счете наблюдаемый сигнал, в то время как первое слагаемое в линейных унитарных преобразованиях совсем не участвует. Таким образом, квазичистое состояние действительно ведет себя подобно чистому состоянию с той лишь разницей, что интенсивность сигнала оказывается уменьшенной в ε раз.

При этом процесс инициализации состояния квантового регистра сводится к переводу кубитов в квазичистое состояние. Величина параметра ε определяется разностью населенностей двух состояний кубитов. Для гомоядерной системы L спинов он равен (химическими сдвигами резонансных частот и слабым взаимодействием здесь пренебрегаем)

$$\varepsilon = \frac{\exp(L\hbar\omega/2kT) - \exp(-L\hbar\omega/2kT)}{(\exp(\hbar\omega/2kT) + \exp(-\hbar\omega/2kT))^L}. \quad (4.8)$$

При комнатных температурах $\hbar\omega/kT \ll 1$ будем иметь $\varepsilon \approx \approx L(\hbar\omega/kT)2^{-L}$. Отсюда следует важный вывод об *экспоненциальном уменьшении* параметра ε с увеличением числа кубитов.

Отметим здесь напрашивающуюся аналогию между квазичистым состоянием и квазичастичными дырочными состояниями в полупроводниках или магннными состояниями в ферромагнетиках и антиферромагнетиках, которые представляют собой элементарные возбуждения основного состояния многочастичной системы.

Было предложено несколько способов формирования начального квазичистого состояния из смешанного теплового равновесного состояния. Им соответствуют свои наборы операторов \hat{P}_j . Отдельные способы могут существенно отличаться с точки зрения зависимости интенсивности сигнала, операционного времени и влияния интенсивности шумов от числа кубитов [4.5]. Рассмотрим три из них.

4.2.2. Приготовление квазичистого начального состояния методом логической метки

Суть этого способа продемонстрируем на простом примере жидкой при комнатной температуре гомоядерной системы из молекул *2,3-дибромтоиофена*, содержащих два неэквивалентных атома водорода ^1H (гомоядерная структура с константой связи $I = \hbar\omega_{AB}$, $\omega_{AB}/\pi = 6\text{ Гц}$ [4.1, 4.4] (см. рис. 4.2).

При наличии внешнего постоянного поля $B = 9,4\text{ Тл}$ [4.4] частоты прецессии обоих протонных спинов вокруг оси z $\omega_{A,B}/2\pi = \gamma_{A,B}B/2\pi$ имеют близкие значения около 200 МГц (то есть $\omega_{A,B} \gg \omega_{AB}$). Химические сдвиги определяют разность частот $|\omega_A - \omega_B|/2\pi = 130\text{ Гц}$. Ядра S имеют $I = 0$, а у ядра $^{79,81}\text{Br}$ $I = 3/2$.

Пренебрежем далее для простоты химическими сдвигами (то есть примем, что $|\omega_A - \omega_B| \ll \omega_A, \omega_B$). Для $T = 300\text{ К}$ получим $\hbar\omega_A/2kT \approx$

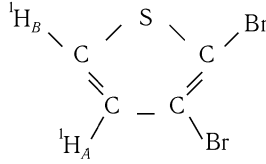


Рис. 4.2. Химическая структура молекулы 2,3-дибромотиофена, содержащая два неэквивалентных протона H_A и H_B с различающимися из-за химических сдвигов резонансными частотами.

$\approx \hbar\omega_B/2kT \approx \alpha$, $\alpha \sim 1,6 \cdot 10^{-5}$. Кроме того, положим $\beta = \hbar\omega_{AB}/2kT \Rightarrow 0$. Тогда выражение (4.6) принимает простой блочный вид с двумя нулевыми собственными значениями

$$\hat{\rho}_\Delta = \frac{\alpha}{2} \left((\hat{I}_{Az} \otimes 1_B) + (1_A \otimes \hat{I}_{Bz}) \right) \approx \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

или иначе

$$\hat{\rho}_\Delta \approx \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} |\uparrow_A\rangle\langle\uparrow_B| & 0 \\ 0 & -|\downarrow_A\rangle\langle\downarrow_B| \end{pmatrix} \equiv \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} |0\rangle\langle 0| & 0 \\ 0 & -|1\rangle\langle 1| \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

означающее, что $2\hat{\rho}_\Delta/\alpha$ можно рассматривать как равновесную матрицу плотности эффективной спиновой системы, в которой спин A находится в чистом состоянии $|\downarrow_A\rangle \equiv |1\rangle$ или $|\uparrow_A\rangle \equiv |0\rangle$ в зависимости от состояния второго вспомогательного спина B $|\downarrow_B\rangle$ или $|\uparrow_B\rangle$, играющих роль *логической метки* (logical label) для соответствующих чистых состояний спина A . Каждому из этих состояний соответствует *одно ненулевое* собственное значение матрицы $\hat{\rho}_\Delta$.

Таким образом, в рассматриваемом случае операция приготовления начального квазичистого состояния сводится просто к фиксации состояния вспомогательного спина B в начальном смешанном состоянии двух спинов.

Эти рассуждения легко обобщаются и на случай $N > 2$ [4.1, 4.3]. Основная идея состоит в том, чтобы с помощью определенных унитарных преобразований \hat{P}_j , осуществляемых посредством соответствующих последовательностей радиочастотных импульсов (в частности, операций CNOT и SWAP), произвести обмен населенностей различных

состояний без изменения спектра собственных значений таким образом, чтобы образовать группы-блоки спиновых состояний с одинаковыми населенностями, существующими в тепловом ансамбле, с целью создания однородного фона населенностей в этих блоках, на котором будут выделяться отдельные сольные состояния с одной отличной от однородного фона населенностью. Элементы этих групп различаются в зависимости от состояний других вспомогательных спинов, не входящих в эти группы. В результате такой процедуры «очистки» создается, вообще говоря, неравновесное состояние, в котором некоторое число спинов находится в чистом состоянии, отмечаемом состоянием (логической меткой) вспомогательных спинов. Так, в частности, в случае $N = 4$ [4.1] могут быть получены четыре квазичистых, но неравновесных *двухспиновых* ($L = 2$) состояния логических кубитов A и B , $|\uparrow_A \uparrow_B\rangle \langle \uparrow_A \uparrow_B| = |00\rangle \langle 00|$, отмечаемых, соответственно, состояниями оставшихся двух вспомогательных спинов C и D $|\uparrow_C \uparrow_D\rangle$, $|\uparrow_C \downarrow_D\rangle$, $|\downarrow_C \uparrow_D\rangle$ и $|\downarrow_C \downarrow_D\rangle$. Таким образом, в этом случае состояние только одних кубитов A и B не определяют однозначно квазичистое начальное состояние, необходимо знать еще состояние двух вспомогательных спинов C и D .

Как уже говорилось выше, матрица плотности чистого состояния L -кубитов должна иметь собственное значение, равное единице, для сольного состояния и $2^L - 1$ нулевых собственных значений для остальных состояний. Максимальное число почти нулевых собственных значений девиации матрицы плотности ρ_Δ для N спинов, которые возникают, как в (4.9), из состояний с равными населенностями для противоположно направленных спинов в предположении малых химических сдвигов при высоких температурах ($\alpha \Rightarrow 0$) можно приближенно оценить как число сочетаний из состояний N спинов по $N/2$ (пусть будет N — четное), то есть как $N! / [(N/2)!]^2 \approx 2^N / (N\pi/2)^{1/2}$. Оно, вообще говоря, будет больше числа состояний, требуемого для образования квазичистых состояний. Излишние состояния относятся к так называемым «мусорным» (garbage) блокам, влияние которых, однако, на результирующий сигнал может быть исключено [4.1]. Следовательно, в качестве необходимого условия для приготовления L -кубитового чистого состояния в системе из N спинов, может служить следующее выражение

$$L \leq \log_2 (N! / [(N/2)!]^2 + 1) \approx N - O(\log_2 N). \quad (4.11)$$

Следовательно, для больших значений N будем иметь $L \approx N$ и в качестве L -кубитового квантового компьютера — молекулу из L спинов.

4.2.3. Приготовление квазичистого состояния методом пространственного усреднения

Второй способ приготовления квазичистого состояния, который предполагает *пространственное* разделение ансамбля квантовых компьютеров-молекул на подансамбли, был предложен и реализован в [4.4, 4.8]. Для этого могут быть пригодны известные методы ЯМР, использующие наряду с радиочастотными импульсами, приводящими к появлению когерентного порядка (то есть отличных от нуля недиагональных элементов матрицы плотности), *импульсы градиента* постоянного магнитного поля (см. ниже), приводящие к пространственному распределению фаз недиагональных компонентов матрицы плотности. Сигнал от всего образца является результатом усреднения по этому пространственному распределению фаз (неунитарная операция). Таким способом можно добиться того, что матрица плотности примет диагональный вид, соответствующий квазичистому состоянию определенного подансамбля. Используя импульсы градиента радиочастотного поля, можно также производить рефазировку каждого спина в отдельности, осуществляя тем самым подавление корреляции между спинами. Существенное усовершенствование метода было достигнуто в [4.9], где пространственно разделенные квазичистые состояния было предложено метить с помощью вспомогательного спина, состояние которого коррелировано с рассматриваемой спиновой системой, при этом фаза коррелирована с положением спина в пространстве.

4.2.4. Приготовление квазичистого состояния методом временного усреднения

Рассмотрим, наконец, несколько подробнее еще один из вариантов неоднократно использовавшегося третьего способа так называемого *временного* усреднения для $N = L = 2$ на простом примере молекул хлороформа CHCl_3 (рис. 4.3) [4.5], в которых используются ядерные спины двух атомов ${}^1\text{H} = \text{A}$ и ${}^{13}\text{C} = \text{B}$ (гетероядерная структура). В ЯМР-эксперименте наблюдались две протонные линии, имеющие резонансные частоты $(\omega_A \mp \omega_{AB})/2\pi$, равные 500,133921 и 500,134136 МГц ($B = 11,7$ Тл), и две линии углерода с частотами $(\omega_B \mp \omega_{AB})2\pi$, равными

125,767534 и 125,767749 МГц, с очень малым химическим сдвигом и с параметром связи $\omega_{AB}/\pi = 215$ Гц.

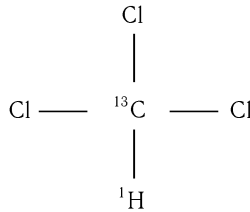


Рис. 4.3. Химическая структура молекулы хлороформа.

Матрицу плотности при тепловом равновесии для такой системы при $T = 300\text{K}$ и $(\alpha_A + \alpha_B)/4 \approx 10^{-5}$, согласно (4.3, 4.6) можно записать в виде

$$\hat{\rho}_0 = 1/4 \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + 10^{-5} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0,6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Для приготовления квазичистого состояния в этом случае используется усреднение (черта сверху) следующих трех операций:

$$\bar{\hat{\rho}}_\varepsilon = \frac{1}{3}\hat{\rho}_\varepsilon = \frac{1}{3}\sum_{j=1}^3 \hat{P}_j \hat{\rho}_0 \hat{P}_j^+ = \frac{1}{3}(\hat{\rho}_0 + \hat{P}_1 \hat{\rho}_0 \hat{P}_1^+ + \hat{P}_2 \hat{\rho}_0 \hat{P}_2^+), \quad (4.13)$$

где

$$\hat{P}_2^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \text{SWAP} \cdot \text{CNOT}, \quad \hat{P}_2 = \hat{P}_1^+ = \text{CNOT} \cdot \text{SWAP}. \quad (4.14)$$

В результате получим:

$$\bar{\hat{\rho}}_\varepsilon = (1/4 - 0,33 \cdot 10^{-5}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + 0,33 \cdot 10^{-5} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Окончательные результаты логических операций и измерений определяются второй частью выражения (4.15), которая с точностью до постоянного множителя совпадает с матрицей плотности чистого двухкубитового состояния $|\uparrow_A\uparrow_B\rangle\langle\uparrow_A\uparrow_B| = |00\rangle\langle 00| \equiv \text{Diag}(1, 0, 0, 0)$. Этот метод обобщается и на состояния с произвольным числом кубитов.

Преимущества метода временного усреднения по сравнению с остальными состоят, во-первых, в том, что в этом случае не обязательно нужны вспомогательные кубиты, во-вторых, эти методы можно использовать при любых температурах и не требуется различать подансамбли квантовых компьютеров-молекул, как во втором способе, в-третьих, при высоких температурах они могут иметь отношение сигнал/шум достаточно большое для эффективного определения сигнала даже для относительно большого числа кубитов [4.5].

4.3. Формирование квантовых вентилях методами ЯМР

4.3.1. Однокубитовые квантовые операции

По сравнению с процессом инициализации формирование квантовых вентилях в ЯМР квантовых компьютерах оказывается сравнительно простым, оно основано на хорошо разработанных импульсных методах в ЯМР спектроскопии [4.10–4.12]. Напомним прежде всего некоторые необходимые для дальнейшего сведения из теории магнитного резонанса, которые в равной степени относятся как к ядерным, так и электронным спинам. Наиболее простой способ описания однокубитовых операций заключается в использовании *векторной модели Блоха* (см. гл. 1), в которой состояние спина-кубита представляется точкой на сфере Блоха, а однокубитовые операции под действием радиочастотных импульсов как повороты классического *вектора Блоха*, указывающего на эту точку. Однако здесь будет использовано более общее квантовое описание, оно будет необходимым далее для описания двухкубитовых квантовых операций, для которых простой векторной модели не существует.

Гамильтониан свободного ядерного спина $I_A = 1/2$ с гиромангнитным отношением γ_A в постоянном поле B (ось z) имеет вид $\hat{H} = -\hbar\gamma_A B \hat{I}_{Az}$. Свободная прецессия спина в этом поле с частотой $\omega_A = \gamma_A B$ описывается, как известно, унитарным оператором правого по-

ворота оператора спина вокруг оси z на угол $\phi_{zA} = \omega_{At}$ (далее используются обозначения книги Ч. Сликтера [4.10]):

$$\widehat{Z}_A(\omega_{At}) = \exp(i\omega_{At}\widehat{I}_{zA}) = \cos(\omega_{At}/2)\widehat{1} + 2i\sin(\omega_{At}/2)\widehat{I}_{zA}. \quad (4.16)$$

Оператор эволюции во времени пары взаимодействующих спинов, описываемый коммутирующим с операторами \widehat{I}_{zA} и \widehat{I}_{zB} гамильтонианом (4.5), можно представить как три независимых оператора: два оператора поворота вокруг оси z спинов A и B в постоянном внешнем поле (матрицы 2×2 : $\widehat{Z}_A(\omega_{At})$, $\widehat{Z}_B(\omega_{Bt})$) и оператор поворота, обусловленный взаимодействием спинов (матрица 4×4 : $\widehat{Z}_{AB}(\omega_{ABt})$):

$$\widehat{U}(t) = \exp(-i\widehat{H}t/\hbar) = \left[\widehat{Z}_A(\omega_{At}) \otimes \widehat{Z}_B(\omega_{Bt}) \right] \cdot \widehat{Z}_{AB}(\omega_{ABt}), \quad (4.17)$$

где

$$\begin{aligned} \widehat{Z}_{AB}(\omega_{ABt}) &= \exp \left[-i2\omega_{ABt}(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{I}_{zB}) \right] = \\ &= \cos(\omega_{ABt}/2)\widehat{1} - 4i\sin(\omega_{ABt}/2)(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{I}_{zB}), \end{aligned} \quad (4.18)$$

где $\widehat{1}$ — единичная четырехрядная матрица.

Эволюция во времени оператора спина описывается выражением

$$\widehat{I}(t) = \widehat{U}(t)^{-1}\widehat{I}(0)\widehat{U}(t). \quad (4.19)$$

В частности, в результате действия оператора $\widehat{Z}_A(\omega_{At})$ на оператор составляющей спина \widehat{I}_{xB} происходит поворот ее на угол ω_{At} :

$$\widehat{Z}_A^{-1}(\omega_{At}) \cdot \widehat{I}_{xA} \cdot \widehat{Z}_A(\omega_{At}) = \cos(\omega_{At})\widehat{I}_{xA} + \sin(\omega_{At})\widehat{I}_{yA}, \quad (4.20)$$

а в результате действия оператора $\widehat{Z}_{AB}(\omega_{ABt})$ — поворот составляющей получим \widehat{I}_{xB} на угол — $(\omega_{ABt})\text{sign}(I_{zA})$:

$$\begin{aligned} \widehat{Z}_{AB}^{-1}(\omega_{ABt}) \cdot (\widehat{1}_A \otimes \widehat{I}_{xB}) \cdot \widehat{Z}_{AB}(\omega_{ABt}) &= \\ = \cos(\omega_{ABt})(\widehat{1}_A \otimes \widehat{I}_{xB}) - 2\sin(\omega_{ABt})(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{I}_{yB}). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Из последнего выражения следует, что операция (4.21) при $\omega_{ABt} = \pi/2$ соответствует левому или правому повороту поперечной составляющей

оператора спина \hat{I}_{xB} на угол $+\pi/2$ или $-\pi/2$ в зависимости от состояния спина A : $\hat{I}_{xB} \Rightarrow -\hat{I}_{yB} \text{sign}(I_{zA})$.

Импульс радиочастотного поля в простейшем случае имеет одну поляризованную по кругу составляющую (она создается двумя перпендикулярными друг другу катушками) $\mathbf{b}(t) = b(\mathbf{i} \cos(\omega t) - \mathbf{j} \sin(\omega t))$ в плоскости перпендикулярной внешнему полю $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ ($\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ — орты в направлении осей x, y, z), с амплитудой $b \ll B$, с *резонансной* для рассматриваемого спина A частотой $\omega = \omega_A$ и длительностью импульса $\Delta t \gg 1/\omega_A$. Если перейти из лабораторной системы во вращающуюся с частотой ω вокруг оси z систему координат, в которой вектор $\mathbf{b} = b\mathbf{i}$ в течение длительности импульса не зависит от времени, то спин будет прецессировать вокруг направления этого вектора с частотой $\Omega_A = \gamma_A b$, называемой *резонансной частотой Раби*. Радиочастотный импульс произведет поворот спина вокруг направления вектора $\mathbf{b} = b\mathbf{i}$ (косинус-импульс) на угол $\phi_{xA} = \Omega_A \Delta t = \gamma_A b \Delta t$ ($b\Delta t$ — площадь прямоугольного импульса). Соответствующий унитарный оператор во вращающейся системе координат имеет вид:

$$\hat{X}_A(\phi_{xA}) = \exp(i\phi_{xA}\hat{I}_{xA}) = \cos(\phi_{xA}/2)\hat{1} + 2i \sin(\phi_{xA}/2)\hat{I}_{xA}. \quad (4.22)$$

Операция поворота вокруг оси y $\hat{Y}_A(\phi_A) = \exp(i\phi_A\hat{I}_{yA})$ осуществляется резонансным импульсом сдвинутым по фазе на $\pi/2$ (синус-импульс), для которого $b(t + \pi/2\omega)$.

В частности, операции поворота вокруг осей x, y под действием импульсов на угол $\pm\pi/2$ представляются матрицами вида:

$$\begin{aligned} \hat{X}(\pm\pi/2) &= \exp(\pm i(\pi/2)\hat{I}_x) = \sqrt{1/2}(\hat{1} \pm 2i\hat{I}_x) = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & \pm i \\ \pm i & 1 \end{pmatrix}, \\ \hat{Y}(\pm\pi/2) &= \exp(\pm i(\pi/2)\hat{I}_y) = \sqrt{1/2}(\hat{1} \pm 2i\hat{I}_y) = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \mp 1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Длительность соответствующего импульса $\Delta t = \pi/2\Omega_A$. При достаточно большой разнице резонансных частот $|\omega_A - \omega_B|$ по сравнению с шириной спектра радиочастотного импульса, которая порядка частоты Раби (*селективный* (selective, «soft») импульс) возможна индивидуальная резонансная настройка на один спин, без существенного изменения состояния другого спина.

Операция поворота на угол $\pm\pi/2$ вокруг оси z , описываемая выражением

$$\widehat{Z}(\pm\pi/2) = \exp(\pm i(\pi/2)\widehat{I}_z) = \sqrt{1/2}(\widehat{1} \pm 2i\widehat{I}_z) = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 \pm i & 0 \\ 0 & 1 \mp i \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

выполняется за счет естественного процесса свободной прецессии спина во внешнем поле B за время $t = \pi/2\omega$ и $3\pi/2\omega$ в отсутствии радиочастотного импульса.

Однако как будет видно из дальнейшего, удобнее осуществлять ее с помощью последовательности *трех* действующих на спины селективных радиочастотных импульсов, выполняющих последовательные повороты вокруг осей x и y во вращающейся с резонансной частотой системе координат. Так, используя выражения (4.23), (4.24), нетрудно убедиться, что

$$\begin{aligned} \widehat{Z}(\pm\pi/2) &= \widehat{Y}(\pi/2) \cdot \widehat{X}(\pm\pi/2) \cdot \widehat{Y}(-\pi/2) = \\ &= \widehat{Y}(-\pi/2) \cdot \widehat{X}(\mp\pi/2) \cdot \widehat{Y}(\pi/2). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Перейдем теперь к рассмотрению основных *однокубитовых* квантовых вентилях, преобразующих, состояние отдельного ядерного спина. Таким является, в частности, однокубитовый обратимый вентиль НЕ (NOT). Операция над ядерным спином, соответствующая такому вентилю, осуществляется унитарным оператором, производящим поворот в спиновом пространстве одного спина вокруг оси x на угол $= \pi$, то есть

$$\widehat{X}(\pi) = \exp(i\pi\widehat{I}_x) = 2i\widehat{I}_x = i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

который отличается от оператора NOT несущественным постоянным фазовым множителем i .

Другим однокубитовым вентиляем является *оператор Адамара* \widehat{H} . Ему соответствует унитарный оператор, отличающийся от самообратимого оператора Адамара также несущественным множителем,

$$\begin{aligned} \widehat{H} &= \exp \left[i\pi(\widehat{I}_x + \widehat{I}_z)/\sqrt{2} \right] = \\ &= \sqrt{2}i(\widehat{I}_x + \widehat{I}_z) = i\sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = i\sqrt{1/2}\widehat{H}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Он определяет операцию поворота на угол π вокруг направления $i + k$, что может быть достигнуто путем воздействия нерезонансного импульса с частотой $|\omega - \gamma B| = \gamma b$ или последовательности трех импульсов (трехимпульсный сэндвич), осуществляющих повороты на угол $-\pi/4$ вокруг оси y , на π вокруг оси x и на $\pi/4$ вокруг оси y [4.12, 4.13]: $\widehat{R} = \widehat{Y}(\pi/4) \cdot \widehat{X}(\pi) \cdot \widehat{Y}(-\pi/4)$.

Еще одной однокубитовой операцией является *селективная декогерентизация* состояния кубитов в ансамбле, осуществляемая с помощью импульсов градиента магнитного поля. Эта операция используется, например, при приготовлении квазичистого начального состояния методом пространственного усреднения (см. раздел (4.2.3)). Оператор поворота i -го спина в ансамбле вокруг оси z под действием импульса градиента постоянного поля вдоль оси $z dB/dz = G = \text{const}$ и длительностью Δt имеет вид:

$$\widehat{Z}_i(\gamma G z_i \Delta t) = \exp(i\gamma G z_i \Delta t \widehat{I}_{zi}). \quad (4.28)$$

Усреднение по ансамблю, если предполагать гауссовское распределение отклонений координат спинов z_i $\langle z_i^2 \rangle = 2D\Delta t$, где D — коэффициент спиновой диффузии, приводит к известному из теории спинового эха результату [4.14]:

$$\langle \widehat{Z}_i^{-1}(\gamma G z_i \Delta t) \cdot \widehat{I}_x \cdot \widehat{Z}_i(\gamma G z_i \Delta t) \rangle = \exp(-D\gamma^2 G^2 (\Delta t)^3 / 3) \widehat{I}_x. \quad (4.29)$$

Когерентные (недиагональные) элементы однокубитовой матрицы плотности под действием такой операции затухают, то есть имеет место рефокусировка или декогерентизация однокубитовых состояний с характерным временем $(D\gamma^2 G^2 / 3)^{-1/3}$.

4.3.2. Двухкубитовый вентиль CNOT

Основным двухкубитовым вентилем, как отмечалось уже в гл. 2, является операция CNOT, которую можно записать в матричной форме следующим образом:

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| \otimes \widehat{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes 2\widehat{I}_x. \quad (4.30)$$

Результат действия операции CNOT на два кубита состоит в том, что первый кубит не изменяет своего состояния, а второй изменяет его только если первый кубит находился в состоянии $|1\rangle$. Для того, чтобы можно было осуществить эту операцию существенно наличие взаимодействия между кубитами. Спин-спиновое взаимодействие между ядерными спинами в гамильтониане (4.5) как раз и способно обеспечить соответствующее преобразование.

Существуют различные способы реализации операции CNOT. Наиболее прямым является использование импульсов, селективным образом возбуждающих один из спинов, когда второй остается в одном из двух собственных состояний. Этим двум состояниям второго спина соответствуют два перехода, с различными вследствие спин-спинового взаимодействия энергиями. Фактически этот способ аналогичен известному методу двойного резонанса Паунда–Оверхаузера (R. Pound, A. Overhauser) [4.4, 4.10]. Ниже на конкретных примерах будет проиллюстрирован этот способ.

Другой более общий способ основан на использовании многоимпульсной техники. Операция CNOT была представлена в главе 2 (2.8) в виде квантовой схемы:

$$\text{CNOT} = \begin{array}{c} A: |a\rangle \\ B: |b\rangle \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{\text{NOT}} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{H} \text{---} \boxed{\Pi} \text{---} \boxed{H} \text{---} \end{array} \quad (4.31)$$

Однако при ее реализации удобнее воспользоваться другой эквивалентной схемой, в которой операторы Адамара H заменяются прямым и обратным несомообратимыми псевдооператорами Адамара [4.13]

$$\hat{h} = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{h}^{-1} = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

которые соответствуют более простым операциям поворота на углы $\pm\pi/2$ вокруг оси y : $\hat{h}^{-1} = \hat{Y}_B(-\pi/2)$, $\hat{h} = \hat{Y}_B(\pi/2)$ (см. (4.24)). Квантовая схема для оператора CNOT при этом принимает следующий вид (операции в последовательности слева направо):

$$\text{CNOT} = \begin{array}{c} A: |a\rangle \\ B: |b\rangle \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{\text{NOT}} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{\hat{h}} \text{---} \boxed{\Pi} \text{---} \boxed{\hat{h}^{-1}} \text{---} \end{array} \quad (4.33)$$

0 1 4 5

Рассмотрим теперь один из способов осуществления операции CNOT с помощью импульсной техники ЯМР [4.1]. Для этого, согласно (4.33), следует произвести следующую последовательность операций, действующих на контролирующей A и контролируемый B спины-кубиты (в последовательности справа налево), то есть

$$\text{CNOT} = \underset{5}{\widehat{1}_A \otimes \widehat{Y}_B(-\pi/2)} \cdot \underset{4}{\widehat{\Pi}} \cdot \underset{1}{\widehat{1}_A \otimes \widehat{Y}_B(\pi/2)}, \quad (4.34)$$

где оператор контролируемого изменения фазы состояния $|1\rangle \widehat{\Pi}$ с учетом (4.16), (4.18) и (4.24) может быть представлен в виде произведения следующих трех коммутирующих матриц поворота [4.1]:

$$\begin{aligned} &= \underset{4}{\frac{1-i}{2^{1/2}} [\widehat{Z}_A(\pi/2) \otimes \widehat{1}_B]} \cdot \underset{3}{[\widehat{1}_A \otimes \widehat{Z}_B(\pi/2)]} \cdot \underset{2}{\widehat{Z}_{AB}(\pi/2)} \underset{1}{=} \\ &= \underset{4}{\frac{1-i}{4} [(\widehat{1}_A + 2i\widehat{I}_{zA}) \otimes \widehat{1}_B]} \cdot \underset{3}{[\widehat{1}_A \otimes (\widehat{1}_B + 2i\widehat{I}_{zB})]} \cdot \underset{2}{[\widehat{1} - 4i(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{I}_{zB})]} \underset{1}{=} \\ &= \underset{4}{\frac{1-i}{4}} \begin{pmatrix} 1+i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.35) \end{aligned}$$

где цифрами отмечены последовательные моменты времени, соответствующие границам между отдельными операциями в выражениях (4.33)–(4.35).

Простая векторная модель, поясняющая наглядно действие последовательности пяти указанных операций, представлена на рис. 4.4 [4.1], из которого видно, что переворачивание в конце всего процесса (момент 5) контролируемого спина B происходит, только когда контролирующий спин A находится в состоянии $|1\rangle \equiv |\downarrow_A\rangle$. В интервале 1–2 действует двухкубитовый оператор $\widehat{Z}_{AB}(\pi/2)$, осуществляющий, в соответствии с (4.21), поворот x -составляющей оператора спина B вокруг оси z на угол $-\pi/2$ при состоянии спина A $|\uparrow_A\rangle$ или на угол $\pi/2$ при $|\downarrow_A\rangle$. Все остальные операции осуществляются с помощью однокубитовых операций поворота со спинами A и B .

Оператор CNOT в форме (4.34), (4.35) можно представить в другом более удобном виде. Переставим для этого местами операции в двух квадратных скобках в интервале 2–5 и учтем свойство прямых

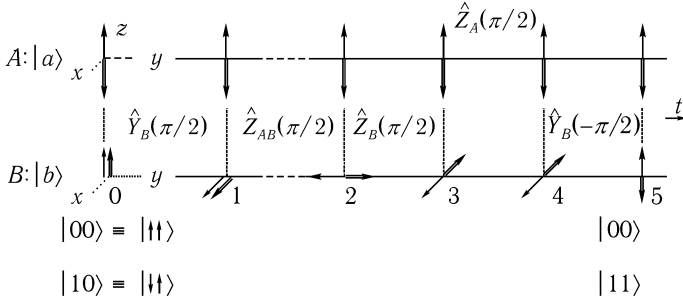


Рис. 4.4. Простая векторная модель CNOT, иллюстрирующая действие пяти импульсов при абсолютном нуле температур [4.1]. Представлены два случая на входе: состояние $|00\rangle$ (жирные векторы) и состояние $|10\rangle$ (векторы с двойной линией). Прецессия вектора спина A во внешнем поле \mathbf{B} в этой модели, как и операции \hat{Z}_A , не изображается.

произведений $(A \otimes B) \cdot (C \otimes D) = (A \cdot C) \otimes (B \cdot D)$:

$$\begin{aligned}
 & \int_1^5 \left[\hat{1}_A \otimes \hat{Y}_B(-\pi/2) \right] \cdot \left[\hat{1}_A \otimes \hat{Z}_B(\pi/2) \right] \cdot \left[\hat{Z}_A(\pi/2) \otimes \hat{1}_B \right] \cdot = \\
 & = \left\{ \hat{1}_A \otimes \left[\hat{Y}_B(-\pi/2) \cdot \hat{Z}_B(\pi/2) \right] \right\} \cdot \left[\hat{Z}_A(\pi/2) \otimes \hat{1}_B \right] = \\
 & = \hat{Z}_A(\pi/2) \otimes \left[\hat{Y}_B(-\pi/2) \cdot \hat{Z}_B(\pi/2) \right].
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

В результате операция CNOT теперь будет описывается следующей последовательностью из *пяти независимых операций*:

$$\text{CNOT} = \hat{Z}_A(\pi/2) \otimes \left[\left(\hat{Y}_B(-\pi/2) \cdot \hat{Z}_B(\pi/2) \right) \cdot \hat{Z}_{AB}(\pi/2) \cdot \left[\hat{1}_A \otimes \hat{Y}_B(\pi/2) \right] \right]. \tag{4.37}$$

Операторы поворота $\hat{Z}_A(\pi/2)$ и $\hat{Z}_B(\pi/2)$ в (4.37) могут осуществляться, как уже отмечалось, за счет свободной прецессии спинов A и B во внешнем постоянном магнитном поле при отсутствии радиочастотных импульсов. Но в этом случае эта прецессия должна «включаться» в течение следующих друг за другом со своим началом отсчета промежутков времени порядка четверти периода свободной прецессии $\pi/(2\omega_A)$, $\pi/(2\omega_B)$, то есть очень коротких по сравнению с длительностью операций $\hat{Y}_B(\pm\pi/2)$ и $\hat{Z}_{AB}(\pi/2)$, которые поряд-

ка $\pi/(2\Omega_B)$, $\pi/2\omega_{AB}$, что, очевидно, *практически невозможно*. Поэтому операции поворота вокруг оси z следует осуществлять с помощью последовательности трех селективных радиочастотных импульсов. Используя выражение (4.25), найдем

$$\hat{Y}(-\pi/2) \cdot \hat{Z}(\pi/2) = \hat{X}(\pi/2) \cdot \hat{Y}(-\pi/2). \quad (4.38)$$

Учитывая соотношения (4.25), (4.38) и свойство прямых произведений, вместо (4.37) получим теперь последовательность *семи операций*, не содержащую совсем операций поворота $\hat{Z}_A(\pi/2)$ и $\hat{Z}_B(\pi/2)$:

$$\begin{aligned} \text{CNOT} &= \left[\hat{Y}_A(\pi/2) \cdot \hat{X}_A(\pi/2) \cdot \hat{Y}_A(-\pi/2) \right] \otimes \left[\hat{X}_B(\pi/2) \cdot \hat{Y}_B(-\pi/2) \right] \times \\ &\quad \times \hat{Z}_{AB}(\pi/2) \cdot \left[\hat{1}_A \otimes \hat{Y}_B(\pi/2) \right] = \left\{ \hat{1}_A \otimes \left[\hat{X}_B(\pi/2) \cdot \hat{Y}_B(-\pi/2) \right] \right\} \times \\ &\quad \times \left[\hat{Y}_A(-\pi/2) \cdot \hat{X}_A(\pi/2) \cdot \hat{Y}_A(-\pi/2) \otimes \hat{1}_B \right] \cdot \hat{Z}_{AB}(\pi/2) \cdot \left[\hat{1}_A \otimes \hat{Y}_B(\pi/2) \right]. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Ее можно переписать иначе (такого типа последовательность приводится, например, в [4.15])

$$\begin{aligned} \text{CNOT} &= \underset{5}{\underset{1}{\left[\hat{1}_A \otimes \hat{X}_B(\pi/2) \right]}} \cdot \hat{Y}_{AB}(-\pi/2) \cdot \left[\hat{X}_A(\pi/2) \otimes \hat{1}_B \right] \cdot \left[\hat{Y}_A(\pi/2) \otimes \hat{1}_B \right] \times \\ &\quad \times \left[\hat{Y}_A(\pi/2) \otimes \hat{1}_B \right] \underset{2}{\underset{1}{\cdot \hat{Z}_{AB}(\pi/2)}} \cdot \underset{1}{\underset{0}{\left[\hat{1}_A \otimes \hat{Y}_B(\pi/2) \right]}} \underset{0}{}, \end{aligned} \quad (4.40)$$

где операция $\hat{Y}_{AB}(-\pi/2) = \hat{Y}_A(-\pi/2) \otimes \hat{Y}_B(-\pi/2)$ представляет собой *одновременный* поворот на $-\pi/2$ обоих спинов A и B вокруг оси y в результате действия двух *селективных* или одного *неселективного* (nonselective, «hard») импульса. Последнее возможно, если ширина частотного спектра импульсов перекрывает резонансные частоты обоих ядерных спинов.

Заметим, что отрицательные углы поворота $-\pi/2$ для операторов спина эквивалентны, как и для классических векторов положительным углам $+3\pi/2 = 2\pi - \pi/2$ (двухкомпонентные волновые функции — спиноры, как известно, при изменении фазы на 2π изменяют знак!). Минимальное время поворота оператора спина B и аналогично спина A вокруг оси z на $-\pi/2$ теперь определяется продолжительностью

трех радиочастотных импульсов с положительными углами поворота $3\pi/(2\Omega_B) + \pi/(2\Omega_B) + \pi/(2\Omega_B) = 5\pi/(2\Omega_B)$, которая при $\omega_B \gg \Omega_B$ значительно больше периода свободной прецессии $2\pi/\omega_B$.

4.3.3. Исключение влияния паразитных естественных процессов в двухкубитовых операциях

Приведенная выше последовательность операций, однако, не завершает еще формирование реального вентиля CNOT, поскольку в спиновой системе в отсутствии радиочастотных импульсов идут естественные процессы, описываемые унитарным оператором (4.17) из трех одновременно действующих коммутирующих операторов $\hat{U}(t) = \left[\hat{Z}_A(\omega_A t) \otimes \hat{Z}_B(\omega_B t) \right] \cdot \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t)$, то есть имеет место свободная прецессия спинов за счет их взаимодействия как с внешним полем B , так и между собой. Это происходит между операциями поворота $\hat{Y}_B(\pi/2)$ и $\hat{Y}_B(-\pi/2)$, то есть, согласно (4.35), в интервале 2–3 для кубита A , 3–4 для кубита B и в интервале 1–2, где «полезной» является только прецессия, описываемая оператором $\hat{Z}_{AB}(\pi)$.

Для исключения влияния этих паразитных процессов для гетероядерных систем может быть использован известный в ЯМР [4.12] прием, который заключается в приложении в определенные моменты времени рефокусирующих импульсов $\hat{X}(\pi) = 2i\hat{I}_x$ (или $\hat{Y}(\pi) = 2i\hat{I}_y$), осуществляющих поворот операторов спина на угол π вокруг оси x (или y), изменяющих знаки составляющих \hat{I}_z, \hat{I}_y (или \hat{I}_x) и, соответственно, обращающих направление упомянутых естественных процессов, например:

$$\begin{aligned} \hat{X}_A(\pi)\hat{Z}_A(\omega_A t) &= \hat{Z}_A(-\omega_A t)\hat{X}_A(\pi), \\ \left[\hat{X}_A(\pi) \otimes \hat{1}_B \right] \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t) &= \hat{Z}_{AB}(-\omega_{AB} t) \left[\hat{X}_A(\pi) \otimes \hat{1}_B \right]. \end{aligned} \quad (4.41)$$

При действии на спины A и B одного неселективного импульса, с соответствующей шириной полосы частот или двух одновременных селективных импульсов имеем

$$\left[\hat{X}_A(\pi) \otimes \hat{X}_B(\pi) \right] \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t) = \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t) \left[\hat{X}_A(\pi) \otimes \hat{X}_B(\pi) \right]. \quad (4.42)$$

В результате рефокусирующий импульс $\hat{X}_{AB}(\pi) = \hat{X}_A(\pi) \otimes \hat{X}_B(\pi)$ с достаточно малой длительностью Δt , приложенный в середине вре-

менного интервала 1–2 действия оператора $\left[\widehat{Z}_A(\omega_A t) \otimes \widehat{Z}_B(\omega_B t) \right] \times \widehat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t)$, то есть в момент $t/2 = \pi/2\omega_{AB} \gg \Delta t$, к концу интервала, согласно (4.41), (4.42), приводит к полному подавлению действия быстро меняющихся во времени операторов $\widehat{Z}_A(\omega_A t)$, $\widehat{Z}_B(\omega_B t)$ и к состоянию, определяемому *только* «полезным» оператором $\widehat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t)$ (см. рис. 4.5).

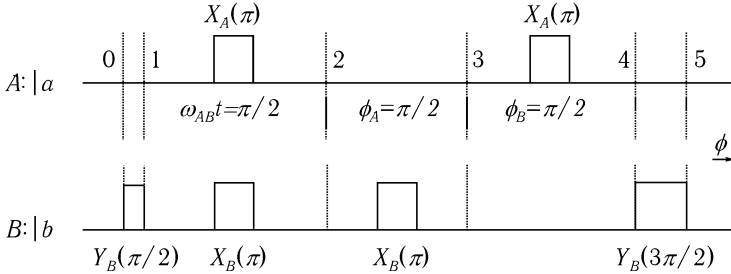


Рис. 4.5. Схема расположения неселективных и селективных рефокусирующих импульсов $\widehat{X}_A(\pi)$, $\widehat{X}_B(\pi)$ в промежутке между импульсами $\widehat{Y}_B(\pi/2)$ и $\widehat{Y}_B(-\pi/2)$. Цифрами, как и на рис. 4.4, отмечены границы между основными операциями.

В результате действия *селективного* рефокусирующего импульса $\widehat{X}_B(\pi)$ (или $\widehat{X}_A(\pi)$), приложенного в середине временного интервала 2–3 (или 3–4), в котором осуществляется операция поворота $\widehat{Z}_A(\phi_A)$ (или $\widehat{Z}_B(\phi_B)$) (см. рис. 4.5), в конце интервала согласно (4.41) происходит *селективная развязка* (selective recoupling) с двумя другими операциями. Так, если приложен импульс $\widehat{X}_B(\pi)$ происходит развязка с операциями $\widehat{Z}_B(\omega_B t)$ и $\widehat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t)$, без изменения операции $\widehat{Z}_A(\omega_A t)$:

$$\widehat{U}(t/2) \cdot (\widehat{1}_A \otimes \widehat{X}_B(\pi)) \cdot \widehat{U}(t/2) = (\widehat{Z}_A(\omega_A t) \otimes \widehat{X}_B(\pi)). \quad (4.43)$$

При этом, поскольку $\widehat{X}_B(\pi)\widehat{I}_{xB}(t) = -\widehat{I}_{xB}(t)$, то действуя на поперечную составляющую спинового оператора \widehat{I}_{xB} , эта операция приводит только к изменению ее знака. Это изменение знака не играет существенной роли, поскольку к концу интервала $\omega_A t = \phi_A = \pi/2$ оно соответствует простому изменению фазы ϕ_B на π . Поэтому в качест-

ве начала отсчета времени действия последующего оператора поворота для спина B вокруг оси z на интервале 3–4 можно снова выбрать $t = 0$.

Если в конце указанного интервала приложить еще раз рефокусирующий импульс $\hat{X}_B(\pi)$ (или $\hat{X}_A(\pi)$), то состояние спина B (или A) возвратится к *начальному* [4.16, 4.17]. Запишем эту последовательность операций над двумя спинами с помощью операторов поворота $\hat{X}_B(\pi) = = 2i\hat{I}_{xB}$, используя соотношения (4.17), (4.41)–(4.43):

$$\hat{U}(t/2) \cdot (\hat{1}_A \otimes \hat{X}_B(\pi)) \cdot \hat{U}(t/2) \cdot (\hat{1}_A \otimes \hat{X}_B(\pi)) = -(\hat{Z}_A(\omega_A t) \otimes \hat{1}_B), \quad (4.44)$$

где учтено, что $\hat{I}_{xB} \cdot \hat{I}_{xB} = 1/4$.

Состояние спина B действительно возвратилось к начальному, а изменение состояния спина A за это время произойдет с точностью до несущественного знака в соответствии с операцией $\hat{Z}_A(\omega_A t)$. Этот второй рефокусирующий импульс можно не использовать и поэтому на рис. 4.5 он не показан.

Заметим, что при использовании селективных импульсов отклонение их формы от идеальной и неточность их фазировки приводит к систематическим искажениям конечного состояния, дополнительным к тем, которые обусловлены декогерентизацией состояний за счет неучитываемых выше взаимодействий ядерных спинов между собой и с окружением.

Для исключения такого рода искажений был предложен способ, использующий *только неселективные* импульсы [4.18]. Так, прикладывая один неселективный радиочастотный импульс $\hat{X}_{AB}(\pi) = (\hat{X}_A(\pi) \otimes \otimes \hat{X}_B(\pi))$ с частотой $\omega = (\omega_A + \omega_B)/2$, для гамильтониана системы двух спинов (4.5) во вращающейся с частотой ω системе координат получим

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\omega\Omega} = & -\hbar\left(\Delta\omega/2 \cdot \left[(\hat{I}_{Az} \otimes 1_B) - (1_A \otimes \hat{I}_{Bz})\right] - 2\omega_{AB}(\hat{I}_{Az} \otimes \hat{I}_{Bz}) + \right. \\ & \left. + \Omega(\hat{I}_{xA} \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{I}_{xB})\right), \quad \Omega = \Omega_A = \Omega_B, \quad \Delta\omega = (\omega_A - \omega_B). \end{aligned} \quad (4.45)$$

В этой системе координат поперечные составляющие операторов спина A и B прецессируют с частотой $\sqrt{(\Delta\omega)^2/4 + \Omega^2} \gg \omega_{AB}$ в некотором эффективном поле B_{eff} , имеющим равные, но противоположные составляющие вдоль оси z $B_{effz} = \pm 2\frac{\gamma_A - \gamma_B}{\gamma_A + \gamma_B} B$ и, соответствен-

но, противоположное во времени вращение поперечных составляющих операторов спина. Действие неселективного импульса $\widehat{X}_{AB}(\pi)$, приложенного в середине рассматриваемого интервала времени, *обращает* во времени эту прецессию и вместе с ней процессы, связанные с несовершенством импульсов, но его действие не обращает процессов, описываемых оператором $\widehat{Z}_{AB}(\omega_{AB}t)$.

Рассмотрим последовательность таких операций:

$$\widehat{U}_\omega(t/2) \cdot \widehat{X}_{AB}(\pi) \cdot \widehat{U}_\omega(t/2) = -4\widehat{U}_\omega(t/2) \cdot (\widehat{I}_{xA} \otimes \widehat{I}_{xB}) \cdot \widehat{U}_\omega(t/2), \quad (4.46)$$

где

$$\begin{aligned} \widehat{U}_\omega(t/2) &= \exp(-i\widehat{H}_{\omega_0}t/2\hbar) = \\ &= [\widehat{Z}_A(\Delta\omega t/4) \otimes \widehat{Z}_B(-\Delta\omega t/4)] \cdot \widehat{Z}_{AB}(\omega_{AB}t/2) \end{aligned} \quad (4.47)$$

— оператор свободной эволюции ($\Omega = 0$) во вращающейся системе координат.

В результате преобразований получим выражение (см. приложение П.4.1):

$$\begin{aligned} \widehat{U}_\omega(t/2) \cdot \widehat{X}_{AB}(\pi) \cdot \widehat{U}_\omega(t/2) &= \\ = -4 \left[\cos(\omega_{AB}t/2) \cdot (\widehat{I}_{xA} \otimes \widehat{I}_{xB}) + i \sin(\omega_{AB}t/2) \cdot (\widehat{I}_{yA} \otimes \widehat{I}_{yB}) \right], \end{aligned} \quad (4.48)$$

которое *не зависит* от относительной частоты прецессии спинов во внешнем поле $\Delta\omega$ и таким образом исключается влияние несовершенства импульсов.

Оказывается, что некоторые двухкубитовые операции контролируемого изменения фазы могут быть представлены в виде последовательности, состоящей из только неселективных операций поворотов $\widehat{X}_{AB}(\pi)$ и периодов свободной эволюции спинов, описываемых оператором $\widehat{U}_\omega(t)$ [4.18] (см. приложение П.4.2)).

4.4. Экспериментальная реализация квантовых вычислений

Рассмотрим теперь как может быть практически выполнено считывание конечного состояния ЯМР квантового компьютера. Предположим, что результат квантовых вычислений представляется в виде

собственных базисных состояний отдельных кубитов $|0\rangle$ и $|1\rangle$. В этом случае считывание результата должно сводиться к определению собственных значений продольных z -составляющих операторов спина, то есть проектированию состояния выходного квантового регистра на состояния детектора. Однако в ЯМР-технике такое состояние не приводит к появлению сигнала на детекторе. Поэтому спиновую систему с помощью радиочастотных импульсов приводят в определенное неравновесное состояние, описываемое матрицей плотности квазичистого состояния $\hat{\rho}_\varepsilon(t) = \hat{U}(t) \cdot \hat{\rho}_\varepsilon(0) \cdot \hat{U}^{-1}(t)$, где $\hat{U}(t)$ — унитарный оператор, осуществляющий эту операцию. В результате неравновесная матрица плотности будет содержать поперечные (когерентные) составляющие, которые приводят к появлению поперечной составляющей парциальной намагниченности ансамбля спинов типа A $M_{\perp A}(t) = \hbar\gamma_A \text{Sp}(\hat{I}_{\perp A} \cdot \hat{\rho}_\varepsilon(t))$ и определяют наблюдаемый сигнал. Считывание состояния кубитов квантового регистра на выходе компьютера (это уже неунитарная операция) может осуществляться в зависимости от длительности радиочастотных импульсов либо путем наблюдения временной зависимости амплитуды и фазы индуцируемой поперечной составляющей намагниченности в катушке детектора ЭДС, либо путем измерения спектра измеряемого сигнала ЯМР.

4.4.1. Примеры реализации двухкубитовой операции CNOT

В одной из первых экспериментальных работ в качестве двухспиновой системы были выбраны два протона упомянутой выше молекул 2,3-дибромотиофена при комнатной температуре. Практическая возможность осуществления в такой системе операции CNOT была продемонстрирована на стандартном ЯМР-спектрометре с полем 9,4 Тл [4.4].

Обратимся к энергетической диаграмме для системы двух спинов A и B , изображенной на рис. 4.1. Пусть девиация равновесной матрицы плотности имеет вид (см. [4.9])

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_\Delta &= \frac{\alpha}{2} \left((\hat{I}_{Az} \otimes 1_B) + (1_A \otimes \hat{I}_{Bz}) \right) = \\ &= \frac{\alpha}{2} \left(\begin{array}{c|c} |\uparrow\uparrow\rangle_{AB}\langle\uparrow\uparrow| & -|\downarrow\downarrow\rangle_{AB}\langle\downarrow\downarrow| \\ \hline & \end{array} \right) = \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

В этом случае спин A в зависимости от состояния спина B находится в чистом состоянии $|\uparrow_A\rangle$ или $|\downarrow_A\rangle$. Для «очистки» смешанного состояния, то есть исключения в матрице плотности (4.46) вклада элементов $\alpha_A - \alpha_B$, авторы работы [4.4] использовали метод пространственного усреднения.

После воздействия возбуждающего *неселективного* радиочастотного $\hat{Y}_{AB}(\pi/2) = [\hat{Y}_A(\pi/2) \otimes \hat{Y}_B(\pi/2)]$ -импульса, осуществляющего поворот обоих спинов на угол $\pi/2$ вокруг оси y и перевод системы в неравновесное состояние, эволюция во времени системы, если пренебречь декогерентизацией, будет определяться унитарной операцией вида

$$\hat{U}(t) = [\hat{Z}_A(\omega_A t) \otimes \hat{Z}_B(\omega_B t)] \cdot \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t) \cdot [\hat{Y}_A(\pi/2) \otimes \hat{Y}_B(\pi/2)]. \quad (4.50)$$

Возникающие в результате четыре одноквантовых перехода $0 \Leftrightarrow 1$, $2 \Leftrightarrow 3$, $0 \Leftrightarrow 2$, $1 \Leftrightarrow 3$ будут определять спектр сигнала ЯМР, состоящий из двух пар, находящихся в фазе (линии интенсивностей с одинаковым знаком) дублетов, с расщеплением по частоте $2\omega_{AB}$ и разнесенных на расстояние $|\omega_A - \omega_B|$ (рис. 4.6 а).

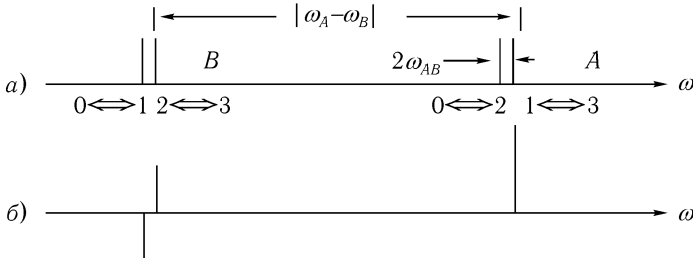


Рис. 4.6. Схема преобразования спектра ЯМР после воздействия на спины A и B неселективного возбуждающего $\hat{Y}_{AB}(\pi/2)$ -импульса на равновесное состояние: а) после воздействия на равновесное состояние сначала операции CNOT, б) затем после селективного считывающего импульса $\hat{Y}_A(\pi/2)$.

При выполнении операции CNOT на равновесное состояние рассматриваемой системы производится возбуждающее воздействие $\hat{Y}_B(\pi)$ -импульсом, *селективным* для одного из компонентов дублета, осуществляющим индуцированные переходы только между уровнями $2 \Leftrightarrow 3$ $|\downarrow_A \downarrow_B\rangle \Leftrightarrow |\downarrow_A \uparrow_B\rangle$ с переворачиванием спина B , но без изменения состояния $|\downarrow_A\rangle$ спина A (контролирующий спин). Для этого импульс дол-

жен иметь такую длительность, чтобы его фурье-преобразование имело конечную ширину $\Delta\omega < 2\omega_{AB}$, то есть чтобы импульс охватывал бы *только один* пик из дублета. В результате получается неравновесное состояние с переносом населенностей между этими уровнями, подобное тем, которые создаются в двойном резонансе Паунда–Оверхаузера [4.10]. Равновесная девиация матрицы плотности преобразуется к виду (множитель $\alpha/2$ опустим):

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle_{AB}\langle\uparrow\uparrow|_{AB} - |\downarrow_A\uparrow\rangle_B\langle\downarrow_A\uparrow|_B &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \\ &\equiv 2(\hat{I}_{zA} \otimes \hat{I}_{zB}) + (\hat{I}_{zA} \otimes \hat{1}_B), \end{aligned} \quad (4.51)$$

то есть, как и следовало при действии операции CNOT с контролирующим спином A . Действительно, учитывая, что $\text{CNOT} = \text{CNOT}^+$, в результате действия этого оператора на состояние (4.49), будем иметь

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.52)$$

Однако в таком неравновесном, как и в равновесном состоянии, поперечные составляющие намагниченности отсутствуют. Поэтому для считывания сигнала производится снова возбуждение системы с помощью *селективных считывающих* импульсов $\hat{Y}_A(\pi/2)$ и $\hat{Y}_B(\pi/2)$. Так, импульс $\hat{Y}_A(\pi/2)$ преобразует состояние (4.51) в состояние, определяемое матрицей плотности $2(\hat{I}_{xA} \otimes \hat{I}_{zB}) + (\hat{I}_{xA} \otimes \hat{1}_B)$, а импульс $\hat{Y}_B(\pi/2)$ в состояние, определяемое $2(\hat{I}_{zA} \otimes \hat{I}_{xB}) + (\hat{I}_{zA} \otimes \hat{1}_B)$. Дальнейшая эволюция этих состояний во времени описывается унитарным оператором $\hat{U}(t) = [\hat{Z}_A(\omega_A t) \otimes \hat{Z}_B(\omega_B t)] \cdot \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB} t)$.

Сигнал ЯМР, возбуждаемый считывающим импульсом $\hat{Y}_A(\pi/2)$, будет пропорционален

$$\begin{aligned} \text{Sp}_A((\hat{I}_{xA} \otimes \hat{1}_B) + (\hat{1}_A \otimes \hat{I}_{xB})) \cdot (2(\hat{I}_{xA} \otimes \hat{I}_{zB}) + (\hat{I}_{xA} \otimes \hat{1}_B)) &= \\ = \text{Sp}_A(\hat{I}_{xA}^2) \cdot (\text{sign} I_{zB} + 1), \end{aligned} \quad (4.53)$$

где Sp_A — парциальный след по состояниям спина A . Таким образом, два составляющих дублета при $\text{sign } I_{zB} > 0$ действуют в фазе и образуют один сигнал, а при $\text{sign } I_{zB} < 0$ они действуют в противофазе и не дают сигнала. Наоборот, сигнал, возбуждаемый импульсом $\hat{Y}_B(\pi/2)$, определяется противофазными составляющими дублета с разными знаками, определяемыми $\text{sign } I_{zA}$: $\text{Sp}_B(\hat{I}_{xB}^2) \text{sign } I_{zA}$.

В результате, если контролирующим является спин A , то при считывании состояния этого спина (импульс $\hat{Y}_A(\pi/2)$) результирующий спектр содержит одну правую линию с двойной интенсивностью, а при считывании состояния спина B (импульс $\hat{Y}_B(\pi/2)$) результирующий пик в спектре отсутствует (рис. 4.66).

Правая или левая линия в спектре с двойной интенсивностью наблюдается в зависимости от состояния контролирующего спина. Ее положение определяет результат квантовой операции CNOT.

Одна из первых реализаций операции CNOT с использованием импульсной последовательности [4.3] была также осуществлена в гетероядерной двухспиновой системе на молекулах *хлороформа*. При этом вместо описанной выше последовательности из семи операций (без учета рефокусирующих импульсов) в полной схеме (4.39) использовалась упрощенная квантовая схема, описываемая в «дважды вращающейся» с частотами ω_A и ω_B системе координат только *три* операциями следующего вида:

$$\text{CN}\tilde{\text{O}}\text{T} = [\hat{1}_A \otimes \hat{Y}_B(\pi/2)] \cdot \hat{Z}_{AB}(3\pi/2) \cdot [\hat{1}_A \otimes \hat{X}_B(\pi/2)]. \quad (4.54)$$

С помощью выражений (4.18), (4.23) эта последовательность преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \text{CN}\tilde{\text{O}}\text{T} &= \frac{1}{2^{3/2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 & 0 \\ i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & i \\ 0 & 0 & i & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} 1+i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+i \\ 0 & 0 & i-1 & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{i} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Полученная матрица отличается от матрицы для идеального CNOT (4.30) относительными постоянными фазами элементов, что несущественно

при действии на диагональную матрицу плотности. Действительно,

$$(\text{CN}\tilde{\text{O}}\text{T})^+ \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \times \text{CN}\tilde{\text{O}}\text{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.56)$$

Однако это отличие все-таки может играть роль при воздействии на суперпозиции квантовых состояний.

В работе [4.3] спиновая система представляла собой образец 200 мМ раствора хлороформа в ацетоне объемом 0,5 мл, помещенный в 5 мм пробирку, содержащую $\sim 10^{18}$ молекул. Эксперименты проводились при комнатной температуре на стандартных ЯМР-спектрометрах. Времена релаксации составляли $T_1 \approx 7$ с и $T_2 \approx 2$ с для протонов и $T_1 \approx 16$ с и $T_2 \approx 0,2$ с для углерода. Более короткое время релаксации T_2 у углеродного спина объясняется более сильным его взаимодействием с тремя ядрами хлора. Ядра обоих стабильных изотопов хлора ^{35}Cl и ^{37}Cl имеют спин $3/2$ и квадрупольные моменты. Поэтому времена релаксации для ядер хлора существенно меньше, а сигнал ЯМР слабее. Приготовление исходных квазичистых состояний осуществлялось методом временного усреднения.

Помимо операции CNOT на гетероядерной двухкубитовой системе молекул хлороформа было показано нарушение неравенства Белла (J. Bell) [4.8], были продемонстрированы алгоритмы Гровера [4.19] и Дойча–Джозса [4.20]. Кроме того, была выполнена двухкубитовая квантовая операция контролируемого изменения *геометрической фазы Берри* (M. Berry) [4.21], существенное преимущество которой по сравнению с рассмотренной выше операцией контролируемого изменения динамической фазы (4.35) состоит в ее естественной защищенности от некоторых типов ошибок. В приложении П.4.3 приводятся элементарные сведения о фазе Берри.

4.4.2. Реализация алгоритмов Дойча–Джозса и Гровера на двухкубитовом компьютере

Приведем здесь еще одну двухкубитовую систему, на которой был также осуществлен *алгоритм Дойча–Джозса* [4.15]. В качестве двух кубитов использовалась пара протонов молекулы *цитозина* в 50 мМ растворе D_2O . Цитозин — компонента ДНК с двумя изолированными про-

тонами H_A и H_B (см. рис. 4.7). Быстрый обмен двух аминных протонов и одного амидового протона молекулы цитозина с растворителем DO_2 приводит к усреднению создаваемых ими полей и к формированию из оставшихся протонов H_A и H_B практически изолированной гомоядерной двухспиновой системы.

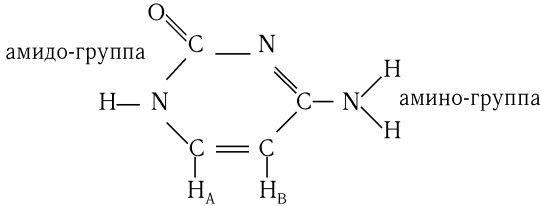


Рис. 4.7. Химическая структура молекулы цитозина.

Резонансные частоты протонов были около 500 МГц, $|\omega_A - \omega_B|/2\pi = 763$ Гц, параметр взаимодействия $\omega_{AB}/\pi = 7,2$ Гц.

Квантовой алгоритм Дойча–Джозса, как уже указывалось в гл. 2, позволяет определить является ли некоторая неизвестная бинарная функция $f_i(x) = \pm 1$ двоичной переменной $x = 0, 1$ постоянной, то есть имеет ли она только два одинаковых значения $f_{1,2}(x) = 0, 1$ для всех x или сбалансированной, для которой $f_3(x) = x$ или $f_4(x) = \text{NOT} f_3(x) = \text{NOT} x$. Для выполнения алгоритма необходимо четыре оператора \hat{U}_f , соответствующих четырем возможным бинарным функциям f_i , которые выражаются через операторы CNOT, NOT и $\hat{1}$ (2.20), (2.21). В качестве начального состояния использовалось квазичистое состояние

$$|0_A 1_B\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.57)$$

получаемое с помощью серии радиочастотных импульсов и импульсов градиента поля [4.4]. Затем выполнялась видоизмененная квантовая операция алгоритма Дойча–Джозса, в которой операторы Адамара заменялась более простыми операторами поворота спина на $\pi/2$ вокруг оси y (см. рис. 4.8), осуществляемые селективными или неселективными импульсами.

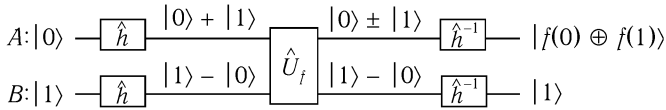


Рис. 4.8. Квантовая схема алгоритма Дойча–Джозса с псевдооператорами Адамара $\hat{h} = \hat{Y}(\pi/2)$. Последовательность операторов слева направо.

Результат действия операций \hat{U}_f зависит, как показывалось в разд. 2.2.2, от значения относительной фазы двух участвующих в суперпозиции состояний. Если относительная фаза, определяемая суммой по модулю 2 значений функций $f(0) \oplus f(1) = 0$, то конечное состояние кубита A $|0\rangle$, а если $f(0) \oplus f(1) = 1$, то его состояние $|1\rangle$.

Для считывания этого состояния производится воздействие считающим селективным импульсом $X_A(\pi/2)$, в результате которого индуцируется сигнал в катушке детектора. Если в результате операции сигнал от спина A соответствует поглощению (состояние $|0\rangle \equiv \equiv |\uparrow_A\rangle$), то $f_1(x) \oplus f_2(x) = 0$, то есть функции $f_1(x) = 0, f_2(x) = 1$; если его состояние соответствует излучению (состояние $|1\rangle \equiv \equiv |\downarrow_A\rangle$), то $f_3(x) \oplus f_4(x) = 1$, то есть функции $f_3(x) = x, f_4(x) = \text{NOT } x$.

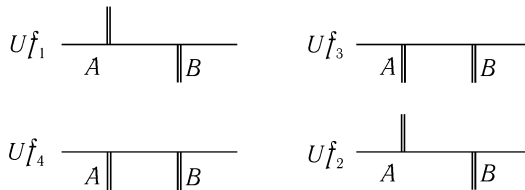


Рис. 4.9. Схематическое изображение ЯМР спектров, представляющих результат квантового алгоритма Дойча–Иозеса [4.15]. Рабочий кубит B находится в состоянии $|1\rangle$. Слабые расщепления линий обусловлены спин-спиновым взаимодействием.

Схематическое изображение экспериментальных ЯМР спектров после действия четырех операций U_{f_i} для случая, когда «рабочий» кубит B находится в состоянии $|1\rangle$, представлено на рис. 4.9. Имеется только два различных типа спектров для спина A , соответствующих сигналу поглощения с положительной линией ($f_{1,2}$) и сигналу излучения с отрицательной линией ($f_{3,4}$).

Таким образом, для решения задачи Дойча достаточно *только одной* вычислительной операции по определению относительной фазы $f(0) \oplus f(1)$, то есть результирующего состояния $|f(0) \oplus f(1)\rangle$ кубита A .

На примере *двухспиновой* системы протонов цитозина была также продемонстрирована возможность осуществления простых вариантов *алгоритма Гровера* [4.18, 4.22]. В этом случае задача состоит в быстром поиске одного из четырех возможных значений двухкубитовой бинарной функции. Классический способ такого поиска требует до *трех* вычислений функции, тогда как квантовый алгоритм Гровера позволяет произвести это всего за *одно* вычисление (итераций в случае базы из четырех данных не требуется). На начальное состояние квантового компьютера $|0_A 0_B\rangle$ действует двухкубитовый оператор Гровера \hat{G} , который для системы из двух кубитов A и B в обозначениях гл. 2 ((2.63), (2.65), (2.66)) имеет вид

$$\hat{G} = \hat{U}_s \cdot \hat{U}_v = \hat{W} \cdot \hat{U}_0 \cdot \hat{W} \cdot \hat{U}_v, \quad (4.58)$$

где $\hat{U}_s = \hat{W} \cdot \hat{U}_0 \cdot \hat{W}$ — оператор преобразования диффузии, $\hat{W} = (\hat{H}_A \otimes \hat{H}_B)$, $\hat{U}_0 = \hat{U}_{00}$ — оператор инверсии амплитуд всех состояний, кроме состояния $|00\rangle$, $\hat{U}_v \equiv \hat{U}_{ab}$ — двухкубитовый оператор инверсии амплитуды только у маркированного искомого состояния $|v\rangle = |ab\rangle$. В приложении П.4.2. показано как можно осуществить двухкубитовую операцию \hat{U}_v с помощью только двух неселективных импульсов.

Как и в случае алгоритма Дойча–Джозса с практической точки зрения удобнее заменить операторы Адамара на псевдооператоры Адамара. Квантовая схема для двухкубитового алгоритма Гровера приведена на рис. 4.10 [4.22].

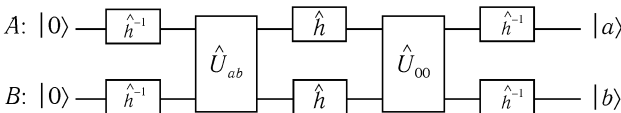


Рис. 4.10. Квантовая схема двухкубитового алгоритма Гровера.

В завершении алгоритма конечное состояние соответствует состояниям двухкубитовой системы при одном маркированном, поиск которого производится. Для его считывания система возбуждается с помо-

щью импульсов $X_A(\pi/2)$, $X_B(\pi/2)$. Для дефазировки элементов матрицы плотности, связанных с помехами, при детектировании спектров использовались импульсы градиента поля. На рис. 4.11 схематически изображены четыре различных детектируемых на выходе компьютера ЯМР спектра.

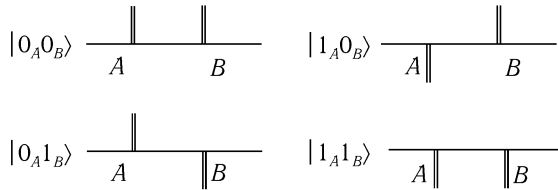


Рис. 4.11. Схематическое изображение ЯМР спектров, представляющих результат квантового алгоритма Гровера [4.22].

Состояние $|0_A 0_B\rangle$ имеет две положительные линии поглощения. Положительные линии в других из четырех спектров соответствуют состоянию кубита $|0\rangle$, тогда как отрицательная линия — кубиту в состоянии $|1\rangle$. Линии слева соответствуют кубиту A , линии справа — кубиту B . Каждый из спектров соответствует определенному маркированному состоянию $|ab\rangle$. Таким образом искомое состояние идентифицируется для двухкубитовой системы уже после одной операции по виду конечного ЯМР спектра.

4.4.3. Квантовые операции в системах с более, чем двумя кубитами

Если квантовая система состоит из более чем двух кубитов возникает необходимость более детального рассмотрения их функционирования в такой системе. Гамильтониан L -спиновой системы запишем в виде

$$\hat{H}_L = -\hbar \sum_{i=1}^L \omega_i \hat{I}_{zi} + \hbar \sum_{i < j} 2I_{ij} \hat{I}_{zi} \hat{I}_{zj}. \quad (4.59)$$

В реальных системах некоторые из постоянных I_{ij} очень малы и ими можно пренебречь, однако остается еще достаточное число таких, которыми нельзя пренебречь.

Увеличение числа взаимодействующих спинов-кубитов приводит к увеличению числа близко расположенных резонансных линий (мультиплетов) в спектре ЯМР. При выполнении одно- и двухкубитовых операций наряду с «рабочими» переходами в принципе могут возбуждаться переходы между состояниями других кубитов, на резонансных частотах близких мультиплетов. Для ЯМР квантовых компьютеров это один из источников ошибок и декогерентизации, который необходимо исключить.

С увеличением числа мультиплетов благодаря спин-спиновому взаимодействию увеличивается и ширина каждого мультиплета. Поэтому предпочтительнее иметь дело с гетероядерными системами. К сожалению, в этом случае продвинуться далеко нельзя, так как число подходящих ядер со спином $I = 1/2$ ограничено. Это прежде всего нерадиоактивные ядра ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F и ^{31}P .

В качестве относительно простых *трехспиновых* систем для выполнения операций формирования трехкубитовых максимально запутанных состояний типа GHZ использовались молекулы *трихлорэтилена* с одним протоном ^1H и с двумя неэквивалентными из-за разных химических сдвигов резонансных частот атомами ^{13}C [4.23], а также молекулы *α -аланина*, растворенного в дейтерированной воде, с тремя ядрами ^{13}C , взаимодействие с протонами которых было в значительной мере развязано [4.24] (рис. 4.12).

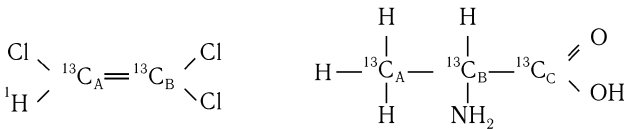


Рис. 4.12. Химическая структура молекул трихлорэтилена и α -аланина.

В полях 11,5 Тл для молекул трихлорэтилена резонансные частоты спинов ядер C_A и C_B $\omega_A/2\pi = 125,7725805$ МГц, $\omega_B/2\pi = 125,7732305$ МГц, а протона $\omega_H/2\pi = 500,1334915$ МГц, постоянные взаимодействия $\omega_{AB}/2\pi = 103$ Гц, $\omega_{HA}/2\pi = 201$ Гц, $\omega_{HB}/2\pi = 10$ Гц. Времена релаксации протонных спинов $T_1 \approx 5$ с, $T_2 \approx 3$ с, а спинов углеродных ядер $T_1 \approx 20$ с, $T_2 \approx 0,3$ с [4.23].

Для молекул α -аланина в поле 9,6 Тл резонансные частоты ядер углерода составляли ~ 100 МГц, постоянные взаимодействия $\omega_{AB}/\pi = 53,4$ Гц, $\omega_{BC}/\pi = 35,3$ Гц, $\omega_{Ac}/\pi = 1,4$ Гц [4.24].

Трехспиновая система на молекулах трихлорэтилена и α -аланина была использована также для демонстрации квантового алгоритма коррекции фазовых ошибок по квантовой схеме приведенной в гл. 2 на рис. 2.6 [4.25].

Одним из первых предложенных приложений квантового компьютера было использование квантового компьютера для моделирования других квантовых систем [4.26]. На трехкубитовом ЯМР квантовом компьютере, использующем раствор α -аланина, была выполнена имитация квантовой системы, описываемой наряду с двухчастичным гамильтонианом изинговского типа (4.5) трехчастичным гамильтонианом взаимодействия типа $\hbar\omega_{123}\hat{I}_{z1}\hat{I}_{z2}\hat{I}_{z3}$ [4.27].

О экспериментальном осуществлении квантовой телепортации на межатомные расстояния в молекулах трихлорэтилена жидкостного ЯМР трехкубитового квантового компьютера сообщалось в работе [4.28]. Для реализации трехкубитового вентиля Тоффли CCNOT использовались три из четырех наиболее сильно связанных протонов молекулы 1-хлоро-2-нитро-бензола $C_6H_3NClNO_2$ [4.4].

С целью подавления нежелательных взаимодействий в системе из большого числа спинов-кубитов могут быть использованы процедуры рефокусировки. Для этого были предложены, в частности, способы, использующие соответствующие последовательности импульсов $\hat{X}(\pi)$ [4.16, 4.17, 4.29]. Таким путем систему спинов удается разделить на малую часть «активных» спинов, эволюция которых определяется их резонансными частотами со скалярным взаимодействием между ними, и на большую часть спинов «наблюдателей» (spectators), которые остаются в своем начальном состоянии, как если бы они были заморожены. Рассмотрим, как это делается на примере последовательности рефокусирующих импульсов для простой системы, состоящей всего из трех спинов A , B и C [4.29] (рис. 4.12).

В результате действия импульсов, изображенных на рис. 4.13, эволюция системы трех спинов за время t происходит так же как эволюция одного спина A во внешнем поле. Спины B и C возвращаются в исходное состояние и никак не участвуют в операциях, то есть для них это операция идентичности («do nothing»).

Обобщение этой схемы на случай большего числа спинов производится путем дальнейшего разбиения временных интервалов и удвоения числа импульсов с каждым дополнительным спином.

Экспериментально на *трех* протонах 1H молекулы 2,3-дибромпро-

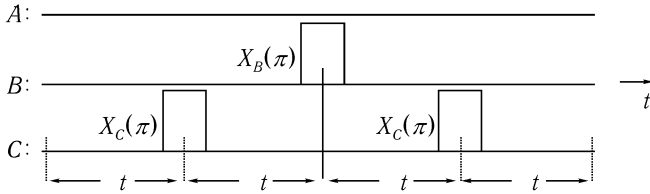


Рис. 4.13. Последовательность селективных рефокусирующих импульсов, приводящая к возвращению спинов B и C в исходное состояние и не затрагивающая состояния спина A .

пановой кислоты СНН ВrСН ВrСО₂ Н были осуществлены как однокубитовые операции изменения фазы и произвольного поворота с рефокусирующими импульсами для двух спинов, так и двухкубитовая операция CNOT с рефокусирующими импульсами только для одного спина C и одним неселективным импульсом для спинов A и B [4.29]. Аналогичный прием был использован для осуществления квантовых операций в гомоядерной спиновой системе, с *шестью* кубитами на протонах в молекуле инозина $C_5(DO)_3 O H_6 C_5 N_3 NDO$, растворенных в дейтерированном *диметилсульфоксиде* [4.30].

В общем случае число этих импульсов в последовательности может быть очень велико. Задача однако существенно упрощается, поскольку большие постоянные взаимодействия имеют место только для близко расположенных спинов, что позволяет существенно уменьшить число рефокусирующих импульсов.

Может показаться, что окажется невозможным осуществить все требуемые логические операции в такой спиновой системе в связи с тем, что некоторые необходимые спин-спиновые взаимодействия между удаленными спинами практически отсутствуют. Но это не так, поскольку каждая пара спинов связаны некоторой цепочкой из взаимодействующих соседей. Для передачи информации по такой цепочке может быть использована операция обмена квантовыми состояниями SWAP между соседними спинами. Такой прием был экспериментально продемонстрирован на гетероядерной цепочке, содержащей *пять* неэквивалентных ядер со спином $I = 1/2$: 1H , ^{15}N , $^{13}C_A$, $^{13}C_B$, ^{19}F в специально синтезированной молекуле при реализации алгоритма Дойча–Джозса [4.31].

Экспериментально, с помощью совершенно другого метода, осно-

ванного на алгоритме, использующем многокубитовые состояния типа шредингеровского котика для отметки (algorithmic cat-state benchmark) начальных квазичистых состояний в системе кубитов, были осуществлены уже квантовые операции в системе из *семи кубитов*, состоящей из четырех ядер ^{13}C и трех протонов ^1H молекулы *транс-критоновой кислоты* $\text{CHD}_2\text{CH}:\text{CHC O}_2\text{D}$, растворенной в дейтерированном бензоле [4.32]. Учтывая, что это число кубитов, по-видимому, еще не является предельным, то, с точки зрения возможности селективных воздействий на кубиты, можно думать о достижении числа кубитов в системе порядка 30 [4.7]. Ниже будут рассмотрены другие ограничения для жидкостных квантовых компьютеров и обсуждены их перспективы.

4.5. Подавление декогерентизации в ЯМР квантовых компьютерах

Как уже отмечалось, наблюдаемый макроскопический сигнал от ансамбля ядерных спинов определяется эволюцией матрицы $\hat{\rho}_\epsilon(t)$ во времени, обусловленной движением ядерных спинов, выведенных из равновесия определенными радиочастотными импульсами. Эта эволюция описывается выражением $\hat{\rho}_\epsilon(t) = \hat{U}(t) \cdot \hat{\rho}_\epsilon(0) \cdot \hat{U}^{-1}(t)$. При этом появляются недиагональные элементы матрицы плотности, описывающие *когерентность* квантового состояния. Взаимодействие с окружением приводит как к появлению различного рода ошибок, так и к затуханию недиагональных элементов, означая разрушение когерентности, то есть вызывает декогерентизацию квантового состояния. Одновременно с другой скоростью происходит затухание и диагональных элементов, сопровождаемое диссипацией энергии в квантовой системе.

Квантовая декогерентизация представляется одной из наиболее серьезных проблем, которые приходится решать при разработке конкретных схем квантовых компьютеров. Помимо *пассивных* методов исправления амплитудных и фазовых ошибок и помехоустойчивого кодирования информации в квантовых системах, использующих вспомогательные кубиты и операции обратной связи, которые были предложены Шором, Стином и Китаевым [4.33–4.37], существуют принципиально другие *активные* методы подавления декогерентизации и диссипации, основанные на использовании периодических импульсных внешних воздействий [4.38–4.42], не требующих использования вспомогательных кубитов и промежуточных измерений. Рассмотрим два из них.

4.5.1. Метод контролируемого усреднения

Метод, предложенный в [4.33–4.35], является развитием известных многоимпульсных методов ЯМР для получения высокого разрешения [4.11, 4.12, 4.43]. Он основан на контролируемом усреднении в спиновом пространстве нежелательных эффектов, определяемых взаимодействием квантовой системы с окружением, с помощью определенной последовательности рефокусирующих радиочастотных импульсов. Такое усреднение происходит естественным образом в системах обладающих механизмами сильного сужения резонансных линий, такими как броуновское вращательное и поступательное движение молекул в жидкостях, а также колебательные движения сложных молекул, быстрый скачкообразный химический обмен спинами между частями молекул, имеющих разные химические сдвиги, как в жидкостях, так и твердых телах.

Следуя работам Виолы, Книлла и Ллойда [4.39, 4.40], рассмотрим здесь достаточно общий подход к решению проблемы подавления декогерентизации с помощью *контролируемого усреднения*. Пусть квантовая система S с конечным числом спинов L , гильбертово пространство которой имеет размерность 2^L , взаимодействует с произвольным окружением B (которое характеризуется огромным числом неспиновых степеней свободы), вместе с которым она представляет собой замкнутую систему, описываемую модельным гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_{SB}, \quad (4.60)$$

где \hat{H}_{SB} — гамильтониан взаимодействия.

Начальное состояние системы определим как $\hat{\rho}_{tot}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_B(0)$, где матрица $\hat{\rho}_S(0)$ описывает начальное неравновесное чистое состояние спиновой системы. Такое состояние может быть создано с помощью определенного возбуждающего импульса (см. ниже). Квантовая декогерентизация возникает в результате запутывания степеней свободы систем S и B , генерируемого взаимодействием \hat{H}_{SB} . Недиagonальные элементы спиновой матрицы плотности $\hat{\rho}_S(t) = \text{Sp}_B\{\hat{\rho}_{tot}(t)\}$ (Sp_B — парциальный след по состояниям окружения B), описывающие эволюцию когерентности квантового состояния, затухают со временем с характерным временем декогерентизации τ_D . В результате происходит переход из чистого состояния $\hat{\rho}_S(0)$ в смешанное.

Чтобы подавить нежелательное воздействие на спиновую систему

взаимодействия \hat{H}_{SB} , добавим к \hat{H}_0 соответствующий *развязывающий* гамильтониан возмущения: $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$, действующий только на спиновую систему. Поступая аналогично тому как это делается в ЯМР высокого разрешения [4.12, 4.43] ограничимся ситуацией, когда унитарная операция $\hat{U}_1(t)$, определяется гамильтонианом возмущения, представляющим собой *циклическую* последовательность импульсов с *периодом цикла* t_c , то есть

$$\hat{U}_1(t) = \hat{T} \exp[-(i/\hbar) \int_0^t \hat{H}_1(t) dt] = U_1(t + t_c), \quad (4.61)$$

где \hat{T} — оператор упорядочения по времени. Откуда следует $\hat{U}_1(t_c) = \hat{U}_1(nt_c) = 1$, n — целое число.

Эволюция всей системы под действием гамильтониана $\hat{H}(t)$ описывается унитарным оператором

$$\hat{U}(t) = \hat{T} \exp[-(i/\hbar) \int_0^t \hat{H}(t) dt] = \hat{U}_1(t) \cdot \hat{U}_0(t), \quad (4.62)$$

$$\hat{U}_0(t) = \hat{T} \exp[-(i/\hbar) \int_0^t \tilde{H}_0(t) dt], \quad (4.63)$$

где

$$\tilde{H}_0(t) = \hat{U}_1^{-1}(t) \hat{H}_0 \hat{U}_1(t) = \hat{U}_1^{-1}(t) (\hat{H}_S + \hat{H}_{SB}) \hat{U}_1(t) \quad (4.64)$$

— гамильтониан исходной системы в так называемой *следящей* системе координат (toggling frame). Оператор эволюции (4.62) в моменты времени, отличающиеся на период цикла t_c , принимает вид

$$\hat{U}(t_c) = \hat{T} \exp[-(i/\hbar) \int_0^{t_c} \hat{H}(t) dt] = \hat{U}_1(t_c) \cdot \hat{U}_0(t_c) = \hat{U}_0(t_c). \quad (4.65)$$

Далее воспользуемся *разложением Магнуса* (W. Magnus) [4.12, 4.43], согласно которому

$$\hat{U}_0(t_c) = \hat{T} \exp[-(i/\hbar) \int_0^{t_c} \tilde{H}_0(t) dt] = \exp[-(it_c/\hbar) \bar{H}], \quad (4.66)$$

где

$$H = H^{(0)} + \overline{H}^{(1)} + H^{(2)} + \dots + H^{(r)} + \dots, \quad (4.67)$$

$$H^{(0)} = \frac{1}{t_c} \int_0^{t_c} dt \tilde{H}_0(t), \quad \overline{H}^{(1)} = \frac{-i}{2t_c} \int_0^{t_c} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 [\tilde{H}_0(t_2), \tilde{H}_0(t_1)], \dots \quad (4.68)$$

Из (4.63) следует

$$\widehat{U}(nt_c) = [\widehat{U}_0(t_c)]^n = \exp\left[-\left(\int_c / \hbar\right) \overline{H}\right]. \quad (4.69)$$

Последнее выражение означает, что движение системы при наличии периодически зависящего от времени возмущения $\widehat{H}_1(t)$ эквивалентно эволюции, наблюдаемой со *стробоскопической* выборкой в моменты времени nt_c под действием постоянного *среднего* гамильтониана \overline{H} . Для такого наблюдения используются специальные стробоскопические устройства. Заметим, что понятие среднего гамильтониана \overline{H} Магнуса близко к понятию *квазиэнергии*, введенной для квантовых систем периодически зависящих от времени Я. Б. Зельдовичем [4.44].

Разложение Магнуса сходится при $t_c < \tau_c$, где τ_c — *время корреляции*, определяющее минимальный масштаб времен, характеризующих нежелательные взаимодействия. В пределе очень быстрого контроля $t_c \Rightarrow 0$ вклады в \overline{H} слагаемых с $r \leq 1$ исчезают и стробоскопическая выборка для произвольного окружения определяется оператором $\widehat{U}(nt_c) \Rightarrow 1$, то есть рассматриваемая модельная система при условии такой выборки ведет себя как свободная от диссипации и декогерентизации: $\widehat{\rho}_{tot}(t) \Rightarrow \widehat{\rho}_{tot}(0)$.

При малых, но конечных временах цикла поправка $\overline{H}^{(1)}$ пропорциональна $(t_c/\tau_D) \ll 1$ и соответственно скорость декогерентизации будет пропорциональна $(t_c/\tau_D)^2$. Можно показать [4.43], что при выборе *симметричных* циклов, когда $\tilde{H}_0(t) = \tilde{H}_0(t_c - t)$, все нечетные поправки в (4.67) исчезают и скорость декогерентизации будет пропорциональна уже $(t_c/\tau_D)^4$. Если бы удалось создать *антисимметричный* цикл, когда $\tilde{H}_0(t) = -\tilde{H}_0(t_c - t)$, то средний гамильтониан \overline{H} был бы равен нулю и $\widehat{U}(t_c) = 1$.

В системах с сильным естественным сужением резонансных линий, обусловленных интенсивным броуновским движением, какими являются вязкие жидкости, большое время спин-спиновой релаксации T_2 , играющее роль времени декогерентизации τ_D , обусловлено взаимодействием спинов с быстро флуктуирующими локальными полями, создаваемыми электронными и ядерными спинами окружающих молекул. В этом случае характерное время корреляции этих полей $\tau_c \ll \langle \Delta\omega^2 \rangle^{-1/2}$, где $\langle \Delta\omega^2 \rangle$ — второй момент линии поглощения в отсутствие естественных механизмов сужения резонансной линии [4.14] очень мало и условие сходимости разложения Магнуса оказывается практически невыполнимым. Это означает невозможность дополнительного контролируемого усреднения такого рода взаимодействий с окружением, характеризующихся малым временем корреляции. Если же помимо естественных механизмов сильного сужения существуют другие более медленные воздействия, приводящие к случайным амплитудным и фазовым ошибкам, то очевидно контролируемое усреднение таких воздействий возможно, если их характерное время корреляции определяется сравнительно большим временем спин-спиновой релаксации $T_2 \sim \tau_D$. Тогда время цикла должно удовлетворять условию $t_c \ll \tau_D$.

В твердых телах естественные механизмы сильного сужения, характерные для жидкостей, отсутствуют и время корреляции $\tau_c \approx \langle \Delta\omega^2 \rangle^{-1/2}$, то есть определяется обратной шириной резонансной линии. Поэтому в твердых телах время τ_c имеет порядок времени декогерентизации $\tau_D \approx \langle \Delta\omega^2 \rangle^{-1/2}$. Однако при наличии электронного парамагнетизма у молекул существенным естественным механизмом сужения резонансной линии и увеличения времени декогерентизации может стать взаимодействие ядерных и быстро флуктуирующих, скажем за счет достаточно сильного обменного взаимодействия, электронных спинов, которое и будет играть роль времени корреляции [4.14, 4.45].

4.5.2. Модель последовательности идеальных мгновенных импульсов

Перейдем теперь к рассмотрению простого модельного случая, когда цикл представляет собой последовательность из конечного числа ν идеальных δ -образных импульсов, определяемых унитарными операторами P_1, P_2, \dots, P_ν и разделенных интервалами свободной эволю-

ции Δt_k , описываемой гамильтонианом \hat{H}_0 . Эти операторы удовлетворяют условию цикличности: $\hat{U}_1(t_c) = P_\nu \dots P_2 P_1 = 1$, $\sum_{k=0}^\nu \Delta t_k = t_c$. Начальный интервал Δt_0 отсчитывается от момента приложения начального возбуждающего импульса P_0 . Если ограничиться нулевым приближением для среднего гамильтониана, то получим выражение

$$\begin{aligned} \bar{H}^{(0)} &= \frac{1}{t_c} \sum_{k=0}^\nu \Delta t_k (P_k \dots P_0)^{-1} \hat{H}_0 (P_k \dots P_0) = \\ &= \hat{H}_B + \frac{1}{t_c} \sum_{k=0}^\nu \Delta t_k (P_k \dots P_0)^{-1} (\hat{H}_S + \hat{H}_{SB}) (P_k \dots P_0). \end{aligned} \quad (4.70)$$

Последовательность импульсов в цикле выбирается с таким расчетом, чтобы состояние спиновой системы возвратилось к исходному, то есть слагаемое, содержащее \hat{H}_{SB} , в сумме (4.70) было бы по возможности малым.

В качестве примера рассмотрим модель замкнутой системы, состоящей из одного спина-кубита, взаимодействующего с внешним постоянным магнитным полем и со случайным полем, создаваемым макроскопическим окружением. Модельный гамильтониан представим в виде [4.40]

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_{SB} = -\hbar\omega_0 \hat{S}_z + \hat{H}_B + \hat{S}_x B_x + \hat{S}_y B_y + \hat{S}_z B_z, \quad (4.71)$$

где линейно независимые операторы B_x, B_y, B_z являются функциями только степеней свободы окружающей среды B . При $B_x = B_y = 0$ модель описывает процессы декогерентизации, то есть влияние фазовых ошибок, но не диссипацию, поскольку коммутатор $[\hat{H}_S, \hat{H}_{SB}] = 0$. С точки зрения ЯМР это соответствует пренебрежению продольной (спин-решеточной) релаксацией $T_1 \Rightarrow \infty$. В этом случае подавления декогерентизации в нулевом приближении можно добиться, пользуясь циклом с последовательностью только *двух* $P_{1,2} = X(\pi)$ -импульсов. Такая последовательность импульсов является основой известного метода *спинового эха* Карра–Парселла (Н. Carr, E. Purcell), в первоначальном варианте которого роль окружающей среды играло случайно распределенное неоднородное внешнее постоянное поле (рис. 4.14).

Начальный импульс $X(\pi/2)$ является возбуждающим. Амплитуды сигналов эхо с учетом знака в нулевом приближении соответствуют стробоскопическим отсчетам в моменты $t = nt_c$, $n = 1, 2, \dots$. Здесь $\Delta t_0 = \Delta t/2$, $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \Delta t$.

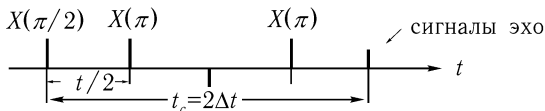


Рис. 4.14. Двухимпульсная последовательность Карра–Парселла.

При $B_x, B_y, B_z \neq 0$ модель описывает как декогерентизацию, так и диссипацию энергии в квантовой системе, сопровождающуюся амплитудными ошибками. В этом случае для цикла может быть использована следующая последовательность *четырёх* импульсов, изображённая на рис. 4.15 [4.40].

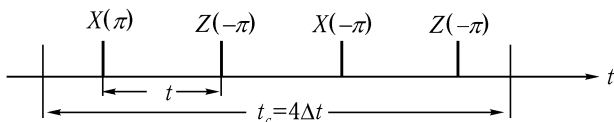


Рис. 4.15. Последовательность четырёх импульсов для подавления декогерентизации и диссипации в модели (4.71).

В технике ЯМР высокого разрешения в твёрдых телах разработан целый ряд различных многоимпульсных последовательностей импульсов, позволяющих учесть поправки, связанные, в частности, с конечной шириной импульсов, неоднородностью радиочастотного поля, вкладом некоторых остаточных членов в гамильтониане взаимодействия [4.43]. Такие последовательности могут быть использованы также при подавлении декогерентизации и диссипации в твёрдотельных квантовых ЯМР компьютерах.

Использование многоимпульсных методов подавления декогерентизации позволяет рассматривать в качестве ансамблевых квантовых систем *замороженные органические* жидкости, в которых отсутствует интенсивное броуновское движение. В таком состоянии магнитные диполь-дипольные взаимодействия уже не усредняются за счет броуновского движения молекул. Однако, если эти молекулы в твёрдом состоянии в достаточной степени упорядочены и ориентированы в пространстве, то влияние этих взаимодействий может быть существенно подавлено с помощью указанных методов [4.43]. В качестве такого твёрдого органического вещества в [4.46] предлагается дейтериро-

ванный раствор *малоновой кислоты* $\text{CO}_2\text{HCH}_2\text{CO}_2\text{H}$. Кубитами служат атомы ^1H и ^{13}C . Дейтерированное окружение должно служить достаточной изоляцией молекул друг от друга. Переход к низким температурам вплоть до микрокельвиновых обеспечивает простую инициализацию системы кубитов, большое время декогерентизации и увеличение интенсивности подлежащих измерению сигналов, а с ним и увеличение возможного числа кубитов в таком компьютере. В [4.46] это число оценивается уже значением $\sim 30 - 40$. В следующей главе будут детально обсуждены перспективы твердотельных ЯМР квантовых компьютеров различных типов.

4.6. Перспективы ансамблевых жидкостных ЯМР квантовых компьютеров

Достаточно полный анализ современного состояния и перспектив жидкостных ЯМР квантовых компьютеров был выполнен в [4.7, 4.46].

Здесь мы обсудим лишь ряд основных трудностей, существенно ограничивающих перспективы жидкостных квантовых компьютеров с точки зрения возможности создания полномасштабных ЯМР квантовых компьютеров, а также некоторые, связанные с этими трудностями проблемы:

а) Одна из них заключается в том, что в высокотемпературном пределе ($\hbar\omega/2kT \ll 1$) с увеличением числа кубитов L имеет место экспоненциальное снижение интенсивности наблюдаемого сигнала для ансамбля ядерных спинов, которая определяется величиной девиации матрицы плотности (параметр ε)

$$S \approx \varepsilon 2\gamma_{\text{A}} n V = L(\hbar\omega/kT)2^{-L}2\gamma_{\text{A}} n V, \quad (4.72)$$

где n — молекулярная плотность, V — объем образца. Так, например, для $L \approx 10$ спинов в молекуле интенсивность сигнала S уменьшается в ~ 100 раз по сравнению с односпиновым сигналом от того же образца. Современная техника еще позволяет обнаруживать такие слабые сигналы. Важно заметить, что сигнал ЯМР может быть существенно усилен за счет сверхтонкого взаимодействия ядерных и электронных спинов, если молекулы обладают электронным парамагнетизмом [4.47]. Если учесть возможность в перспективе усовершенствовать саму измерительную технику, то, как оптимистически считают авторы [4.3],

можно будет осуществить жидкостной компьютер с числом кубитов вплоть до 40 (напомним, что для полномасштабного компьютера требуется не менее 10^3 кубитов!).

Приведенные оценки основываются на малости степени поляризации спинов, определяемой при тепловом равновесии параметром $\alpha = \hbar\omega/2kT \ll 1$, малым даже при низких температурах. Однако, согласно [4.48], можно в принципе сформулировать некоторый общий алгоритм, обеспечивающий приготовление таких начальных квазичистых состояний, на которых могут выполняться квантовые вычисления *без экспоненциального уменьшения* интенсивности выходного сигнала с ростом числа кубитов, при этом может быть достигнуто число кубитов L в компьютере-молекуле $L \sim \alpha^2 N$. В этом случае, если допустить значение $\alpha \sim 1/2$, которое можно получить при использовании, например, методов оптической поляризации ядер, то для образования 10^2 кубитов достаточно будет иметь число спинов в одной молекуле-компьютере $N \leq 10^3$. Авторами работы [4.49] был также продемонстрирован отличный от рассмотренного в гл. 2 метод решения задачи Дойча–Джозса, позволяющий избежать процедур приготовления квазичистых состояний и временного усреднения, а также исключить экспоненциальное уменьшение интенсивности сигнала с увеличением числа L .

б) Серьезным препятствием на пути увеличения числа кубитов в ЯМР квантовом компьютере на молекулах в органической жидкости является отмечавшееся выше увеличение благодаря спин-спиновому взаимодействию между кубитами числа мультиплетов в спектре ЯМР и увеличение ширины каждого мультиплета. В связи с этим возникает *проблема селективного возбуждения* отдельных переходов при большом числе мультиплетов. Если даже ограничиться только гетероядерными системами, то число кубитов в таких системах не может быть, по-видимому, существенно больше десяти.

в) Другая трудность связана с тем, что характерный тактовый цикл в ЯМР квантовых компьютерах определяется периодом свободной прецессии, связанным с малым нелинейным членом взаимодействия в спиновом гамильтониане, и лежит в диапазоне от миллисекунд до секунд, то есть ЯМР квантовые логические вентили являются *медленнодействующими*. Однако если времена декогерентизации квазичистых квантовых состояний достаточно велики (от секунд до тысяч секунд), то за время тактового цикла за счет квантового параллелизма все-таки

возможно произвести достаточно большое число операций, не выходящее за рамки общих требований, необходимых для обеспечения устойчивой коррекции квантовых ошибок. В результате квантовый компьютер будет способен сделать за время тактового цикла экспоненциально большую работу по сравнению с классическим компьютером. Поэтому даже медленные скорости логических вентилях могут оказаться приемлемыми.

Так, например, как показывают оценки [4.3], задача факторизации 1000 значного числа (соответствующий регистр должен был бы иметь более 3000 кубит! Это будет уже не жидкостной компьютер) требует около 10^{23} операций, которые гигафлопный классический компьютер будет выполнять около 10^7 лет. Алгоритм Шора в идеальном случае потребует для этого порядка 10^6 операций. Если принять тактовую частоту равной 1 Гц, то время факторизации в квантовом компьютере составит около 10 дней.

г) Еще одна трудность связана с отмеченным в [4.50, 4.51] обстоятельством, заключающемся в том, что многокубитовое квазичистое состояние, описываемое матрицей плотности типа $\hat{\rho}_\varepsilon = (1 - \varepsilon)2^{-L} \cdot \hat{1} + \varepsilon|\psi\rangle\langle\psi|$, при $\varepsilon \leq (1 + 2^{2L-1})^{-1}$, оказывается *сепарабельным*, то есть может быть представлено из произведения определенных комбинаций волновых функций, что казалось бы должно означать невозможность образования запутанного квазичистого состояния, даже если состояние $|\psi\rangle\langle\psi|$ является запутанным. При $\varepsilon \sim 2 \cdot 10^{-6}$ это соответствует конечному значению числа кубитов в системе $L \leq 16$. Отсюда в [4.50] делается вывод о том, что логические операции, осуществляемые в системах с ограниченным числом кубитов, не являются истинно квантовыми, а соответствующие эксперименты следует рассматривать лишь как *имитацию* некоторых свойств реальных квантовых систем.

С другой стороны, для состояний с конечным числом кубитов оказывается можно сформулировать *классические модели* [4.52, 4.53]. Так, в [4.53] показано, что эволюция ансамбля молекул с конечным числом взаимодействующих спинов, полностью без каких-либо приближений описывается системой с конечным числом линейных связанных макроскопических уравнений для средних значений тензорных спиновых операторов возрастающего ранга (не более L), рассматриваемых как независимые переменные: $\langle\hat{I}_\alpha\rangle$, $\langle\hat{I}_\alpha\hat{I}_\beta\rangle$, $\langle\hat{I}_\alpha\hat{I}_\beta\hat{I}_\gamma\rangle$ и так далее. Число таких переменных и число уравнений растет с числом спинов как $2^{2L} - 1$ ($I = 1/2$), то есть в той же степени, что и с числом независи-

мых элементов матрицы плотности L -кубитовой системы. (Заметим что макроскопические уравнения подобного типа значительно ранее рассматривались Н. Н. Корстом [4.54]). В указанной модели средние значения спиновых операторов высокого ранга играют ту же роль, что и недиагональные элементы матрицы плотности для квазичистых состояний L -кубитовой системы. Они интерпретируются в [4.52] как своего рода «скрытые параметры».

Авторы работы [4.8] считают выводы относительно неистинной квантовости операций на квазичистых состояниях по крайней мере спорными, основываясь уже на проведенном эксперименте с квазичистым ансамблем ядерных спинов молекул хлороформа, в котором было продемонстрировано нарушение неравенств Белла, что, как известно, не совместимо с представлением о «скрытых параметрах» и что тем самым подтверждает квантовый характер логических операций в жидкостном ЯМР квантовом компьютере.

Решение этой проблемы, согласно [4.55], состоит в том, что рассматриваемое в [4.50, 4.51] представление смешанного состояния *не является единственно возможным*. Примером в случае молекулы с двумя кубитами может быть одна и та же матрица, представленная в двух разных формах, а именно, когда волновые функции факторизованы (4.71) и когда они несепарабельны или иначе говоря запутаны (4.72):

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{4}|01\rangle\langle 01| + \frac{1}{4}|10\rangle\langle 10| + \frac{1}{4}|11\rangle\langle 11|, \quad (4.73)$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho} = & \frac{1}{2}(|00\rangle + |11\rangle)(\langle 00| + \langle 11|) + \frac{1}{2}(|00\rangle - |11\rangle)(\langle 00| - \langle 11|) + \\ & + \frac{1}{2}(|01\rangle + |10\rangle)(\langle 01| + \langle 10|) + \frac{1}{2}(|01\rangle - |10\rangle)(\langle 01| - \langle 10|). \end{aligned} \quad (4.74)$$

Поскольку матрица плотности позволяет определить лишь макроскопические свойства усредненного поведения молекул в ансамбле, то результат усреднения не зависит от того, в какой форме представлена матрица плотности. Различие квантовых состояний отдельных молекул в (4.71) и (4.72) никак не отражается в макроскопических характеристиках ансамбля.

Ансамбли, описываемые разными формами одной и той же матрицы плотности, соответствуют с микроскопической точки зрения совершенно разным состояниям физической системы, но различить их

экспериментально по изменению их макроскопических свойств ансамбля оказывается невозможным. Макроскопические свойства смешанных ансамблей зависят, кроме того, от истории или способа их приготовления, в отличие от чистого ансамбля, в котором все молекулы находятся в одном и том же чистом состоянии, а среднее значение по ансамблю имеет те же свойства, что и отдельная молекула.

Таким образом, описание физической системы с помощью смешанного ансамбля не является однозначным, а *сепарабельность матрицы плотности еще не означает отсутствие запутанности*. Понятие запутывания относится к отдельным молекулам ансамбля, а не ко всему ансамблю. Состояния молекул становятся запутанными, только если сам ансамбль подготовлен соответствующим образом. С этой точки зрения средние значения от тензорных спиновых операторов высокого ранга могут отражать скорее свойства запутанности, а не играть роль скрытых параметров.

Несколько другая интерпретация дана в [4.8]. Ядерные спины каждой молекулы подготовленного квазичистого ансамбля находятся в определенном, хотя и неизвестном, но чистом состоянии, а те молекулы, которые определяют наблюдаемый сигнал от такого ансамбля, находятся в одном и том же чистом состоянии. Та часть квазичистого оператора плотности, которая проявляется в ЯМР экспериментах, состоит только из *одного чистого* квантового состояния, которое может быть как запутанным, так и незапутанным. Такая интерпретация подтверждается и другими возможностями ЯМР спектроскопии квазичистых состояний воспроизводить различные квантовые явления.

д) Более существенной является трудность, связанная с тем, что для исключения ошибок, обусловленных шумами, создаваемыми частью системы, соответствующей полностью смешанному состоянию (первое слагаемое в $\hat{\rho}_\epsilon$), а также чтобы эффективно увеличить наблюдаемый сигнал, необходимо повторить вычисления $1/\epsilon$ раз [4.51]. Это значит, что при решении, в частности, задачи факторизации, практически будет полностью компенсировано экспоненциальное ускорение квантового вычислительного процесса по сравнению с классическим процессом.

Для преодоления отмеченной трудности следует прежде всего обратиться к по возможности полностью чистым квантовым состояниям с $\epsilon \sim 1$. В ансамблевых компьютерах этого можно добиться переходя к низким температурам $\hbar\omega_N/kT \gg 1$ (но это уже не жид-

кость, а твердое тело), используя динамическую поляризацию ядер или поляризацию ядер за счет сверхтонкого взаимодействия в магнитоупорядоченных структурах для образования чистого начального состояния. Для решения проблемы селективного возбуждения должны быть использованы методы индивидуального контроля за отдельными кубитами, что потребует и разнесение кубитов на достаточные для этого расстояния (это возможно, как будет видно из последующей главы, в твердотельном варианте квантового компьютера).

Основной вывод относительно перспектив жидкостных ЯМР квантовых компьютеров состоит в следующем: эксперименты с использованием методов ядерного магнитного резонанса со спиновыми системами в молекулах органических жидкостей позволяют только продемонстрировать возможность осуществления простейших квантовых логических вентилей, каскадов вентилей, способных создавать простейшие квантовые схемы и квазичистые состояния. ЯМР квантовый компьютер на органических молекулах в жидкости из-за небольшого числа кубитов не может быть основой для построения полномасштабного квантового компьютера. Его можно рассматривать лишь как *модельный прототип* реального квантового компьютера, на котором могут отрабатываться отдельные квантовые операции и проверяться квантовые алгоритмы.

Приложение П.4

П.4.1. Развязка с зеемановскими взаимодействиями с помощью неселективного импульса

Используя соотношения (4.41), (4.42) (4.47), запишем

$$\begin{aligned} \hat{X}_{AB}(\pi) \cdot \hat{U}_{\omega}(t/2) &= \hat{X}_{AB}(\pi) \cdot [\hat{Z}_A(\Delta\omega t/4) \otimes \hat{Z}_B(-\Delta\omega t/4)] \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB}t/2) = \\ &= [\hat{Z}_A(-\Delta\omega t/4) \otimes \hat{Z}_B(\Delta\omega t/4)] \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB}t/2) \cdot \hat{X}_{AB}(\pi), \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

откуда следует

$$\hat{U}_{\omega}(t/2) \cdot \hat{X}_{AB}(\pi) \cdot \hat{U}_{\omega}(t/2) = \hat{Z}_{AB}(\omega_{AB}t) \cdot \hat{X}_{AB}(\pi). \quad (\text{П.2})$$

Полагая далее в (П.2)

$$\hat{X}_{AB}(\pi) = \hat{X}_A(\pi) \otimes \hat{X}_B(\pi) = -4(\hat{I}_{xA} \otimes \hat{I}_{xB}) \quad (\text{П.3})$$

и учитывая, что согласно (4.18)

$$\widehat{Z}_{AB}(\omega_{AB}t) = \cos(\omega_{AB}t/2)\widehat{1} - 4i \sin(\omega_{AB}t/2)(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{I}_{zB}), \quad (\text{П.4})$$

получим

$$\begin{aligned} & \widehat{U}_\omega(t/2) \cdot \widehat{X}_{AB}(\pi) \cdot \widehat{U}_\omega(t/2) = \\ & = -4 \left[\cos(\omega_{AB}t/2) \cdot (\widehat{I}_{xA} \otimes \widehat{I}_{xB}) + i \sin(\omega_{AB}t/2) \cdot (\widehat{I}_{yA} \otimes \widehat{I}_{yB}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.5})$$

В результате вклад зеэмановской составляющей в эволюцию двухспиновой системы благодаря действию рефокусирующего неселективного импульса оказывается исключенным.

П.4.2. Пример двухкубитового оператора, осуществляемого двумя неселективными импульсами

Рассмотрим оператор инверсии \widehat{U}_v амплитуды одного из состояний двухкубитовой системы (например, $|0_A 1_B\rangle$), который участвует в алгоритме Гровера (4.58). С помощью (4.16), (4.18) для оператора свободной прецессии во вращающейся системе координат запишем

$$\begin{aligned} \widehat{U}_\omega(\tau) &= \left[\widehat{Z}_A(\Delta\omega\tau/2) \otimes \widehat{Z}_B(-\Delta\omega\tau/2) \right] \cdot \widehat{Z}_{AB}(\omega_{AB}\tau) = \\ &= \left\{ \left(\cos(\Delta\omega\tau/4)\widehat{1}_A + 2i \sin(\Delta\omega\tau/4)\widehat{I}_{zA} \right) \otimes \right. \\ &\quad \left. \otimes \left\{ \left(\cos(\Delta\omega\tau/4)\widehat{1}_B - 2i \sin(\Delta\omega\tau/4)\widehat{I}_{zB} \right) \right\} \right\} \times \\ &\quad \times \left(\cos(\omega_{AB}\tau/2)\widehat{1} - 4i \sin(\omega_{AB}\tau/2)(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{I}_{zB}) \right). \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

За время $\tau = 3\pi/\Delta\omega$ это дает

$$\begin{aligned} \widehat{U}_\omega(\tau) &= \frac{1}{2} \left(\widehat{1} + 4(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{I}_{zB}) + 2i(\widehat{1}_A \otimes \widehat{I}_{zB}) - 2i(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{1}_B) \right) \times \\ &\quad \times \left(\cos(3\pi\omega_{AB}/2\Delta\omega)\widehat{1} - 4i \sin(3\pi\omega_{AB}/2\Delta\omega)(\widehat{I}_{zA} \otimes \widehat{I}_{zB}) \right) = \\ &= \exp(-i3\pi\omega_{AB}/2\Delta\omega) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - i \exp(i3\pi\omega_{AB}/2\Delta\omega) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{П.7})$$

Интересующий нас двухкубитовый оператор \widehat{U}_v , который совершает инверсию состояния $|0_A 1_B\rangle$, имеет вид

$$\widehat{U}_v = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{П.8})$$

может быть практически реализован с помощью двух неселективных импульсов [4.18].

Используя (П.5), (4.47), запишем следующее выражение для двухкубитового оператора:

$$\begin{aligned} \widehat{U}_v(t) &= \widehat{U}_\omega((t-\tau)/4) \cdot \widehat{X}_{AB} \cdot \widehat{U}_\omega((t-\tau)/4) \times \\ &\quad \times \widehat{U}_\omega(\tau) \cdot \widehat{U}_\omega((t-\tau)/4) \cdot \widehat{X}_{AB} \cdot \widehat{U}_\omega((t-\tau)/4) = \\ &= 16 \left[\cos(\omega_{AB}(t-\tau)/4) (\widehat{I}_{xA} \otimes \widehat{I}_{xB}) + i \sin(\omega_{AB}(t-\tau)/4) (\widehat{I}_{yA} \otimes \widehat{I}_{yB}) \right] \times \\ &\quad \times \widehat{U}_\omega(\tau) \cdot \left[\cos(\omega_{AB}(t-\tau)/4) (\widehat{I}_{xA} \otimes \widehat{I}_{xB}) + i \sin(\omega_{AB}(t-\tau)/4) (\widehat{I}_{yA} \otimes \widehat{I}_{yB}) \right], \end{aligned} \quad (\text{П.9})$$

из которого, полагая $\tau = 3\pi/\Delta\omega$, получим:

$$\widehat{U}_v(t) = \exp(i\omega_{AB}t/2) \left\{ \exp(-i3\pi\omega_{AB}/\Delta\omega) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\}. \quad (\text{П.10})$$

Для случая слабой связи между кубитами $\omega_{AB} \ll \Delta\omega$, $t \gg \tau$ получим выражение

$$\widehat{U}_v(t) \approx \exp(i\omega_{AB}t/2) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{П.11})$$

При $t = \pi/(2\omega_{AB})$ оператор принимает вид

$$\widehat{U}_v(\pi/(2\omega_{AB})) \approx \exp(-i\pi/4) \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{pmatrix}, \quad (\text{П.12})$$

отличающийся от (П.8), постоянными фазовыми множителями у матричных элементов.

Заметим, что если область свободной прецессии исключить, то есть положить $\tau = 0$ и $\widehat{U}_\omega(0) = 1$, то двухкубитовый оператор принимает далекий от инверсии одного состояния вид:

$$\widehat{U}(\pi/(2\omega_{AB})) = \widehat{Z}_{AB}(\pi/2) = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-i \end{pmatrix}. \quad (\text{П.13})$$

П.4.3. Элементарные сведения о геометрической фазе Берри

Наглядное представление о фазе Берри можно получить рассматривая динамику спина $I = 1/2$ в постоянном и поляризованном по кругу в перпендикулярной постоянному полю радиочастотном поле $b(t)$ с адиабатически меняющейся фазой. Переходя во вращающуюся с круговой частотой ω радиочастотного поля систему координат, для вектора Блоха \widehat{s} , представляющего движение спина (см. гл. 1), получим уравнение

$$ds(t)/dt = \Omega(t) \times s(t), \quad (\text{П.14})$$

где

$$\Omega(t) = (\omega_0 - \omega)k + \Omega_R(\cos \varphi(t)i + \sin \varphi(t)j), \quad (\text{П.15})$$

$\Omega_R = \gamma b$ — частота Раби, γ — гиромагнитное отношение, $\varphi(t)$ — медленно (адиабатически) изменяющаяся фаза. Если вектор Блоха был направлен вначале вдоль вектора $B_{eff}(0)$, то согласно адиабатической теореме он и далее останется направленным по вдоль мгновенного значения эффективного поля $B_{eff}(t) = \Omega(t)/\gamma$, которое медленно поворачивается вокруг оси z , описывая конус с углом ϑ между вектором s и осью z :

$$\cos \vartheta = \frac{\omega_0 - \omega}{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \Omega_R^2}}. \quad (\text{П.16})$$

При изменении фазы φ от 0 до 2π вектор Блоха описывает полный конус с телесным углом $2\gamma_B = \pm 2\pi(1 - \cos \vartheta)$. Знак \pm зависит от того

ориентирован ли спин по полю или против поля. Параметр γ_B , равный половине этого телесного угла и является в рассматриваемом случае геометрической фазой Берри. Замечательным свойством фазы Берри является то, что любая деформация пути движения вектора Блоха за счет помех или флуктуаций не изменяет значение фазы Берри. Подробнее смотри в [4.21, 4.56].

Литература

- [4.1] *Gershenfeld N. A., Chuang I. L.* Bulk Spin-Resonance Quantum Computation // *Science*, 1997, v. 275, № 1, pp. 350–356.
- [4.2] *Cory D. G., Fahmy A. F., Havel T. F.* Ensemble Quantum Computing by NMR Spectroscopy // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 1997, v. 94, № 5, pp. 1634–1639.
- [4.3] *Chuang I. L., Gershenfeld N., Kubines M. G., Leung D. W.* Bulk Quantum Computation with Nuclear Magnetic Resonance: Theory and Experiment // *Proc. Roy. Soc. Lond.*, 1998, v. A454, № 1969, pp. 447–467.
- [4.4] *Cory D. G., Price M. D., Havel T. F.* Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: An Experimentally Accessible Paradigm for Quantum Computing // *Physica*, 1997, v. D120, № 1–2, pp. 82–101.
- [4.5] *Knill E., Chuang I., Laflamme R.* Effective Pure States for Bulk Quantum Computation // *Phys. Rev.*, 1998, v. A57, № 5, pp. 3348–33.
- [4.6] *Aharonov D., Kitaev A., Nisan N.* Quantum Circuits with Mixed States // 1998, LANL, E-print: quant-ph/9806029, 20 p.
- [4.7] *Jones J. F.* NMR Quantum Computation: Critical Evaluation // 1998, LANL, E-print: arXiv: quant-ph/0002085, 13 p.
- [4.8] *Havel T. F., Somaroo S. S., Tseng C.-H., Cory D. G.* Principles and Demonstrations of Quantum Information Processing by NMR Spectroscopy // 1998, LANL, E-print: quant-ph/9812086, 28 p.
- [4.9] *Sharf Y., Havel T. F., Cory D. G.* Spatially Encoded Pseudo-Pure States for NMR Quantum Information Processing // 2000, LANL E-print: arXiv: quant-ph/0005076, 19 p.
- [4.10] *Slichter C. P.* Principles of Magnetic Resonance. Third Ed. — Berlin, N. Y.: Springer-Verlag, 1990, 656 p. / *Сликтер Ч.* Основы теории магнитного резонанса. / Перевод с англ. 2-го издания 1980 г. под ред. Г. И. Скоцкого. — М.: Мир, 1981, 445 с.
- [4.11] *Goldman M.* Quantum Description of High-Resolution NMR in Liquids. — Oxford: Clarendon Press, 1988, 268 p.

- [4.12] *Ernst R. R., Bodenhausen G., Wokaun A.* Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions: — Oxford: University Press, 1994, 660 p. / Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях / Перевод с англ. 1-го изд. под ред. К. М. Салихова. — М.: Мир, 1990, 710 с.
- [4.13] *Jones J. A., Hansen R. H., Mosca M.* Quantum Logic Gates and Nuclear Magnetic Resonance Pulse Sequences // Jour. Magn. Reson., 1998, v. 135, pp. 353–360.
- [4.14] *Abragam A.* The Principles of Nuclear Magnetism. — Oxford: Clarendon Press, 1961. / Абрагам А. Ядерный магнетизм. / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скряцкого. — М.: ИИЛ, 1963, 552 с.
- [4.15] *Jones J. A., Mosca M.* Implementation of a Quantum Algorithm on a Nuclear Magnetic Resonance Quantum Computer // J. Chem. Phys., 1998, v. 109, № 5, pp. 1648–1653.
- [4.16] *Jones J. A., Knill E.* Efficient Refocussing of One Spin and Two Spin Interactions for NMR Quantum Computation // Jour. Magn. Res. 1999, v. 141, pp. 322–326.
- [4.17] *Leung D. W., Chuang I. L., Yamaguchi F., Yamamoto Y.* Efficient Implementation of Selective Recoupling in Heteronuclear Spin Systems Using Hadamard Matrices // 1999, LANL, E-print: quant-ph/9904100, 7 p.
- [4.18] *Jones J. A., Mosca M.* Approximate Quantum Counting on an NMR Ansemble Quantum Computer // 1998, LANL, E-print: quant-ph/9808056, 4 p.
- [4.19] *Chuang I. L., Gershenfeld N., Kubinec M.* Experimental Implementation of Fast Quantum Searching // Phys. Rev. Lett., 1998, v. 80, pp. 3408–3411.
- [4.20] *Chuang I. L., Vandersypen L. M. K., Zhou X., Leung D. W., Lloyd S.* Experimental Realization of a Quantum Algorithm // Nature, 1998, v. 393, 14 May, pp. 143–146. / Чуанг А. Л., Вандерсипен Л. М. К., Жу К., Леунг Д. В., Ллойд С. Экспериментальная реализация квантового алгоритма. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» I. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 130–140.
- [4.21] *Jones J. A., Vedral V., Ekert A., Castagnoli G.* Geometric Quantum Computation with NMR // 1999, LANL, E-print: quant-ph/9910052, 8 p.
- [4.22] *Jones J. A., Mosca M., Hansen R. H.* Implementation of a Quantum Search Algorithm on a Nuclear Magnetic Resonance Quantum Computer // Nature, 1998, v. 393, pp. 344–346.

- [4.23] *Laflamme R., Knill E., Zurek W.H., Catasti P., Mariappan S. V. S.* NMR Greenberger-Horn-Zeilinger States // *Phil. Trans. Roy. Soc.*, 1998, v. A356, pp. 1941–1947.
- [4.24] *Nelson R.J., Cory D.G., Lloyd S.* Experimental Demonstration of Greenberger–Horn–Zeiliger Correlations using Nuclear Magnetic Resonance // *Phys. Rev.*, 2000, v. A61:022106, pp. 1–5.
- [4.25] *Cory D.G., Mass W., Price M., Knill E., Laflamme R., Zurek W.H., Havel N.F., Somaroo S.S.* Experimental Quantum Error Correction // *Phys. Rev. Lett.*, 1998, v. 81, pp. 2152–2155.
- [4.26] *Feynman R.* Simulating Physics with Computers // *Inter. Jour. Theor. Phys.*, 1982, v. 21, № 6/7, pp. 467–488. / *Фейнман Р.* Моделирование физики на компьютерах. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» II. — Ижевск: Ред. журн. «Регуляр. и хаотич. динам.», 1999, с. 96–124.
- [4.27] *Tseng C.H., Somaroo S.S., Sharf Y., Knill E., Laflamme R., Havel T.F., Cory D.G.* Quantum Simulation of a Tree-Body Interaction Hamiltonian on an NMP Quantum Computer // 1999, LANL, E-print: quant-ph/9908012, 6 p.
- [4.28] *Nielsen M.A., Knill E., Laflamme R.* Complete Quantum Teleportation by Nuclear Magnetic Resonance // *Nature*, 1998, v. 396, pp. 52–55.
- [4.29] *Linden N., Barjat H., Carbajo R.J., Freeman R.* Pulse Sequences for NMR Quantum Computers: How to Manipulate Nuclear Spins While Freezing the Motion of Coupled Neighbours // *Chem. Phys. Lett.*, 1999, v. 305, pp. 28.
- [4.30] *Linden N., Kupče E., Freeman R.* NMR Quantum Logic Gates for Homonuclear Spin Systems // *Chem. Phys. Lett.*, 1999, v. 311, pp. 321–327.
- [4.31] *Marx R., Fahmy A.F., Myers J.M., Bermel W., Glaser S.J.* Realization of a 5-Bit NMR Quantum Computer Using a New Molecular Architecture // 1999, LANL, E-print: quant-ph/9905087, 12 p.
- [4.32] *Knill E., Laflamme R., Martinez R., Tseng C.-H.* An Algorithmic Benchmark for Information Processing // *Nature*, 2000, v. 404, pp. 368–370.
- [4.33] *Shor P.* Scheme for Reducing Decoherence in Quantum Memory // *Phys. Rev.*, 1995, v. A52, № 4, pp. R2493–R2496.
- [4.34] *Steane A.M.* Error Correction Codes in Quantum Theory // *Phys. Rev. Lett.*, 1996, v. 77, № 5, pp. 793–797.
- [4.35] *Shor P.* Fault-Tolerant Quantum Computation // 1996, LANL, E-print: quant-ph/9605011, 11 p.

- [4.36] *Kitaev A. Ю.* Квантовые вычисления: алгоритмы и исправление ошибок. // УМН, 1996, т. 52, вып. 6(318), с. 54–111.
- [4.37] *Kitaev A.* Fault-Tolerant Quantum Computation by Anyone // 1997, LANL, E-print: quant-ph/9707021, 27 p.
- [4.38] *Viola L., Lloyd S.* Dynamical Suppression of Decoherence in Two-State Quantum Systems // Phys. Rev., 1998, v. A58, pp. 2733–2745.
- [4.39] *Viola L., Lloyd S.* Decoherence Control in Quantum Information Processing: Simple Models // 1998, LANL, E-print: quant-ph/9809058, 9 p.
- [4.40] *Viola L., Knill E., Lloyd S.* Dynamical Decoupling of Open Quantum Systems // Phys. Rev. Lett., 1999, v. 82. pp. 2417–2421.
- [4.41] *Duan L.-M., Guo G.-C.* Pulse Controlled Noise Suppressed Quantum Computation // 1998, LANL, E-print: quant-ph/9807072, 12 p.
- [4.42] *Vitali D., Tombesi P.* Using Parity Kicks for Decoherence Control // 1998, LANL, E-print: quant-ph/9808055, 11 p.
- [4.43] *Haeberelein U.* High Resolution NMR in Solids. Selective Averaging. — N.Y.: Acad. Press, 1976. / Хеберлен У., Меринг М. ЯМР высокого разрешения в твердых телах / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скромко-го и Э. Т. Липпмаа. — М.: Мир, 1980, 504 с.
- [4.44] *Зельдович Я. Б.* Квазиэнергия квантовой системы, подвергающейся периодическому воздействию // ЖЭТФ, 1966, т. 51, с. 1492–1509.
- [4.45] *Кожин А. А., Скромцкий Г. В.* Теория парамагнитного резонанса в системах, содержащих два сорта магнитных моментов // ЖЭТФ, 1959, т. 37, вып. 2(8), с. 482–489.
- [4.46] *Cory D. G., Laflamme R., Knill E., Viola L., Havel N. F., Boulant N., Boutis G., Fortunato E., Lloyd S., Martinez R., Negrevergne C., Pravia M., Sharf Y., Teklemariam G., Weinstein Y. S., Zurek W. H.* NMR Based Quantum Information Processing: Achievements and Prospects // 2000, LANL, E-print: arXiv: quant-ph/0004104, 33 p.
- [4.47] *Валуев К. А.* Магнитный резонанс на ядрах парамагнитных атомов. // ЖЭТФ, 1957, т. 33, вып. 4(10), с. 1045–1047.
- [4.48] *Schulman L. J., Vazirani U.* Scalable NMR Quantum Computation // 1998, LANL, E-print: quant-ph/9804060, 16 p.
- [4.49] *Myers J. M., Fahmy A. F., Glaser S. J., Marx R.* Rapid Solution of Problems by Nuclear-Magnetic Resonance Quantum Computation // 2000, LANL, E-print: arXiv: quant-ph/0007043, 14 p.
- [4.50] *Braunstein S. L., Caves C. M., Jozsa R., Linden N., Popescu S., Schack R.* Separability of Very Noisy Mixed States and Implications for NMR Quantum Computing // Phys. Rev. Lett., 1999, v. 83. pp. 1054.

-
- [4.51] *Linden N., Popescu S.* Good Dynamics Versus Bad Kinematics. Is Entanglement needed for Quantum Computation? // 1999, LANL, E-print: quant-ph/9906008, 4 p.
- [4.52] *Schack R., Caves C. M.* Classical Model for Bulk-Ensemble NMR Quantum Computation // 1999, LANL, E-print quant-ph/9903101, 14 p.
- [4.53] *Filippo S. De.* Equivalence between NMP Spectroscopy and Computing with classical Tops and with Spin 1/2 Nuclei // 1999, LANL, E-print: quant-ph/9911085, 6 p.
- [4.54] *Корст Н. Н.* К теории формы линии и релаксации в парамагнитном резонансе. Кандидатская диссертация. — М.: Институт химической физики АН СССР, 1962; ЖЭТФ, 1961, т.40, с. 249.
- [4.55] *Long G. L., Yan H. Y., Li Y. S., Tu C. C., Zhu S. J., Ruan D., Sun Y., Tao J. X., Chen H. M.* On the Quantum Mechanical Nature in Liquid NMR Quantum Computing // 2000, LANL, E-print: arXiv:quant-ph/0007077, 4 p.
- [4.56] *Ekert A., Ericsson M., Hayden P., Inamori H., Jones J. A., Oi L. K. L., Vedral V.* Geometric Quantum Computation // 2000, LANL, E-print: arXiv: quant-ph/0004015, 15 p.

ГЛАВА 5

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ ЯМР КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ

«Невозможное сегодня станет возможным завтра».

К. Э. Циолковский

5.1. Полупроводниковый ЯМР квантовый компьютер (модель Кейна)

5.1.1. Основные требования к полупроводниковой структуре

Качественно отличный от ансамблевого жидкостного ЯМР квантового компьютера вариант твердотельного квантового компьютера, который может содержать практически неограниченное число хорошо изолированных ядерных спинов-кубитов, был предложен Б. Кейном (B. Kane) в 1998 году [5.1]. Основой этого варианта является кремниевая МОП-структура, где в тонкий слой вблизи поверхности *бесспинового* изотопа кремния ^{28}Si внедрены донорные атомы стабильного изотопа фосфора ^{31}P , замещающие атомы кремния в узлах кристаллической решетки. Такие доноры обладают ядерными спинами $I = 1/2$. Последние не взаимодействуют с окружающими атомами кремния, но могут косвенно взаимодействовать с ядерными спинами соседних донорных атомов через сверхтонкое взаимодействие с электронами за счет частичного перекрытия (гибридизации) электронных волновых функций, подобно взаимодействию ядерных спинов различных атомов в органических молекулах. Таким образом, ядерные спины донорных атомов в рассматриваемой кремниевой структуре представляются *идеальными кандидатами* для выбора в качестве кубитов.

Донорные атомы с ядерными спинами в полупроводниковой структуре предполагается расположить регулярным образом с достаточной

точностью каждый под «своим» управляющим металлическим затвором (затвор **A**), изолированным от поверхности кремния тонким диэлектриком (например, окисью кремния толщиной порядка нескольких нанометров). Затворы **A** образуют линейную решетку произвольной длины с периодом l и служат для индивидуального управления кубитами (рис. 5.1).

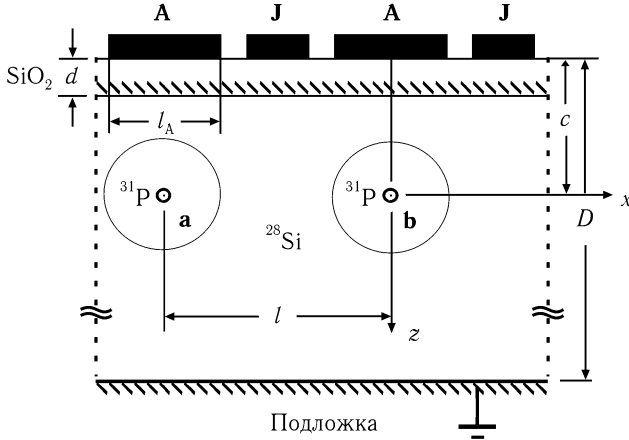


Рис. 5.1. Схематическое изображение двух ячеек полупроводниковой структуры, $l \sim 20$ нм [5.1].

Мелкие электронные примесные состояния доноров имеют сравнительно большое значение эффективного борковского радиуса, который и задает *нанометровый* масштаб расстояний в системе спинов-кубитов в полупроводниковой структуре. Для формирования таких структур предполагается воспользоваться приемами современной нанотехнологии, в частности, методами эпитаксиального выращивания, сканирующей зондовой нанолитографией в сверхвысоком вакууме на основе сканирующих туннельных и атомных силовых микроскопов, электронно-лучевой и рентгеновской литографией [5.2].

Анализ принципов, заложенных в основу предложенного в [5.1] варианта полупроводникового ЯМР квантового компьютера был проведен затем в [5.3, 5.4], и особенно детально в [5.5], где были отмечены преимущества и недостатки исходного варианта и приводится ряд дополнительных соображений, развивающих эти принципы. В последующем мы рассмотрим эти соображения.

Для исключения влияния переходов между различными электронными спиновыми состояниями необходимо, чтобы электроны донорных атомов занимали только нижнее спиновое состояние в магнитном поле, то есть были полностью поляризованы. Для этого необходимы низкие температуры, такие что $T \ll 2\mu_B B/k$. В полях $B \geq 2$ Тл это соответствует температурам $T \leq 0,1$ К, гораздо более низким, чем температура вымораживания орбитальных электронных состояний доноров. Следовательно, доноры будут оставаться, кроме того, и в неионизированном *основном орбитальном S-состоянии*.

Отметим, что для упрощения конструкции полупроводникового ЯМР квантового компьютера желательно было бы использовать более высокие, чем приведенные выше рабочие температуры, а также более слабые внешние поля. Такая возможность была рассмотрена Кейном в [5.5]. Для достижения практически полной поляризации электронных спинов при гелиевых температурах и меньших значениях внешнего магнитного поля в [5.5] предлагалось использовать особого рода устройства, названные «спиновым холодильником», которые позволили бы создать состояния с высокой степенью поляризации электронных спинов, что эквивалентно существенному снижению спиновой температуры по сравнению с температурой решетки. Такое неравновесное состояние будет сохраняться в течение времени, определяемом временем спин-решеточной релаксации электронов T_1 , которое при гелиевых температурах достаточно велико. Из таких холодильников можно было бы создать каскад, который бы позволил получать и поддерживать необходимую электронную поляризацию даже в отсутствие внешнего магнитного поля.

Сам кремний и окисел кремния должен быть очищен по крайней мере до $\sim 10^{-2}\%$ от изотопа ^{29}Si , обладающего спином $I = 1/2$, который содержится в количестве 4,7% в естественном кремнии.

Использование полупроводниковых структур на основе элементов III и V групп в этом варианте квантового компьютера исключается, поскольку они не имеют бесспиновых изотопов. Однако можно создать бесспиновые полупроводниковые структуры на основе других элементов IV группы. В случае германия спином ($I = 9/2$) обладает только один изотоп ^{73}Ge , содержащийся в естественном германии в количестве 7,76%. Изотоп ^{13}C со спином $I = 1/2$ содержится в естественном углероде в количестве 1,1%. Поэтому могут быть использованы при должной изотопной очистке также такие бесспиновые полупроводни-

ковые материалы и структуры на их основе, как, например, Ge, SiGe, Si/Si_xGe_{1-x} и SiC.

Окись кремния SiO₂ не является идеальным диэлектриком, поскольку неизбежно содержит заряженные центры, связанные с оборванными связями. Поэтому были разработаны и другие эпитаксиальные барьеры на кремнии с исключительно низкой плотностью дефектов. Наиболее перспективными для применения в квантовых компьютерах, по-видимому, являются гетероструктуры на основе элементов IV группы: Si/Si_xGe_{1-x}.

Заметим, что из-за несогласования постоянных решетки Si и Ge гетероструктура неизбежно содержит напряженные слои. Благодаря этому, в напряженном слое кремния вблизи границы Si/Si_xGe_{1-x} на подложке с ориентацией (100), эффективная масса электрона при движении вдоль слоя много меньше массы при движении в перпендикулярном направлении, и, поэтому, эффективный боровский радиус донорных электронов вдоль слоя оказывается существенно больше, чем в МОП-структуре.

5.1.2. Электрон-ядерная спиновая система донорного атома в магнитном поле

Ядерный и электронный спины донорного атома, находящегося в основном орбитальном состоянии $\Psi_0(\mathbf{r})$, взаимодействуют между собой посредством сверхтонкого и диполь-дипольного магнитного взаимодействий. Однако последнее, после усреднения по орбитальному электронному S -состоянию, обращается в нуль и остается лишь *сверхтонкое* взаимодействие, спиновый гамильтониан которого в системе единиц СИ определяется формулой Ферми (E. Fermi) в виде:

$$\widehat{H}_{IS} = A(\widehat{\mathbf{I}}\widehat{\mathbf{S}}), \quad (5.1)$$

где

$$A = \frac{2\mu_0}{3} 2\mu_B g_N \mu_N |\Psi_0(0)|^2 \cdot (\widehat{\mathbf{I}}\widehat{\mathbf{S}}) \quad (5.2)$$

— постоянная сверхтонкого взаимодействия, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-1}$ Тл² см³/ Дж, $\mu_N = 5,05 \cdot 10^{-27}$ Дж/Тл — ядерный магнетон, и для ³¹P $g_N = 2,26$. С помощью экспериментально найденного значения постоянной сверхтонкого взаимодействия [5.6] $A/(2\pi\hbar) = 116$ МГц, для вероятности находжде-

ния электрона на ядре донора (координата $\mathbf{r} = 0$), получим $|\Psi_0(0)|^2 = 0,43 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$.

Спиновый электрон-ядерный гамильтониан для донорного атома имеет вид:

$$\hat{H} = 2\mu_B \mathbf{B}\hat{\mathbf{S}} - g_N \mu_N \mathbf{B}\hat{\mathbf{I}} + A(\hat{\mathbf{I}}\hat{\mathbf{S}}), \quad (5.3)$$

четыре энергетических уровня которого описываются формулой *Брейта-Раби* (G. Breit, I. Rabi) [5.7], которая для $I = S = 1/2$ (ось z параллельна \mathbf{B}) имеет вид:

$$E(F, M_F) = -\frac{A}{4} - g_N \mu_N B M_F - (-1)^F \frac{A}{2} \sqrt{1 + 2M_F X + X^2}, \quad (5.4)$$

где $X = \frac{2\mu_B + g_N \mu_N}{A} B \approx \frac{2\mu_B B}{A}$, $F = I \pm 1/2 = 1, 0$, при этом $M_F = M + m = \pm 1, 0$ при $F = 1$ и $M_F = 0$ при $F = 0$, M, m — собственные значения операторов \hat{S}_z и \hat{I}_z . Зависимость энергетических уровней от X показана на рис. 5.2.

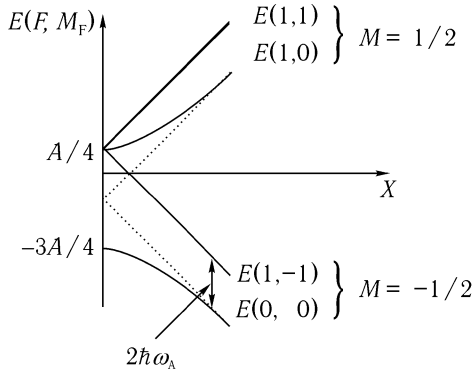


Рис. 5.2. Схема энергетических уровней электрон-ядерной спиновой системы донорного атома.

Для энергии основного спинового состояния $F = 0, M_F = 0$ ($M = -1/2, m = 1/2$) получим

$$E(0, 0) = -A/4 - (A/2)\sqrt{1 + X^2}. \quad (5.5)$$

Следующий возбужденный энергетический уровень соответствует состоянию $F = 1$, $M_F = -1$ с другим состоянием ядерного спина ($M = -1/2$, $m = -1/2$):

$$E(1, -1) = \frac{A}{4} + g_N \mu_N B - \frac{A}{2} X. \quad (5.6)$$

Таким образом, разность энергий двух состояний ядерного спина, взаимодействующего с электроном донорного атома, не изменяющим своего состояния, имеет простой вид (при $\mu_B \gg \mu_N$ и $A^2/(2\mu_B B)^2 \ll 1$, $X \gg 1$):

$$\begin{aligned} 2\pi\hbar\nu_A &= E(1, -1) - E(0, 0) = \frac{A}{2} + g_N \mu_N B - \frac{A}{2} X + \frac{A}{2} \sqrt{1 + X^2} \approx \\ &\approx \frac{A}{2} + g_N \mu_N B + \frac{A^2}{8\mu_B B} \approx \frac{A}{2} + g_N \mu_N B. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Для донорных атомов ^{31}P первое слагаемое в (5.7) превышает второе в полях $B < 3,5$ Тл. В этом случае ядерная резонансная частота ν_A определяется преимущественно стационарным локальным магнитным полем, создаваемым на ядре электронной спиновой поляризацией.

Состояние $|1, -1\rangle$ в базисе M, m эквивалентно состоянию $|M=-1/2, m=-1/2\rangle \equiv |\downarrow, \downarrow\rangle$, а состояние $|0, 0\rangle$ является в этом же базисе синглетной суперпозицией состояний следующего вида

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{X}{\sqrt{1 + X^2}} \right)^{1/2} |1/2, -1/2\rangle - \\ &- \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{X}{\sqrt{1 + X^2}} \right)^{1/2} |-1/2, 1/2\rangle. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Резонансная частота Раби Ω , соответствующая переходам между состояниями $|1, -1\rangle$ и $|0, 0\rangle$ (рис. 5.2), определяется матричным элементом \hat{H}_{rf} от гамильтониана взаимодействия с вращающимся с резонансной частотой ν_A в перпендикулярной внешнему полю плоскости радиочастотном поле с амплитудой b :

$$2\pi\Omega = \gamma_{\text{eff}}(X)b = (2/\hbar)|\langle 0, 0|\hat{H}_{\text{rf}}|1, -1\rangle|, \quad (5.9)$$

где

$$\hat{H}_{\text{rf}} = \left(2\mu_B \hat{S}_x - g_N \mu_N \hat{I}_x \right) \cdot b. \quad (5.10)$$

Для эффективного гиромагнитного отношения γ_{eff} получим

$$\gamma_{\text{eff}}(X) = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \left| \left(1 - \frac{X}{\sqrt{1+X^2}} \right)^{1/2} 2\mu_B + \left(1 + \frac{X}{\sqrt{1+X^2}} \right)^{1/2} g_N\mu_N \right|. \quad (5.11)$$

Частота Раби имеет максимальное значение при $X = 0$ с $\gamma_{\text{eff}}(0) = (1/\sqrt{2})\mu_B/\hbar$ и быстро монотонно уменьшается до значения, соответствующего изолированному ($A \Rightarrow 0$) ядерному спину $\gamma_{\text{eff}}(X \gg 1) = \gamma_N = g_N\mu_N/2\hbar$. Поэтому с точки зрения скорости выполнения квантовых операций, которая определяется частотой Раби, желательно работать в области малых внешних полей, при которых $X \leq 1$. Это, кроме того, позволит уменьшить влияние поля на соседние полупроводниковые устройства.

При значениях $A \neq 0$, $X \neq \infty$ радиочастотное поле в процессе ЯМР воздействует не непосредственно на ядерный спин, а через поперечную составляющую электронной поляризации. В результате ядерный спин чувствует гораздо более сильное переменное локальное магнитное поле по сравнению с внешним радиочастотным полем. На такое усиление сигнала ядерного резонанса в парамагнитных системах, как уже отмечалось, было указано в работе Валиева [5.8].

Далее, следуя [5.1], примем $B = 2$ Тл и для ядерной резонансной частоты получим $\omega_A/2\pi = 92,6$ МГц.

5.1.3. Электронная структура и постоянная сверхтонкого взаимодействия донорного атома в электрическом поле затвора

Значение постоянной сверхтонкого взаимодействия зависит от электронного состояния донора, определяемого в свою очередь зонной структурой основного полупроводника. В кремнии зона проводимости содержит *шесть* изоэнергетических долин с минимумами, смещенными относительно центра зоны Бриллюэна в направлении трех ортогональных осей четвертого порядка на вектор \mathbf{k}_j ($j = 1, 2, \dots, 6$) ($|\mathbf{k}_j| = k_0$). С этими осями симметрии совпадают три оси симметрии четвертого порядка кристаллической структуры кремния.

Орбитальные волновые функции электрона донорного атома на узле решетки кремния соответствуют представлениям группы симметрии

тетраэдра T_d и выражаются суперпозициями вида [5.9]

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^6 \alpha_j F_j(\mathbf{r}) \cdot \psi(\mathbf{k}_j, \mathbf{r}), \quad (5.12)$$

где $\psi(\mathbf{k}_j, \mathbf{r})$ — резко меняющаяся в области порядка постоянной решетки блоховская функция, соответствующая точкам шести минимумов \mathbf{k}_j в зоне Бриллюэна, нормированная в объеме Ω единичной ячейки кристалла:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} |\psi(\mathbf{k}_j, \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1. \quad (5.13)$$

Для кремния приводится значение $|\psi(\mathbf{k}_j, 0)|^2 = 186 \pm 18$ [5.9], указывающее на сильную локализацию электрона проводимости на узле решетки. Волновая функция $F_j(\mathbf{r})$ описывает плавную модуляцию блоховских функций, обусловленную наличием донорного атома; они удовлетворяют следующему уравнению Шредингера с эффективными массами:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_l} \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} - \frac{\hbar^2}{2m_t} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_s\epsilon_0 r} - E_d \right) F_j(\mathbf{r}) = 0, \quad (5.14)$$

где ось z_j параллельна \mathbf{k}_j и отсчитывается от положения донорного атома, E_d — собственные значения энергии электрона донорного атома, $\epsilon_s = 11, 9(\text{Si})$, $\epsilon_0 = 8, 85 \cdot 10^{-14} \text{ Ф/см}$.

Основное состояние донорного электрона в кремнии принадлежит одномерному (невыврожденному) представлению A_1 в обозначениях Мулликена (R. S. Mulliken) группы тетраэдра T_d . Волновая функция этого состояния может быть представлена в виде суперпозиции с равными весами $\alpha_j = \sqrt{1/6}$ [5.9]:

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{1/6} \sum_{j=1}^6 F_j^{(1s)}(\mathbf{r}) \cdot \psi(\mathbf{k}_j, \mathbf{r}), \quad (5.15)$$

Вариационные вычисления с пробной модулирующей волновой функцией для основного состояния, подобного $1s$ -состоянию атома водорода (оно переходит в $1s$ -состояние атома водорода при $m_t = m_l$) вида

$$F_j^{(1s)}(\mathbf{r}) = (\pi a_t^2 b_l)^{-1/2} \exp[-(\rho^2/a_t^2 + z_j^2/a_l^2)^{1/2}], \quad (5.16)$$

где $\rho^2 = x^2 + y^2$, для кремния и германия дали несколько отличающиеся от эффективных боровских радиусов с поперечными и продольными эффективными массами значения параметров [5.9]:

$$\begin{aligned} a_t(\text{Si}) &= 2,50 \text{ нм}, & a_l(\text{Si}) &= 1,42 \text{ нм}, \\ a_t(\text{Ge}) &= 6,45 \text{ нм}, & a_l(\text{Ge}) &= 2,27 \text{ нм}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

и следующие значения энергии основного состояния E_{d0} (в скобках приведены экспериментальные значения энергии ионизации)

$$\begin{aligned} E_{d0}(\text{Si}) &= -0,029 \text{ эВ} \quad (-0,045 \text{ эВ}), \\ E_{d0}(\text{Ge}) &= -0,009 \text{ эВ} \quad (-0,012 \text{ эВ}). \end{aligned} \quad (5.18)$$

Состояния донорного атома, отвечающие той же функции $F_j^{(1s)}(\mathbf{r})$, но с набором весовых коэффициентов, соответствующих двумерному E_1 и трехмерному T_1 представлениям группы тетраэдра, являются возбужденными и рассматриваться не будут.

Полученное теоретическое значение вероятности нахождения электрона в области донорного атомного ядра в кремнии

$$|\Psi_0(0)|^2 = 6(F_j^{(1s)}(0))^2 |\psi(\mathbf{k}_j, 0)|^2 = \frac{6 \cdot 186}{\pi a_t^2 a_l} = 0,042 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3} \quad (5.19)$$

меньше приведенного выше экспериментально измеренного почти в 10 раз, а значение энергии ионизации занижено в 1,5 раза. Это объясняется более слабой зависимостью от координат электрического потенциала в уравнении (5.14), создаваемого донорным атомом в кремнии на малых расстояниях, промежуточных между значением ковалентного кристаллохимического радиуса фосфора 0,11 нм [5.10] и постоянной решетки кремния 0,54 нм. В этой малой области можно принять, что $(F_j^{(1s)}(\mathbf{r}))^2 \approx (F_j^{(1s)}(0))^2 \neq (\pi a_t^2 b_l)^{-1}$. Используя экспериментальное значение для $|\Psi_0(0)|^2$, найдем $(F_j^{(1s)}(0))^2 = 3,94 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Теперь рассмотрим изменение энергии основного состояния, обусловленное отклонением потенциала от потенциала точечного заряда [5.11]:

$$\Delta E_{d0} = \frac{2\pi}{3} (F_j^{(1s)}(0))^2 \frac{q^2}{4\pi\epsilon_s\epsilon_0} \overline{r^2}, \quad (5.20)$$

где $\overline{r^2}$ — средний квадрат радиуса области, где имеет место отклонение потенциала. Если в качестве изменения энергии основного состояния принять разность между экспериментальным и вычисленным (5.18) значениями $\Delta E_{d0} = 0,045 - 0,029 = 0,016$ эВ, то из (5.20) найдем разумную оценку для радиуса $(\overline{r^2})^{1/2} = 0,42$ нм.

Заметим, что при вычисления величины $|\Psi_0(0)|^2$ для германия, кроме соответствующих значений вариационных параметров, следует учесть то, что центры эллипсоидов равной энергии расположены в центрах восьми шестиугольных граней зоны Бриллюэна и в результате сумма по j будет содержать только четыре слагаемых [5.9], при этом с другим численным значением $|\psi(\mathbf{k}_j, 0)|^2$. Экспериментальное значение постоянной сверхтонкой структуры для атома ^{31}P составляет $A = 15 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1} = 45 \text{ МГц}$, g — фактор синглетного электронного состояния $g = 1,56$, а $|\Psi_0(0)|^2 = 0,22 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$ [5.6].

Пусть направление в кристалле на соседние доноры (ось x) совпадает с одной из трех осей симметрии четвертого порядка, например, [100], то есть перпендикулярно направлению, в котором ориентированы четыре из шести эллипсоидов энергетических долин. В этом случае эффективный борковский радиус a_t электронов для этих *четырёх* симметричных долин в указанном направлении будет существенно больше, чем в любом другом направлении, поскольку он будет определяться в основном поперечной эффективной массой m_t , которая значительно меньше поперечной продольной эффективной массы m_l . Значением этого эффективного борковского радиуса будет определяться протяженность волновой функции донорного электрона, а значит, и характерный масштаб полупроводниковой структуры в направлении оси x .

Заметим, что в отличие от кремния направление на соседний донор в германии из тех соображений следует выбрать вдоль одной из шести осей симметрии второго порядка, например [110], перпендикулярной двум из четырех осей третьего порядка в зоне Бриллюэна, вдоль которых ориентированы эллипсоиды долин.

С помощью электрического поля, создаваемого затворами **A**, можно изменять распределение электронной плотности вблизи ядра в основном состоянии, подгоняя, соответственно, *индивидуальным образом* постоянную сверхтонкого взаимодействия и резонансную частоту каждого ядерного спина. Это позволяет осуществить квантовые операции путем селективного воздействия резонансных радиочастотных импульсов на ядерные спины определенных доноров.

Зависимость постоянной сверхтонкого взаимодействия от потенциала затвора \mathbf{A} рассматривалась в [5.1, 5.3–5.5]. Приведем здесь результаты оценок, сделанные в [5.3, 5.4]. Для этого представим затвор, расположенный на поверхности ($z = -c$) полубесконечной полупроводниковой структуры, в виде круглого диска радиуса $a = l_A/2$. Учитывая, что при низких температурах собственный полупроводник практически не отличается от диэлектрика и полагая, что размеры $D \gg c > d$, воспользуемся известным выражением для электрического потенциала, создаваемого потенциалом V на затворе, в точке с координатами $\mathbf{r} = (\rho, z)$, $\rho^2 = x^2 + y^2$ полубесконечного диэлектрика [5.12]

$$\varphi(\rho, z) = \frac{2V}{\pi} \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{2a^2}{\rho^2 + (z+c)^2 - a^2 + [(\rho^2 + (z+c)^2 - a^2)^2 + 4a^2(z+c)^2]^{1/2}}}, \quad (5.21)$$

откуда вблизи донорного атома, расположенного при $z = \rho = 0$, получим

$$\varphi(0, z) = \frac{2V}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{a}{z} = \frac{2V}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{a}{c} - E_c z + \frac{E'_c}{2} z^2 + \frac{E''_c}{2} \rho^2 \dots, \quad (5.22)$$

где

$$E_c = -\frac{d\varphi(0, c)}{dz} = \frac{2V}{\pi} \frac{a}{a^2 + c^2}, \quad (5.23)$$

$$E_{cz} = \frac{2V}{\pi} \frac{ac}{(a^2 + c^2)^2}, \quad E_{c\rho} = \frac{2V}{\pi} \frac{\sqrt{2}ac^4}{(a^2 + c^2)^{7/2}}$$

— напряженность электрического поля, его градиенты в направлении оси z и вдоль радиального направления ρ в месте расположения донорного атома. Уравнение (5.14) теперь следует дополнить гамильтонианом возмущения $\hat{H}_\varphi = -q\varphi(0, z)$. Если задано a , то для получения возможно большего значения E_c следует выбрать по возможности малое $c \ll a$, но не меньше борковского значения борковского радиуса в направлении оси z , тогда $E_c \leq 2V/\pi a$. В этом случае третьим и четвертым слагаемыми в (5.22) можно пренебречь.

Первые два слагаемых в разложении (5.22) дают в поправку к модулирующей волновой функции $F_j^{(1s)}(0)$ основного состояния донора (координаты $\mathbf{r} = 0$) только во втором порядке теории возмущений.

Недиагональные матричные элементы оператора возмущения отличны от нуля между четными состояниями $F_j^{(1s)}(\mathbf{r})$ и нечетными возбужденными состояниями, подобными $2p$ и $3p$ -состояниям атома водорода, которые обозначим $F_j^{(2p)}(\mathbf{r})$ и $F_j^{(3p)}(\mathbf{r})$. Энергии соответствующих возбужденных состояний донора в кремнии [5.9] $E_{2p} = -0,0109$ эВ, $E_{3p} = -0,0057$ эВ. Поскольку значение функции возбужденных состояний в области ядра $F_j^{(2p)}(0) = F_j^{(3p)}(0) = 0$, то искомая поправка, отличная от нуля при $z = 0$, будет определяться той частью выражения второго порядка теории возмущений [5.11], которая пропорциональна функции основного состояния $F_j^{(1s)}(0)$ и:

$$\frac{\Delta F^{(1s)}(V)}{F^{(1s)}(0)} = -\frac{q^2 E_c^2}{2} \sum'_m \frac{|\langle 0|z|m\rangle|^2}{(E_m - E_{d0})^2}, \quad (5.24)$$

где $m = 2p, 3p$ и т. д. Таким образом, смещение распределения электронной плотности относительно положения ядра донорного атома независимо от направления электрического поля по оси z приводит к одному и тому же *уменьшению* A .

Поскольку разности энергий основного и возбужденных состояний $E_{2p} - E_{d0} = 0,034$ эВ, $E_{3p} - E_{d0} = 0,039$ эВ, \dots , $0,045$ эВ близки между собой, то полагая в знаменателе один из множителей равным некоторому среднему значению от $(E_m - E_{d0})^{-1} \sim (\Delta E)^{-1} \approx (0,04 \text{ эВ})^{-1}$ и вынося его из-под знака суммы, выразим эту поправку через изменение энергии основного состояния во втором порядке теории возмущений, а затем через поляризуемость χ атома в электрическом поле [5.11]:

$$\frac{\Delta F^{(1s)}(V)}{F^{(1s)}(0)} \approx -\sum'_m \frac{2q^2 |\langle 0|z|m\rangle|^2}{E_m - E_{d0}} \frac{E_c^2}{4\Delta E} = -\frac{\chi E_c^2}{4\Delta E}. \quad (5.25)$$

Выражение для относительной поправки к постоянной сверхтонкого взаимодействия донорного атома представим в виде

$$\Delta A(V)/A \approx 2 \frac{\Delta F^{(1s)}(V)}{F^{(1s)}(0)} \approx -\frac{\chi E_c^2}{2\Delta E}. \quad (5.26)$$

Поляризуемость χ донорного атома в кремнии оценим по формуле для атома водорода [5.11], используя значение эффективного боровского радиуса $a_B^* = 2$ нм [5.9]. В системе единиц СИ она имеет вид $\chi = 4\pi\epsilon_0 \cdot (9/2)(a_B^*)^3 = 4 \cdot 10^{-32} \text{ Ф} \cdot \text{см}^2$. В результате для поправки (5.26)

при $E_c \sim 2V/\pi a$, $a = 10$ нм, V — в вольтах получим:

$$\Delta\nu_A(V)/\nu_A \approx \Delta A(V)/A \approx -2\Delta F_j^{(1s)}(V)/F_j^{(1s)}(0) \approx -5V^2. \quad (5.27)$$

Как показала оценка вкладов следующих членов разложения в (5.22) при произвольном значении c/a [5.13, 5.14], они становятся несущественными в рассматриваемом здесь случае, когда $c/a \Rightarrow 0$. Несмотря на то, что выражение (5.27) получено в рамках теории возмущений, воспользуемся тем не менее им для грубой оценки значения потенциала на затворе, при котором постоянная сверхтонкого взаимодействия уменьшается практически до нуля. Для выбранного соотношения между геометрическими параметрами структуры получим $V \geq 0,45$ В, что качественно согласуется со значением, приведенным в [5.5], где зависимость $A(V)$ представлена симметричной относительно $V = 0$ колоколоподобной формой со стремящимися к нулю хвостами при $V > 0,5$ В. В [5.13] была рассмотрена также зависимость постоянной сверхтонкого взаимодействия от электрического поля для затвора в форме длинной полосы.

5.1.4. Электрон-ядерная спиновая система двух соседних донорных атомов

Расстояние между донорами l , а с ним и период полупроводниковой структуры выбирается достаточно малым для того, чтобы постоянная J эффективного обменного взаимодействия электронов двух соседних водородоподобных донорных атомов a и b $J(\hat{\mathbf{S}}_a\hat{\mathbf{S}}_b)$, обусловленного частичным перекрытием их электронных волновых функций в соответствующем направлении, имела значение наиболее чувствительное к воздействию на него полем затвора \mathbf{J} .

Полный спиновый гамильтониан такой «двухатомной молекулы» имеет вид:

$$\hat{H} = 2\mu_B\mathbf{B}(\hat{\mathbf{S}}_a + \hat{\mathbf{S}}_b) + J(\hat{\mathbf{S}}_a\hat{\mathbf{S}}_b) + \Delta\hat{H} = \hat{H}_0 + \Delta\hat{H}, \quad (5.28)$$

где

$$\Delta\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_b = -g_N\mu_N B(\hat{I}_{az} + \hat{I}_{bz}) + A_a(\hat{\mathbf{I}}_a\hat{\mathbf{S}}_a) + A_b(\hat{\mathbf{I}}_b\hat{\mathbf{S}}_b). \quad (5.29)$$

Положительному значению постоянной обменного взаимодействия¹ $J > 0$ соответствует в отсутствие внешнего магнитного поля синглет-

¹Обычно обменное взаимодействие записывается со знаком минус. Тогда рассматриваемому случаю соответствовал бы $|J|$.

ное электронное основное состояние «двухатомной молекулы»¹ Σ . В работе [5.1] для хорошо разделенных водородоподобных атомов для этой постоянной использовалось приближенное выражение, которое имеет вид [5.15]:²

$$J(l) \cong 1,6 \cdot \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 a_t} \cdot (l/a_t)^{5/2} \exp(-2l/a_t), \quad (5.30)$$

где для кремния было принято значение для поперечного борковского радиуса, определяющего протяженность волновой функции электрона донорного атома в основном состоянии $a_t = 3$ нм (вариационный параметр для кремния был несколько меньше: $a_t = 2,5$ нм).

Опуская на время в (5.28) взаимодействие с ядерными спинами, которое является здесь малым возмущением, после диагонализации электронного спинового гамильтониана получим три триплетных ($S = 1$, $M = \pm 1, 0$) и один синглетный ($S = 0$, $M = 0$) уровня энергии двухспиновой системы, описываемые выражением (рис. 5.3)

$$E_0(S, M) = J[S(S + 1)/2 - 3/4] + 2\mu_B B M. \quad (5.31)$$

Из рис. 5.3 следует, что при $J = 2\mu_B B$ происходит *пересечение* синглетного и триплетного электронных уровней (точка пересечения С), которые четырехкратно вырождены по состояниям ядерных спинов. В этой области значений параметра J достаточно сравнительно слабых возмущений для того, чтобы произошла качественная перестройка структуры основного электронного состояния «молекулы», сопровождающаяся снятием вырождения в точке С и «раздвижкой» (*антипересечением*) некоторых сверхтонких состояний. Соотношение $J(l) = 2\mu_B B$ определяет необходимое расстояние между донорами l . В работе [5.1] на основании формулы (5.30) была дана оценка для этого расстояния для кремния. В поле $B = 2$ Тл она составляет $l \sim 10 - 20$ нм $\gg a_t$ и, соответственно, для *верхней границы* размеров отдельных затворов \mathbf{A} в таком поле $l_A \leq 10$ нм. Величина параметра a_t , найденная вариационным методом (5.17), в германии оказывается в 2,6 раза больше, чем в кремнии. Соответственно увеличивается и расстояние, на котором достигается необходимая степень перекрытия волновых функций

²Это асимптотическое выражение отличается от приближенного выражения, полученного Сугиурой (Y. Sugiyra) на основе Гайтлер–Лондоновского приближения, которое приводит к физически нереализуемым отрицательным значениям при очень больших значениях l/a_t .

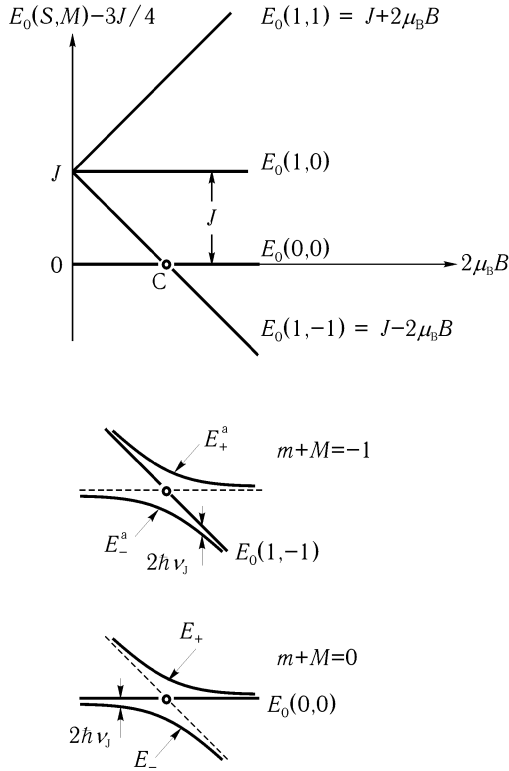


Рис. 5.3. Уровни энергии двухспиновой системы в магнитном поле в отсутствии ядерных спинов. Дополнительно схематически показано сверхтонкая структура трех электронных состояний совокупностей $m + M = -1, 0$ при $A_a = A_b$ вблизи точки C , где $J = 2\mu_B B$.

соседних доноров. Таким образом, если в качестве полупроводника использовать германий, то при определенной ориентации осей симметрии масштаб полупроводниковой структуры может быть существенно больше, чем в кремнии, и составлять $l \sim 25 - 50$ нм и $l_A \leq 25$ нм. Еще больше увеличивается параметр a_t за счет сильного уменьшения эффективной массы и более высокой диэлектрической постоянной в напряженных сплавах SiGe, где пространственный масштаб структуры может приблизиться к 200 нм [5.16].

Изменение электрического потенциала затворов \mathbf{J} , расположенных между затворами \mathbf{A} , позволяет перераспределять электронную плотность между соседними донорными атомами, управлять степенью перекрытия волновых функций электронов, локализованных на соседних донорах \mathbf{a} и \mathbf{b} и постоянной их обменного взаимодействия J , а также постоянной скалярного косвенного взаимодействия ядерных спинов I_{ab} , «включая» и «выключая» эти взаимодействия в процессе выполнения вычислительных операций.

Сверхтонкая структура энергетического спектра «двухатомной молекулы» вблизи точки пересечения в модели Кейна играет существенную роль. Сверхтонкое расщепление уровней происходит под действием гамильтониана возмущения $\Delta\hat{H}$ (5.29).

В работе [5.17] было отмечено важное обстоятельство, заключающееся в том, что поскольку коммутатор $[\hat{S}_{za} + \hat{S}_{zb} + \hat{I}_{za} + \hat{I}_{zb}, \hat{H}] = 0$, проекция полного электрон-ядерного спина на направление магнитного поля $m_a + m_b + M_a + M_b = m + M$ является сохраняющейся величиной и поэтому матрица 16×16 , представляющая гамильтониан (5.28), распадается на пять неприводимых матриц, соответствующих сохраняющимся значениям $m + M = 0, \pm 1, \pm 2$.

Пример полной картины сверхтонкого расщепления, полученной диагонализацией матрицы 16×16 , был приведен в [5.13, 5.14]. Однако наибольший интерес представляет поведение уровней вблизи точки пересечения S , где возможен более простой анализ.

В точке S встречаются только *три из четырех* состояний неприводимой совокупности с $m + M = -1$ с собственными значениями проекций ядерных спинов $m_a = -m_b = \pm 1/2$ ($S = 1, M = -1$); $m_a = m_b = -1/2$ ($S = 0, M = 0$) и *три из шести* состояний неприводимой совокупности с $m + M = 0$: с собственными значениями проекций ядерных спинов $m_a = -m_b = \pm 1/2$ ($S = 0, M = 0$) и $m_a = m_b = 1/2$ ($S = 1, M = -1$).

В качестве базисных состояний для определения матрицы, соответствующей состояниям $m + M = -1$, вблизи точки пересечения выберем следующие три состояния электрон-ядерной системы $|M_a, M_b\rangle; |m_a, m_b\rangle$: два триплетных электронных состояния $|-1/2, -1/2\rangle; |-1/2, 1/2\rangle \equiv |\downarrow\downarrow; \downarrow\uparrow\rangle, |-1/2, -1/2\rangle; |1/2, -1/2\rangle \equiv |\downarrow\downarrow; \uparrow\downarrow\rangle$ и одно синглетное электронное состояние $\sqrt{1/2} (|-1/2, 1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle)$; $|-1/2, -1/2\rangle \equiv |\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow; \downarrow\downarrow\rangle$.

Спиновый гамильтониан с учетом возмущения $\Delta\hat{H}$ в представляющей, учитывающем три из четырех состояний для $m + M = -1$, принимает следующий вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} J/4 - 2\mu_B B + (A_a - A_b)/4 & 0 & A_b/2^{3/2} \\ 0 & J/4 - 2\mu_B B - (A_a - A_b)/4 & A_a/2^{3/2} \\ A_b/2^{3/2} & A_a/2^{3/2} & g_N \mu_N - 3J/4 \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

В этом приближении одно из трех собственных значений матрицы (5.32) при $A_a = A_b = A$, соответствующее $m_a = -m_b = -1/2$, совпадает с энергией основного электронного триплетного состояния $E_0(1, -1)$ (рис. 5.3).

В этом случае гамильтониан симметричен, как и в отсутствие сверхтонкого взаимодействия, относительно перестановки доноров **a** и **b**, а его собственные состояния разделяются на симметричные состояния, принадлежащие ядерному и электронному спиновым триплетам ($I, S = 1$), и антисимметричные состояния, принадлежащие ядерному триплету и электронному синглету, или наоборот ($I + S = 1$).

Вычисление с учетом всех четырех состояний совокупности $m + M = -1$, выполненное для этого случая в [5.15], приводит для нижнего уровня симметричного состояния, соответствующего ядерному триплету ($I = 1, m = 0$), проходящего область точки пересечения, к выражению, несколько отличающемуся от $E_0(1, -1)$:

$$\begin{aligned} E_-^s &= g_N \mu_N B/2 + J/4 - \mu_B B - \sqrt{(\mu_B B + g_N \mu_N B/2)^2 + (A/2)^2} \approx \\ &\approx E_0(1, -1) - \frac{(A/2)^2}{2\mu_B B}, \end{aligned} \quad (5.33)$$

а два других антисимметричных состояния в точке С, как следует и из (5.32), раздвигаются (*антипересекаются*) при прохождении точки пересечения для невозмущенных электронных состояний:

$$E_{\pm}^a = (-J/2 - 2\mu_B B + g_N \mu_N B)/2 \pm \sqrt{(J - 2\mu_B B - g_N \mu_N B)^2/4 + A^2/8}. \quad (5.34)$$

Квантовые состояния, соответствующие этим уровням, представляя собой суперпозиции двух из определенных выше состояний.

а) При $J \ll 2\mu_B B - g_N \mu_N B \approx 2\mu_B B$ основным электронным состоянием является нижнее триплетное $S = 1$, $M = -1$, а ядерное состояние синглетом $I = 0$, $m = 0$. При *увеличении* параметра J нижний уровень отщепляется от уровня этого состояния

$$E_-^a \approx E_0(1, -1) - \frac{(A/2)^2}{2\mu_B B - J}. \quad (5.35)$$

Расщепление между двумя нижележащими уровнями, соответствующее переходам ядерных спинов из триплетного в синглетное состояние при триплетных состояниях электронного спина (рис. 5.3) имеет вид [5.1]

$$E_-^s - E_-^a = \hbar\omega_J = 2\pi\nu_J \approx \frac{(A/2)^2}{2\mu_B B - J} - \frac{(A/2)^2}{2\mu_B B}. \quad (5.36)$$

В работе [5.1] именно эти два уровня предлагается использовать в качестве рабочих для организации вычислительного процесса.

Адиабатическое увеличение параметра J или уменьшение величины поля B приводит при прохождении точки пересечения к переходу электрон-ядерной системы из одного антисимметричного состояния в другое с одним и тем же значением проекции полного электрон-ядерного момента. При $2\mu_B B = J$ происходит антипересечение уровней E_{\pm}^a .

Расщепление между триплетным и синглетным уровнями вида (5.36), как известно, можно описывать также спин-спиновым гамильтонианом типа $I(\widehat{\mathbf{I}}_a \widehat{\mathbf{I}}_b)$, где $I = \hbar\omega_J$ — постоянная косвенного «обменного» взаимодействия для ядерных спинов. Оценка ν_J для $B = 2$ Тл и $J/2\pi\hbar = 30$ ГГц $< 2\mu_B B/2\pi\hbar = 57$ ГГц дает значение $\nu_J = 75$ кГц $\ll \nu_A = 92,6$ МГц [5.1]. Заметим, что частота ν_J растет по мере приближения к точке пересечения невозмущенных электронных уровней $E_0(1, -1)$ и $E_0(0, 0)$ и исчезает при $J \Rightarrow 0$.

б) При $J \gg 2\mu_B B$ основным антисимметричным электронным состоянием является нижний синглет $S = 0$, $M = 0$, и ядерный триплет $I = 1$, $m = -1$, то есть происходит переворачивание одного из ядерных спинов и одного из электронных спинов.

При увеличении параметра J нижний уровень отщепляется от уровня этого состояния

$$E_-^a \approx E_0(0, 0) - \frac{(A/2)^2}{J - 2\mu_B B}. \quad (5.37)$$

Расщепление между двумя нижележащими уровнями теперь соответствует переходам из состояния электронного триплета в состояние электронного синглета при триплетных состояниях ядерных спинов. Оно имеет вид

$$E_-^s - E_-^a = \hbar\omega_J \approx J - 2\mu_B B + \frac{(A/2)^2}{J - 2\mu_B B} - \frac{(A/2)^2}{2\mu_B B} \approx J. \quad (5.38)$$

Остановимся кратко на случае других антипересекающихся состояниях вблизи точки С, принадлежащих неприводимой совокупности с $m + M = 0$ с собственными значениями проекций ядерных спинов $m_a = -m_b = \pm 1/2$ ($S = 0, M = 0$) и $m_a = m_b = 1/2$ ($S = 1, M = -1$), который рассматривался в [5.13, 5.14]. В представлении трех встречающихся в окрестности точки С состояний (из полных шести) гамильтониан с учетом возмущения имеет вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -3J/4 & 0 & -A_a/2^{3/2} \\ 0 & -3J/4 & A_b/2^{3/2} \\ -A_a/2^{3/2} & A_b/2^{3/2} & J/4 - 2\mu_B B + g_N \mu_N B - (A_a - A_b)/4 \end{pmatrix}. \quad (5.39)$$

Диагонализация его приводит к собственным значениям энергии (рис. 5.3):

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0(0, 0) = -3J/4, \\ E_{\pm} &= (J/2 - 2\mu_B B + g_N \mu_N B - (A_a - A_b)/2)/2 \pm \\ &\pm \sqrt{((J/2 - 2\mu_B B + g_N \mu_N B - (A_a - A_b)/2)/2)^2 + (A_a^2 + A_b^2)/8}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

В этом случае антипересекающиеся уровни имеют вид, аналогичный предыдущим. Однако роль третьего уровня играет не $E_0(1, -1)$, а $E_0(0, 0)$. С *уменьшением* параметра J при прохождении точки пересечения происходит переход из синглетного основного электронного состояния с противоположно ориентированными ядерными спинами $m = 0$ в триплетное электронное и триплетное ядерное состояние с $M + m = 0$, то есть снова электронная и ядерная подсистемы обмениваются своими состояниями с одновременным переворачиванием как электронного, так и ядерного спина. Следовательно, можно думать, что

эти состояния могут быть также использованы для организации квантовых вычислений.

В области точки С остались еще два не рассмотренных нами состояния, принадлежащие другим неприводимым совокупностям. Вдали от этой точки их можно классифицировать по состояниям электронов $|0, 0\rangle$, $|1, -1\rangle$ и, соответственно, по состояниям ядерных спинов $m_a = m_b = 1/2 (m+M = 1)$, $m_a = m_b = -1/2 (m+M = -2)$. Эти состояния не влияют на поведение рассмотренных выше состояний вблизи точки пересечения.

Коснемся здесь кратко предложенного Кейном [5.5] варианта возможного расположения донорных атомов в кремниевой МОП-структуре на расстоянии, настолько превышающем боровский радиус, что обменное взаимодействие между электронными спинами перестает играть какую-либо роль. В этом случае передачу информации о когерентном состоянии одного ядерного спина к другому предлагается осуществлять также косвенным образом по следующей схеме. Сначала от ядерного спина посредством операции SWAP информация о состоянии ядерного спина передается через сверхтонкое взаимодействие электронному спину, связанному с донором. Затем с помощью цепочки затворов, часть из которых находится над свободными от доноров областями, путем приложения к ним электрического потенциала происходит ионизация донора и переход электрона в приповерхностный двумерный (или одномерный) проводящий канал. Этот канал должен быть полностью свободен от ловушек с зарядом. При низких температурах длина декогерентизации спиновых состояний подвижных электронов достаточно велика (экспериментально было показано, что в арсениде галлия при низких температурах она превышает 100 мкм [5.18]) и поэтому электроны могут без потери спиновой когерентности достигнуть затвора расположенного над удаленным вторым донором. Напряжение на затворе снимается и квантовая информация с помощью второй операции SWAP передается от электронного спина к ядерному спину второго донора.

Таким образом, между ядерными спинами соседних доноров осуществляется косвенное взаимодействие через электроны во временно включаемом проводящем канале (аналог Рудерман – Киттелевского взаимодействия ядерных спинов в металлах). Преимуществом такого подхода является значительно большие геометрические масштабы структуры. Кейном [5.5] был рассмотрен и возможный вариант двухмерной

архитектуры квантового компьютера в этом случае, напоминающий архитектуру одноэлектронных приборов с зарядовой связью.

В процессе выполнения квантовых операций над ядерными спинами, электронные спины должны сохранять свое состояние, то есть их время спин-решеточной релаксации должно быть достаточно велико (несколько тысяч секунд). Это опять указывает на необходимость использования низких температур. В этом случае, при достаточно большом расстоянии между донорами, большие времена релаксации ядерных спинов T_1 и T_2 будут обеспечиваться лишь малыми по амплитуде флуктуациями локальных сверхтонких полей. В диэлектриках при низких температурах эти поля определяются электрон-фононными взаимодействиями. В [5.19] было показано, что индуцированные фононами спин-решеточные времена релаксации ядерных спинов T_1 уже при гелиевых температурах превышают 10 часов.

Источником декогерентизации являются также тепловые флуктуации напряжения на затворах **A**. Если моделировать донорный атом под затвором **A** как классический осциллятор, то флуктуации напряжения на затворе будут приводить к флуктуациям его фазы и скорость дефазировки, которая имитирует скорость декогерентизации, будет определяться выражением [5.5] $t_\phi^{-1} = \pi^2 \alpha^2(V) S_V$, где S_V — спектральная плотность шумового напряжения, $\alpha = dv/dV$ — коэффициент настройки частоты осциллятора. Если принять для грубой оценки $\alpha = 100$ МГц/В, а для спектральной плотности тепловых шумов в 50-омной линии связи при комнатной температуре $S_V \sim 10^{-18} V^2 \text{ Гц}^{-1}$, получим оценку $t_\phi^{-1} \sim 0,1 \text{ с}^{-1}$. Влияние этих шумов может быть минимизировано, если напряжение на затворе будет принимать только два рабочих значения $V = 0$ и $V > 0,5 \text{ В}$, соответствующих таким нерезонансному и резонансному состояниям кубита, при которых $\alpha = 0$. Более серьезным случаем являются низкочастотные флуктуации напряжения полупроводника типа $1/f$. Они могут существенно отличаться у разных затворов и это потребует определенной калибровки напряжений на затворах.

Декогерентизация может происходить, кроме того, благодаря неточностям в логических операциях над кубитами. Необходимый уровень неточностей операций в $\sim 10^{-4}$ трудно выполнить во всех твердотельных устройствах, где неизбежны флуктуации их свойств. Поскольку точная калибровка отдельных затворов в больших системах весьма затруднительна, Кейн [5.5] предлагает устойчивый к флуктуациям

(fluctuation-tolerant) способ выполнения квантовых операций, основанный на использовании специальным образом видоизмененных форм импульсов, при которых действие радиочастотного импульса в определенной полосе частот не будет зависеть от точного значения резонансной частоты кубита и поэтому низкочастотные флуктуации резонансной частоты и, в частности, $1/f$ -шумы, приводящие к ее случайным сдвигам, не будут влиять на точность логических операций.

5.1.5. Измерение состояний отдельных ядерных спинов в полупроводниковом ЯМР квантовом компьютере

Измерение индивидуальных состояний ядерных спинов является одной из наиболее важных проблем в полупроводниковых ЯМР квантовых компьютерах. В [5.1] это предполагается производить в *два этапа*. Предположим, что после квантовых вычислений, которые осуществляются методами ЯМР с помощью импульсов радиочастотного поля с частотой $\nu_J \sim 75$ кГц и амплитудой $b \leq (2\pi\hbar\nu_J)/g_N\mu_N \sim 10^{-3}$ Тл, электроны двух доноров при $J < 2\mu_B B$ находятся в триплетном состоянии $|1, -1\rangle$, каждый на своем атоме, при этом ядерная система в целом находится в одном из двух состояний: либо $I = 1, m = 0$, либо $I = 0, m = 0$.

Сначала путем адиабатического изменения величины обменного взаимодействия электронов $J(\hat{S}_a\hat{S}_b)$ с помощью электрического потенциала затвора \mathbf{J} от значения $J < 2\mu_B B$ до значения $J > 2\mu_B B$ производится переход электрон-ядерной системы из одного состояния в другое с той же самой проекцией полного спина, совершая тем самым *передачу информации от ядерной спиновой подсистемы к электронной подсистеме*. Таким образом, определение состояния ядерного спина сводится к определению состояния электронного спина.

Затем производится определение электронного состояния. Если энергия связи электрона с нейтральным донором больше, чем энергия притяжения к соседнему ионизированному донору (D^+ -состояние), то электрону будет энергетически выгоднее находиться вблизи нейтрального донора (D^- -состояние), то есть оба электрона в синглетном состоянии будут находиться в окрестности одного из доноров. В результате произойдет перенос заряда с одного донора на другой, что предлагалось измерять с помощью высокочувствительных одноэлектронных емкостных методов [5.1, 5.5, 5.16]. Важно отметить, что время электрических

измерений зарядового состояния донорного атома должно быть значительно меньше времени электронной спин-решеточной релаксации, которая при низких температурах достигает порядка 10^3 с.

Одноэлектронные транзисторы [5.20, 5.21], по-видимому, являются наиболее подходящими устройствами для выполнения таких измерений. Электрометр на основе одноэлектронного транзистора способен определить, находятся ли два электрона в синглетном или триплетном состоянии. Для этого центральная квантовая точка — «островок» одноэлектронного транзистора располагается непосредственно над предназначенным для измерения донорным атомом и отделен от кремния потенциальным барьером (рис. 5.4). В качестве портов, на которые выводится информация о состоянии кубита, где и происходит измерение, могут быть другие, в частности, донорные атомы ^{125}Te с ядерным спином $I = 1/2$ с глубокими примесными уровнями и двумя внешними электронами [5.22]. Донорные атомы ^{31}P при этом будут использоваться только для выполнения логических квантовых операций, не требующих промежуточных операций.

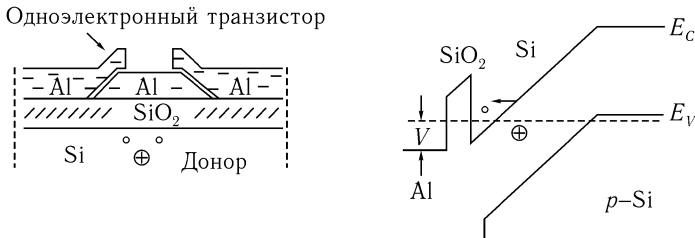


Рис. 5.4. Возможная схема высокочувствительного электрометра на основе одноэлектронного транзистора и его энергетическая диаграмма. В отсутствии разности потенциалов между островком и подложкой $V = 0$ оба электрона локализованы в окрестности донора. Значение V , при котором происходит переход одного из электронов к поверхности зависит от того, в синглетном или триплетном состоянии находились электроны.

Разность потенциалов между островком и кремниевой подложкой V выбирается достаточной для того, чтобы один из локализованных на доноре электронов смог переместиться к поверхности барьера на границе с кремнием. Это движение заряда будет изменять потенциал на островке и вместе с этим проводимость одноэлектронного

транзистора. Поскольку энергия связи синглетного и триплетного спиновых состояний донора различны, детектирование движения заряда на примеси позволит определить спиновое состояние электронов. В качестве электрометра может быть также использован *радиочастотный одноэлектронный транзистор* [5.23], обычный нанозлектронный МОП-транзистор [5.16]. Об экспериментальных попытка таких измерений пока не сообщалось.

Детальное теоретическое исследование электрических методов измерения состояния электронных и ядерных спинов в полупроводниковых структурах с помощью одноэлектронного транзистора, с учетом шумов было проведено в [5.22].

Остановимся также на других возможных способах измерения состояния отдельных электронных спинов. Одним из них является использование *«спинового фильтра»* [5.24], содержащего расположенную над донором квантовую точку с отдельным электроном, спиновое состояние которого зависит от электронного спинового состояния донора. Квантовая точка отделена от электродов потенциальными барьерами из ферромагнитного полупроводника (материалом могут быть EuSe, EuS). Намагниченность барьера создает в нем обменное расщепление зоны проводимости (для EuS в отсутствие внешнего поля она равна 0,36 эВ). Таким образом, высота барьера различна для электрона в квантовой точке с различной ориентацией спина. Под действием напряжения происходит туннелирование электрона с одной определенной ориентацией, что регистрируется путем измерения тока.

Еще одним способом, предложенным С. Молотковым и С. Назиным [5.25], является использование для измерения состояния отдельного электронного спина одноэлектронного *«турникета»*, представляющего собой структуру из *трех* туннельно связанных квантовых точек, с центральной точкой, располагающейся над донорным атомом. Каждая точка имеет один квантовый уровень. Правая и левая точки туннельно связаны с электродами из магнитного материала. Электронные спины в электродах поляризованы. В начальный момент электроны отсутствуют во всех точках, затем к центральной и левой точке прикладывается импульс напряжения такой длительности, что уровни левой и центральной точки оказываются в резонансе и снижаются ниже уровня химического потенциала μ_L левого электрода (заполняются состояния обеих точек). Затем импульс напряжения той же длительности прикладывается к левой точке. Он поднимает ее квантовый уровень

выше уровня μ_L , в результате электрон из этой ямы возвращается в левый электрод, а в центральной точке уровень оказывается заполненным электроном, с значением спина, определенным состоянием левого электрода. Электрон, оставшийся в центральной точке, взаимодействует с электроном донорного атома и переходит в состояние, зависящее от спинового состояния электрона донорного атома. Детектирование электронного состояния в центральной точке производится путем измерения туннельного тока через правый электрод при приложении импульса напряжения к центральной и правой квантовой точкам. Вероятность появления импульса тока в правом электроде будет зависеть от спинового состояния электрона в центральной точке *в данный момент времени*, поэтому предложенный способ измерения, в отличие от других, позволяет следить за динамикой спиновых состояний. Наконец, прикладывается заключительный импульс напряжения к левой и центральной точкам, такой, чтобы электрон перешел из центральной точки обратно в левый электрод с единичной вероятностью. После этого система снова готова к измерению.

Оба метода требуют формирования над донором, в котором изменяется состояние электронного спина, довольно сложных нанoeлектронных структур. Поэтому вряд ли эти структуры смогут конкурировать с относительно простыми одноэлектронными транзисторами.

Наконец, отметим еще одно предложение о использовании метода магнитно-резонансного силового микроскопа (MRFM) [5.26, 5.27], который позволяет в принципе измерять *непосредственно* состояние отдельного ядерного спина по *механическому резонансу* кантилевера с ферромагнитным зондом на конце. При воздействии периодической достаточно *длинной* последовательности радиочастотных π -импульсов возникает резонанс колебаний, детектируемый оптическими методами. С помощью импульсных воздействий можно также производить инициализацию состояний спинов, одно- и двухкубитовые операции. Если частота Раби, соответствующая операциям на ядерных спинах, порядка 100 кГц, то время измерения и выполнения однокубитовой операции должно быть порядка 10^{-5} с. Измерения с помощью магнитно-резонансного силового микроскопа за такие короткие времена представляют определенные трудности.

При температуре $T \sim 0,1$ К и $B \sim 2$ Тл отношение $\hbar\omega_A/kT \sim 10^{-2}$, и, следовательно, ядерные спины в рассматриваемой системе поляризованы не полностью. Для исходной инициализации состояний ядер-

ных спинов, то есть для перевода спинов из возбужденных состояний в основные $|1\rangle \Rightarrow |0\rangle$, помимо дальнейшего понижения температур на два порядка, может быть использован, предлагаемый в [5.1] известный в технике ЯМР-метод *адиабатического быстрого прохождения* или адиабатической инверсии. Этот метод заключается в том, что в процессе воздействия на находящийся в состоянии $|1\rangle$ ядерный спин радиочастотного поля с частотой ω , производится *медленное* (адиабатическое) по сравнению с скоростью резонансных переходов изменение внешнего поля и резонансной частоты ядерного спина $\omega_1 = \gamma_1 B$. Во вращающейся системе координат ядерный спин в этом случае будет следовать за эффективным полем $\mathbf{B}_{\text{эф}} = \mathbf{B} - (\omega/\gamma_1)\mathbf{k} + \mathbf{b}$, прецессируя вокруг его направления. С прохождением условия резонанса $\omega = \omega_1$ эффективное поле изменяет свою ориентацию относительно первоначального направления, а с ним изменяет свою ориентацию и ядерный спин. Адиабатическое прохождение резонанса при этом должно быть *быстрым* по сравнению со скоростью декогерентизации спинового состояния. Условие адиабатически быстрого прохождения имеет вид [5.28]:

$$1/T_2 \ll |d\omega_A/\Omega dt| \ll \Omega, \quad (5.41)$$

где Ω — частота Раби.

Поскольку время релаксации ядерных спинов при низких температурах достаточно велико, то в результате ядерная спиновая система оказывается в неравновесном метастабильном поляризованном состоянии.

Обратим внимание на то, что прежде чем производить инициализацию указанным методом, необходимо путем индивидуальных измерений состояний ядерных спинов предварительно выявить спины, находящиеся в не основном состоянии. Поэтому рассмотренный способ инициализации является достаточно сложным.

К основным преимуществам кремниевого ЯМР квантового компьютера в варианте, предложенном Кейном можно отнести следующие:

1) методы современной нанотехнологии, а также успехи в выращивании кристаллов бесспинового кремния [5.29], открывают возможность получать необходимые структуры с очень *большим числом кубитов* ($L \geq 10^6$) и тем самым перейти от попыток демонстрации квантовых принципов на простейших спиновых системах органических молекул в жидкостях к созданию крупномасштабного многокубитного квантового компьютера;

2) в модели Кейна предполагается использовать *гомоядерную* систему ядерных спинов одинаковых доноров с индивидуальной настройкой резонансной частоты отдельных спинов-кубитов, индивидуальным измерением и инициализацией их состояний. Никаких специальных операций по выделению псевдочистых состояний в этом случае практически не требуется;

3) ядерные спины доноров хорошо изолированы от окружения и при низких температурах имеют времена спин-решеточной релаксации во много часов и *большое время декогерентизации*.

Однако можно указать и на ряд трудностей в осуществлении полупроводникового ЯМР квантового компьютера:

1) это прежде всего малый уровень сигнала, получаемого при индивидуальном обращении к спине отдельного атома. Измерение, инициализация кубитов при индивидуальном обращении требуют весьма *тонких высокочувствительных устройств* типа одноэлектронных транзисторов;

2) необходимость использования достаточно сложной *системы электрических затворов* для управления электронными состояниями доноров: настройки резонансных частот, измерений электронных состояний, выполнения двухкубитовых операций и инициализации состояний ядерных спинов;

3) электрические *затворы А и J являются источниками шумов*, в частности, так называемых $1/f$ -шумов, являющихся дополнительными механизмами декогерентизации.

5.2. Полупроводниковый ЯМР квантовый компьютер, контролируемый СВЧ и лазерными импульсами

В сообщении [5.30] рассматривается модель полупроводникового квантового компьютера с *индивидуальным обращением* к кубитам, управляемого не электрическими, а лазерными и СВЧ импульсами. Эта схема является альтернативой схеме, предложенной Кейном, она позволяет избежать трудно выполнимого пока для современной технологии использования нанoeлектронных измерительных устройств типа одноэлектронных транзисторов для измерения состояний отдельных кубитов — ядерных спинов.

Предлагаемая структура представляет собой световод на кремниевой подложке, образуемый бесспиновым кремнием ^{28}Si . В кремниевый волновод внедрены атомы А и С таким образом, что они образуют две совокупности регулярно расположенных параллельных одномерных цепочек с одинаковым шагом, соответственно из А и С атомов, при этом цепочка из С атомов сдвинута относительно цепочки из А атомов на полшага. Подложка тоже выполнена из бесспинового изотопа ^{28}Si (рис. 5.5).

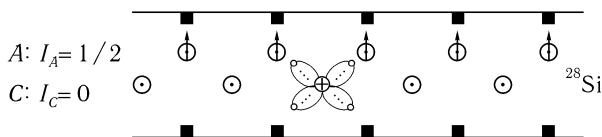


Рис. 5.5. Схема расположения атомов А и С и затворов в световоде. Один из атомов С возбужден лазерным импульсом и распределение его электронной плотности имеет вид «лепестков», направленных к атомам А.

Рассматривается простая модель, когда различие обоих атомов состоит в том, что атом С имеет один слабо связанный электрон на внешней оболочке и ядерный спин $I_C = 0$, а атом А является изотопом с $I_A = 1/2$, но не имеет электрона на внешней оболочке. Двухкубитовая система образуется из одного электрона атома С и одного ядерного спина другого атома А. Примером атома А, по-видимому, мог бы быть (в сообщении [5.30] это не обсуждается) изотоп ^{29}Si ($\mu = -0,55\mu_N$) или ^{13}C ($\mu = 0,70\mu_N$), замещающий атом Si, а примером атома С возможно стабильный изотоп-донор ^{15}N , хотя и со спином $I = 1/2$, но с относительно малым ядерным магнитным моментом ($\mu = -0,28\mu_N$).

Взаимодействие электронного спина атома С и ядерного спина атома А осуществляется благодаря распространению электронной волновой функции атома С в область атома А.

Величину этого взаимодействия предлагается контролировать путем включения или выключения лазерного импульса в световоде, который вызывает переходы между *основным* сферически симметричным $1s$ -состоянием атома С, когда волновая функция его электронного состояния не перекрывается с ядерным спином атома А, и электронными *возбужденными* $2p$ - или $3d$ -состояниями с ненулевым орбитальным моментом, способными сильно перекрываться с ядрами атома А. (За-

метим, что в этом состоянии сверхтонкое взаимодействие электрона с ядерным спином атома С, если бы он был не равен нулю, отсутствует).

Постоянная такого переносного (transferred) сверхтонкого или *суперсверхтонкого взаимодействия* имеет вид:

$$A = \frac{2\mu_0}{3} 2\mu_B g_N \mu_N |a_{1S}\Psi_{1S}(0) + a_{2S}\Psi_{2S}(0)|^2, \quad (5.42)$$

где $\Psi_{1S,2S}(0)$ — значения волновых функций орбиталей 1s и 2s атома А на ядре; $a_{1S,2S}$ — интегралы перекрытия, связывающие электронные волновые функции атома С с волновыми функциями состояний 1s и 2s электронов на атоме А; g, g_N — g -факторы электронных и ядерных спинов.

Каждый атом А расположен под своим затвором, вмонтированным извне в световод. Затворы также образуют регулярную цепочку с тем же периодом, что и атомы А. На противоположной стороне световода расположены с тем же периодом другие затворы (рис. 5.5). Цепочка из атомов С оказывается сдвинутой относительно этих затворов на полпериода и «лепестки» возбужденных p - или d -состояний *перекрываются* с одним или двумя ближайшими атомами А (см. рис. 5.5). Путем изменения напряжения на затворах можно изменять направление этих лепестков и управлять величиной постоянной суперсверхтонкого взаимодействия. Для этого ближайшее расстояние между атомами А и С должно быть порядка 20 нм.

Спиновый гамильтониан электрон-ядерной системы с возбужденными атомами С имеет вид (здесь предполагается изотропность суперсверхтонкого взаимодействия):

$$\hat{H} = g\mu_B B \hat{S}_z - g_N \mu_N B \hat{I}_z + A \cdot (\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{I}}). \quad (5.43)$$

В представлении магнитных квантовых чисел M и m при условии $g\mu_B B > A \gg g_N \mu_N B$ для собственных значений гамильтониана (5.43) будем иметь

$$E(M, m) = g\mu_B B M + A M m. \quad (5.44)$$

Энергетический спектр электрон-ядерной системы, описываемый выражением (5.44), изображен на рис. 5.6.

Одновременные переворачивания электронного и ядерного спинов осуществляются с помощью СВЧ π -импульсов на частоте ω (разрешен-

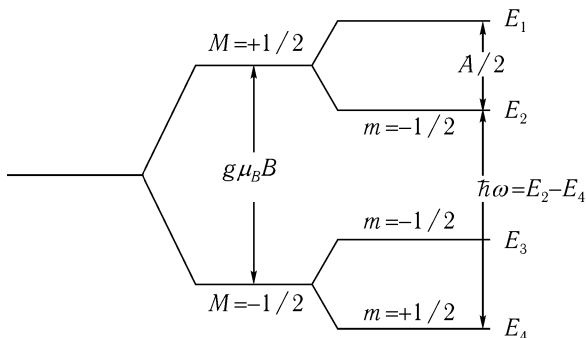


Рис. 5.6. Структура энергетического спектра $E(M, m)$ электрон-ядерной спиновой системы со суперсверхтонким взаимодействием в сильных магнитных полях (расстояния между уровнями искажены).

ный переход $E_4 \Rightarrow E_2$), определяемой правилом отбора $\Delta M_F = \Delta M + \Delta m = 0, \pm 1$ и величиной изотропного суперсверхтонкого взаимодействия A . Однако, если учесть тензорный характер постоянной суперсверхтонкого взаимодействия, то разрешенными становятся на той же частоте и переходы $E_3 \Rightarrow E_1$.

Операция CNOT в рассматриваемом случае производится на состояниях электронного $|\uparrow_e\rangle, |\downarrow_e\rangle$ и ядерного $|\uparrow_n\rangle, |\downarrow_n\rangle$ спинов. Ее можно образовать из следующих двух унитарных операций, осуществляемых в двух гильбертовых подпространствах:

$$\widehat{U}|\downarrow_e\rangle|\uparrow_n\rangle = a|\downarrow_e\rangle|\uparrow_n\rangle + b|\uparrow_e\rangle|\downarrow_n\rangle, \quad (5.45)$$

$$\widehat{U}|\downarrow_e\rangle|\downarrow_n\rangle = a|\downarrow_e\rangle|\downarrow_n\rangle + b|\uparrow_e\rangle|\uparrow_n\rangle, \quad (5.46)$$

$$|a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Начальное контролируемое состояние ядерных спинов $|\uparrow_n\rangle$ или $|\downarrow_n\rangle$ сохраняется или испытывает инверсию в зависимости, соответственно, от состояния контролирующего кубита (электронного спина) $|\downarrow_e\rangle$ или $|\uparrow_e\rangle$. Такая операция осуществляется с помощью СВЧ π -импульса на резонансной частоте ω при участии суперсверхтонкого взаимодействия. Так, в результате индуцированных переходов $E_4 \Rightarrow E_2$ и $E_3 \Rightarrow E_1$ с одновременным переворачиванием электронного и ядерного спина происходит образование запутанных состояний типа (5.45), являющихся су-

перпозицией не преобразующегося и преобразующегося состояний при операции CNOT.

Способ возбуждения атома С из s -состояния в p -состояние (рис. 5.7) лазерным импульсом для создания перекрытия его волновых функций с ядрами атома А, о котором говорилось выше, может быть использован также для того, чтобы производить оптическую запись информации на системе ядерных спинов.

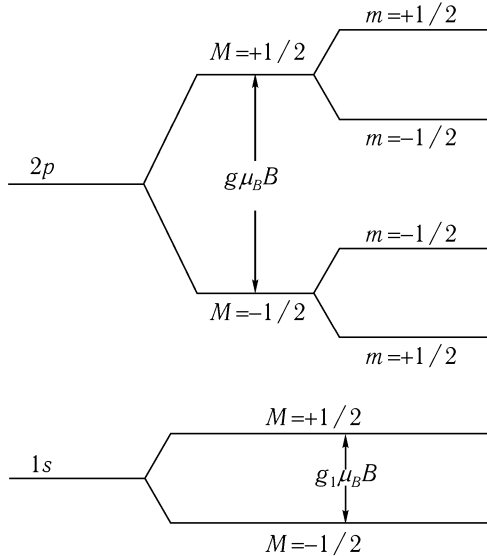


Рис. 5.7. Структура энергетического спектра атома С в основном и оптически возбужденном $2p$ -состоянии с суперсверхтонким взаимодействием с ядерным спином атома А.

Существенной является также *возможность селективного управления* отдельным кубитом, действуя возбуждающим лазерным импульсом круговой поляризации в световоде. Настройка в резонанс происходит благодаря штарковскому сдвигу частоты перехода, вызываемого напряжением на затворе, расположенным вне световода над атомами С (на рис. 5.5 не показаны).

Скорость выполнения операций в таком компьютере будет определяться скоростью, с которой СВЧ импульсы могут вызывать од-

новременные электрон-ядерные переходы. Эта скорость ограничивается величиной суперсверхтонкого взаимодействия и лежит в диапазоне 10 кГц–100 МГц.

Инициализация исходного состояния может быть осуществлена либо с помощью обычной техники двойного электрон-ядерного спинового резонанса, либо с помощью возбуждения селективными лазерными импульсами и соответствующими СВЧ-импульсами, что гарантирует приготовление любого начального состояния. Ввод информации предлагается производить также селективно в электронную или ядерную системы путем возбуждающих СВЧ импульсов, сопровождающихся возбуждением электронных состояний с помощью лазерных импульсов. Для эффективного считывания информации предлагается привлечь метод наблюдения оптической флуоресценции из возбужденных электронных состояний.

Предложенная схема, как и схема Кейна, удовлетворяет всем основным пяти перечисленным в главе 3 требованиям, необходимым для создания универсального полномасштабного квантового компьютера. Не вполне выясненным остается вопрос о выборе рабочих атомов А и С и детали метода измерения состояний кубитов.

5.3. Ансамблевые варианты твердотельных ЯМР квантовых компьютеров

Полупроводниковый ЯМР квантовый компьютер, впервые предложенный в [5.1], способен в принципе решить ряд проблем, с которыми встречаются в жидкостных ЯМР квантовых компьютерах. Это и проблема подготовки начального состояния квантового регистра из кубитов и проблема создания квантового компьютера с практически неограниченным числом кубитов.

Однако основным недостатком модели Кейна, как уже отмечалось, является малый уровень сигнала, получаемого при индивидуальном обращении к спине отдельного атома, требующий весьма тонких электрических измерений. Поэтому заманчивым представляется использование уже продемонстрированного в жидкостных квантовых компьютерах ансамблевого подхода, позволяющего путем перехода к ансамблю эквивалентных параллельно работающих компьютеров существенно увеличить уровень сигнала на выходе компьютера. Было предложено несколько различных твердотельных вариантов ансамблевых подходов.

Хотя эти предложения нельзя считать достаточно проработанными, некоторые заложенные в них идеи и принципы представляют определенный интерес и заслуживают обсуждения. Три из них рассматриваются ниже.

1) Своеобразный вариант ансамблевого твердотельного ЯМР квантового компьютера был предложен еще до появления модели Кейна в [5.31]. Он основан также на использовании сверхтонкого взаимодействия ядерных спинов и спинов электронов проводимости в *двухмерном электронном газе*, находящемся в условиях *квантового эффекта Холла* (E. G. Hall), который впервые наблюдался в МОП-структуре в 1980 году фон Клитцингом (K. von Klitzing), Дордой (G. Dorda) и Пеппером (M. Pepper). Двухмерный электронный газ может образовываться в различных гетероструктурных переходах. При температуре порядка 1 К и внешних магнитных полях порядка нескольких тесла существуют интервалы значений магнитных полей, при которых электроны в двухмерном газе заполняют целое число уровней Ландау. Электронный газ тогда образует *недиссипативную квантовую жидкость*, то есть находится в когерентном квантовом состоянии, а зависимость холловской проводимости от концентрации электронов или внешнего магнитного поля имеет платообразные участки конечной длины при значениях, кратных $q^2/(2\pi\hbar)$, где q — заряд свободного электрона (целочисленный эффект Холла). Экспериментально измеренное время спин-решеточной релаксации ядерных спинов в такой системе составляет от нескольких минут до получаса.

В [5.31] рассматривается *цепочка из атомов* с ядерным спином $1/2$, помещенных в двухмерный электронный газ, находящийся в сильном магнитном поле. Типичное расстояние между ядрами должно быть сравнимо с магнитной длиной $l_H = (\hbar/qB)^{1/2}$. Она составляет при нескольких тесла ~ 10 нм. Чтобы отдельные ядерные спины имели необходимые для индивидуального контроля отличающиеся резонансные частоты считается более предпочтительным по сравнению с использованием различных атомов использовать одинаковые атомы, либо размещая их в различных кристаллических окружениях, создаваемых специально имплантированными атомами, либо используя небольшие кластеры с несколькими связанными ядерными спинами. В условиях квантового эффекта Холла прямое диполь-дипольное взаимодействие ядерных спинов пренебрежимо мало. Основным взаимодействием является *косвенное спиновое взаимодействие* через электроны проводимости двухмер-

ного электронного газа. Это взаимодействие экспоненциально затухает с расстоянием r с характерной длиной l_H и имеет вид [5.31]

$$\hat{H}_{\text{int}} = \text{const} B^{-1} \sqrt{l_H/r} \exp(-cr/l_H) \cdot (\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2y}), \quad (5.47)$$

где $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ — операторы Паули, $c \sim 1$, поле B направлено по оси z перпендикулярно плоскости двухмерного электронного газа.

Для выполнения двухкубитовых операций желательно иметь возможность включать и выключать это взаимодействие в течение определенных интервалов времени. Для этого предлагается геометрически расположить атомы такими парами, чтобы двухспиновое взаимодействие было не пренебрежимо мало только между спинами соседних атомов. Одной из возможностей выключения на определенный промежуток времени взаимодействия спинов для одной пары атомов является размещение между основными атомами дополнительных примесных атомов, которые могут быть ионизированы с помощью внешнего электромагнитного импульса до состояния, способного локально нарушить когерентность двухмерного электронного газа, а с ней и косвенное взаимодействие между спинами в паре. Предполагается, что дифференциация резонансных частот может быть также достигнута путем использования примесей различного типа, помещая их вблизи или окружая ими ядерные спины. Квантовые операции будут выполняться одновременно параллельно на всех группах соответствующим образом настроенных спинов. Односпиновые операции должны производиться обычным образом с помощью радиочастотных импульсов.

Для инициализации состояний ядерных спинов предлагается использовать накачку поляризованным по кругу светом, рождающим электрон-дырочные пары. Эти пары после аннигиляции фиксируют ядерную поляризацию в соответствии с поляризацией света.

Для измерения состояния спинов предлагается ансамблевый метод, аналогичный используемому в жидкостных квантовых компьютерах, то есть путем измерения среднего значения сигнала, создаваемого действующими параллельно копиями спиновых цепочек (аналоги молекул в жидкостном варианте). Были предложены схемы измерения конечных состояний и коррекции ошибок, отличные от используемых при ЯМР. Если конечное состояние цепочки является прямым производением состояний n -спиновой системы, то измерение конечного состояния каждого спина в цепочке можно производить по очереди, создавая узкую проводящую полосу для каждого типа спина и посылая по ней

двумерный ток электронов с поляризованными спинами. Наблюдаемое, например, с помощью спинового диода [5.32], значение тока будет зависеть от характера спин-обменного рассеяния на ядерном спине, оно будет определять и направление поляризации ядерного спина. Более того, можно распространить полоску на ансамбль, состоящий из копий спиновых цепочек, разделенных между собой на расстояние, большее чем расстояние между спинами в цепочке. При достаточном числе этих копий можно значительно снизить неточность определения спинового состояния.

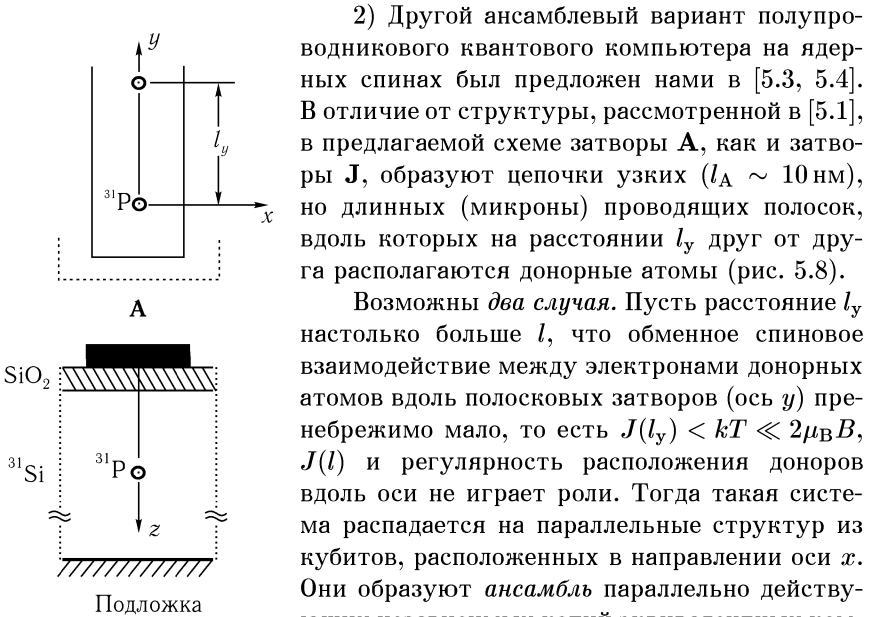


Рис. 5.8. Схема расположения донорных атомов под полосковым затвором **A**.

2) Другой ансамблевый вариант полупроводникового квантового компьютера на ядерных спинах был предложен нами в [5.3, 5.4]. В отличие от структуры, рассмотренной в [5.1], в предлагаемой схеме затворы **A**, как и затворы **J**, образуют цепочки узких ($l_A \sim 10$ нм), но длинных (микроны) проводящих полосок, вдоль которых на расстоянии l_y друг от друга располагаются донорные атомы (рис. 5.8).

Возможны *два случая*. Пусть расстояние l_y настолько больше l , что обменное спиновое взаимодействие между электронами донорных атомов вдоль полосковых затворов (ось y) пренебрежимо мало, то есть $J(l_y) < kT \ll 2\mu_B B$, $J(l)$ и регулярность расположения доноров вдоль оси не играет роли. Тогда такая система распадается на параллельные структуры из кубитов, расположенных в направлении оси x . Они образуют *ансамбль* параллельно действующих независимых копий эквивалентных компьютеров Кейна, играющих роль больших искусственных «молекул». Электронные спины в этих цепочках в начальном состоянии ориентированы по полю. Одинаково ориентированы будут и все ядерные спины-кубиты. Сигнал на

выходе в такой системе будет пропорционален, как и в случае жидкостей, числу «молекул» или числу донорных атомов под полосковыми затворами **A**. Например, для числа «молекул» более тысячи, длина полоскового затвора должна быть более десяти микрон. При таком ансамбле-

вом подходе, сигнал, снимаемый с полоскового затвора, увеличивается в соответствующее число раз.

Более сложная ситуация возникает в случае, когда $l_y < l$, $J(l_y) \gg 2\mu_B B$, $J(l) > kT$ и обменное взаимодействие между электронными спинами *вдоль полосковых затворов* способствует образованию искусственных квазиодномерных *антиферромагнитно упорядоченных* цепочек. При температурах значительно более низких, чем критическая температура Нееля $T_{NS} \sim J(l_y)/k$, мы имеем чистое макроскопическое электронное спиновое квантовое состояние.

Электронные спины в антиферромагнитно упорядоченных цепочках создают соответствующим образом направленные сверхтонкие поля на ядерных спинах. Соседние электронные спины в антиферромагнитной цепочке ориентированы в противоположных направлениях, образуя две квазиодномерные магнитные подрешетки. При наличии внешнего поля, направленного по одному из направлений намагниченности подрешеток, ядерные резонансные частоты соседних ядерных спинов ν_A будут различны для каждой из магнитных одномерных подсистем под полосковым затвором: $2\pi\hbar\nu_A^\pm = |g_N\mu_N B \pm A/2|$, а ориентация ядерных спинов будет либо по полю, если $|g_N\mu_N B| > A/2$, либо по направлению электронного спина, если $|g_N\mu_N B| < A/2$.

Результирующий сигнал ЯМР при настройке на одну из частот ν_A^\pm будет пропорционален половине числа ядерных спинов в антиферромагнитной цепочке или половине числа донорных атомов под затвором **A**.

Ядерные спины прецессируют в результирующем поле со слабо коррелированными фазами, то есть возбуждают спиновые волны и поэтому не образуют чистого макроскопического квантового состояния. Для инициализации исходного состояния ядерных спинов потребуются низкие температуры, при которых декогерентизация их состояний будет достаточно медленной (см. раздел 5.4.2).

При $J(l) \ll 2\mu_B B$, как это было показано в разделе 5.1.4, электронные спины в двух цепочках **a** и **b** под соседними полосковыми затворами в основном состоянии будут иметь одинаковую ориентацию (триплетные электронные состояния пар с $S = 1$, $M = M_a + M_b = -1$), иначе говоря, основные состояния электронных спинов соседних антиферромагнитно упорядоченных цепочек будут в фазе.

Пусть теперь ядерные спины соседних цепочек благодаря различию постоянных сверхтонкого взаимодействия $A_a/2 < |g_N\mu_N B| < A_b/2$ (разные электрические потенциалы на затворах) упорядочены по-

разному. В цепочке а все ориентированы по направлению поля B ($m_a = +1/2$), а в соседней b — по направлению электронного спина, то есть для половины пар ядерных спинов из соседних цепочек имеет место $m_a = m_b = 1/2$, а для другой половины $m_a = -m_b = 1/2$. Путем адиабатического увеличения параметра J с помощью потенциала на промежуточном полосковом затворе \mathbf{J} при прохождении точки пересечения электронных уровней триплетные электронные пары двух соседних цепочек перейдут в синглетное состояние с $S = 0$, $M_a + M_b = 0$, то есть две антиферромагнитные цепочки оказываются сдвинутыми друг относительно друга на половину периода (будут в противофазе). В то же время электрон-ядерные пары двух соседних цепочек, как показано в разделе 5.1.4, могут переходить из одного состояния в другое антипересекающееся состояние с одним и тем же значением полной проекции всех спинов $m + M = m_a + m_b + M_a + M_b$ двумя способами, соответствующими двум значениям $m + M = 0, -1$. Соответственно, либо половина ядерных спинов а в парах с $m_a + m_b = 0$ будут переходить из состояния $m_a = 1/2$ в состояние $m_a = -1/2$ ($m_a + m_b = 0 \Rightarrow m_a + m_b = -1$), либо половина ядерных спинов b в парах с $m_a + m_b = 1$ будет переходить из состояния $m_b = 1/2$ в состояние $m_b = -1/2$ ($m_a + m_b = 1 \Rightarrow m_a + m_b = 0$). В результате в первом случае ядерные спины в цепочке а окажутся ориентированными в фазе со спинами в цепочке b, а во втором случае, все спины цепочки b будут иметь ориентацию, противоположную одинаково ориентированным спинам цепочки а. С помощью селективного радиочастотного π -импульса, настроенного на резонансную частоту одной из подрешеток ядерных спинов, можно будет инвертировать состояние соответствующей половины ядерных спинов в цепочке и тем самым выбирать пути преобразования состояния ядерной системы при адиабатическом изменении параметра J .

При одинаковых значениях постоянных A ядерные спины в зависимости от величины внешнего поля ориентированы в соседних цепочках либо по полю, либо по направлению электронного спина. В обоих случаях, если пары электронных спинов из соседних цепочек находятся в триплетном состоянии, то и ядерные спины тоже будут в триплетном состоянии. Переход пар электронных спинов из триплетного в синглетное состояние в этом случае будет происходить одним путем, с переходом пар ядерных спинов из триплетного состояния $m_a + m_b = 1$ в синглетное состояние $m_a + m_b = 0$.

Паре электронов в синглетном состоянии энергетически более выгодным может оказаться на одном донорном атоме, и тогда это приведет к разрушению антиферромагнитного порядка в цепочках. Этот процесс, по-видимому, может детектироваться более простым способом по сравнению с высокочувствительными одноэлектронными методами.

3) Рассмотренные выше варианты, включая и модель Кейна, предполагают создание определенных *искусственных наноструктур*. Особняком стоит вариант ансамблевого компьютера, предложенный в [5.33]. В качестве кубитов в нем рассматриваются ядерные спины фтора, принадлежащие не искусственной структуре, а *естественному твердому кристаллу флюороапатита* ($\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$), которые располагаются в виде одномерных цепочек в параллельных плоскостях кристалла. Исходную поляризацию ядерных спинов предполагается достигать путем охлаждения кристалла до очень низких температур. Время релаксации ядерных спинов T_1 в этом случае в немагнитных кристаллах очень велико. Основной проблемой является подавление тех диполь-дипольных спиновых взаимодействий, которые приводят к декогерентизации спиновых состояний при сохранении взаимодействий, необходимых для выполнения логических операций. Предлагается для этого использовать кристаллы высокого качества и метод «контролируемого усреднения» с помощью радиочастотных импульсов, известного в технике ЯМР высокого разрешения в твердых телах [5.34] (см. раздел 4.5). Другая проблема связана с необходимостью различать и детектировать ядерные спины в периодической структуре кристалла. Для ее решения предлагается использовать очень сильный статический одномерный в пределах кристалла градиент магнитного поля.

Предлагаемый квантовый компьютер состоит из ансамбля N одномерных цепочек из n ядерных спинов атомов ^{19}F с $I = 1/2$ в кристалле флюороапатита. Кристалл длиной 10 мкм и шириной 1 мкм монтируется на конце кантилевера магнитно-резонансного силового микроскопа. Он содержит $N = 10^7$ кубитов с эквивалентными частотами в каждой плоскости кристалла. Диспрозиевый микромагнит с размерами $10 \times 4 \times 400$ мкм³ располагается параллельно плоскости кристалла. На расстоянии 2,07 мкм сверху магнита создается магнитное поле с градиентом 1,4 Тл/мкм. Благодаря градиенту поля ядерные резонансные частоты цепочек атомов в различных параллельных плоскостях в кристалле будут различны. Для це-

почек в соседних плоскостях разность частот составит $\Delta\omega/2\pi = 19,2$ кГц. Время релаксации T_2 определяется механизмом диполь-дипольного уширения и если диполь-дипольное взаимодействие хорошо усредняется, то время декогерентизации будет приближаться к спин-решеточному времени релаксации T_1 , которое определяется тепловыми флуктуациями парамагнитных примесей и для достаточно хорошо очищенных кристаллов и низких температурах может достигать часов.

Эксперимент должен выполняться в высоком вакууме ($< 10^{-5}$ мм Нг). Осцилляции кантилевера могут детектироваться с помощью оптоволоконного сенсора. Считывание производится при циклической адиабатической инверсии, которая модулирует намагниченность в плоскости ядер на частоте ω_m , близкой к резонансной частоте кантилевера. Ядерные спины с резонансной частотой ω_i подвергаются действию радиочастотного поля, создаваемого в катушке $b_x = 2b \cos\{\Omega \cos(\omega_m t) + \omega_i t\}$, где Ω — частота прохождения, которая должна быть меньше разности резонансных ядерных частот соседних цепочек $\Delta\omega$. Одновременное детектирование сигнала от многих плоскостей возможно при условии, если измерение для различных плоскостей производится на различных частотах модуляции ω_m . Сделанные оценки показывают, что в рамках предложенного варианта можно реализовать уже при существующей чувствительности магнитно-резонансной силовой микроскопии квантовые вычисления на 300 кубитах при температурах $T = 10$ мК и полях $B = 20$ Тл. Этот вариант имеет два важных преимущества по сравнению с описанными выше вариантами твердотельных ЯМР квантовых компьютеров. Во-первых, исключаются трудности, связанные с созданием искусственных наноструктур с контролируемым расположением атомов с ядерными спинами. В предлагаемом варианте используются ядерные спины, которые естественным образом организованы в кристаллической структуре. Во-вторых, наличие достаточно большого ансамбля спинов позволяло бы не бояться проблем считывания и инициализации отдельных ядерных спинов.

Ансамблевые способы организации квантовых вычислений и измерений конечного состояния кубитов являются хорошей перспективой для создания твердотельных ЯМР квантовых компьютеров по сравнению с вариантами, использующими индивидуальное обращение к кубитам.

5.4. Квантовые компьютеры с архитектурой клеточных автоматов

5.4.1. Квантовые автоматы на трех и двух типах двухуровневых элементов

Основные принципы ансамблевого варианта твердотельного квантового компьютера со структурой *клеточного автомата* обсуждались в сообщениях [5.35–5.38]. Ллойд [5.35, 5.38] рассмотрел систему из двухуровневых квантовых элементов, которыми могут быть и ядерные спины с $I = 1/2$, имеющую *периодическую* структуру типа цепочки ABCABCABC ... , где A, B, C — три различных типа ядерных спина с различающимися резонансными частотами. Предполагается, что атомы с ядерными спинами внедрены в кристаллическую решетку некоторого бесспинового твердого тела. Предполагается также, что система ядерных спинов может быть инициализирована, то есть переведена каким-либо способом в начальное основное состояние $|0\rangle$. Кроме того, спины располагаются на таком расстоянии друг от друга, которое обеспечивает наличие слабого взаимодействия между соседними спинами и, как следствие, зависимость резонансной частоты каждого спина от состояния соседних спинов. Так, например, резонансная частота ω_A спина A принимает значение ω_{01}^A , если спин C слева в основном состоянии 0, а спин B справа — в возбужденном (перевернутом) состоянии 1. Резонансный π -импульс на частоте ω_{01}^A будет одновременно переворачивать все спины A в периодической структуре, у которых спины слева и справа находятся, соответственно, в основном 0 и возбужденном 1 состояниях. При этом этот процесс является обратимым.

Каждая ячейка ABC описанной структуры может использоваться для записи информации путем изменения состояния одного спина. В состоянии *логического кубита* $\langle|0\rangle$ все ядерные спины ячейки из *трех* спинов находятся в основном состоянии, а в состоянии кубита $\langle|1\rangle$ — один из спинов ячейки находится в достаточно долго живущем неосновном возбужденном состоянии. Отметим имеющуюся здесь характерную особенность: состояния отдельных ядерных спинов не совпадают с состояниями *логических кубитов*. Поскольку из трех ядерных спинов только один может находиться в неосновном состоянии, скорость декогерентизации логического кубита определяется скоростью декогерентизации одного из трех ядерных спинов в ячейке.

Записанная информация далее распространяется посредством сдвигового механизма клеточного автомата. Для этого может быть использован каскад унитарных операций обмена SWAP: $A \Rightarrow B$, $B \Rightarrow C$, $C \Rightarrow A$, $A \Rightarrow B, \dots$, действующих одновременно на все спины в периодической цепочке. Например, последовательность из π -импульсов с резонансными частотами $\omega_{10}^B, \omega_{11}^B, \omega_{01}^A, \omega_{11}^A, \omega_{10}^B, \omega_{11}^B$ производит передачу информации записанной на спине А (состояние «|1>)» в некоторой ячейке ABC путем обмена состояниями между примыкающими спинами А и В (для спина А на конце цепочки иначе), во всей одномерной цепочке, независимо от состояния спинов С.

В такой простой системе с помощью только соответствующей последовательности импульсов можно выполнить любую цифровую и квантовую логическую операцию. В этом смысле такой квантовый компьютер является *универсальным*.

Также модель твердотельного ансамблевого ЯМР квантового компьютера была описана в сообщении [5.36], где рассматривалась периодическая структура типа ABCABCABC... в двух- и трехмерных структурах с ядерными спинами трех различных типов. Атомы с ядрами $I = 1/2$ внедрены в кристаллическую решетку некоторого соединения с бесспиновыми ядрами. Кроме того, кристалл содержит вспомогательные примесные атомы D с ядерным спином $1/2$, располагающиеся вблизи некоторых спинов А, и имеющие отличную от всех других ядерных спинов резонансную частоту. Им может быть, в частности, один из трех атомов основного состава, если он находится на конце одномерной структуры, где он имеет только одного соседа с одной стороны. Этот примесный атом будет служить портом для ввода и вывода информации, а малое окружение его из десятков ABC-единиц будет образовывать одну «искусственную молекулу» с десятками кубитов в одномерном случае, состояние которых кодируется только на трех различных типах спинов. Информация в такую систему вводится путем установления соответствующего состояния для D-спинов, с которых она передается с помощью операции SWAP соседним А-спинам. Все операции будут выполняться селективным образом с помощью радиочастотных импульсов, если резонансные частоты достаточно различимы. После передачи информации D-спин возвращается в свое исходное основное состояние. Считывание состояния любого кубита в этом случае предполагается осуществлять путем передачи информации о его состоянии какому-либо ближайшему D-спину и последующего измерения его со-

стояния. Если перейти к трехмерным легированным структурам, то ближайшее окружение каждого примесного атома D во всех трех измерениях может содержать *более тысячи* кубитов. Независимые ЯМР квантовые компьютеры на таких искусственных молекулах при выполнении всех операций будут работать параллельно, осуществляя тем самым *ансамблевый* принцип работы квантового компьютера.

При достаточно низких температурах, когда все спины находятся в начальный момент в основном состоянии (инициализированы), в таком ЯМР квантовом компьютере не возникает трудностей, связанных с экспоненциальным уменьшением измеряемого сигнала с ростом числа кубитов в «молекуле». Даже при более высоких температурах ЯМР квантовый автомат является хорошим кандидатом для создания многокубитового квантового компьютера при использовании методов динамической поляризации ядерных спинов, поскольку не потребуются концентрации соответствующих воздействий в малых областях нанометровых размеров, как в вариантах компьютеров с индивидуальным обращением к кубитам.

Детектирование состояния D-спинов в достаточно большом ансамбле «молекул» возможно производить с помощью методов ЯМР. Однако в случае, когда их число недостаточно велико, по-видимому, выгодным будет использование также и оптических методов.

Таким образом, легирование примесями трехмерной сверхрешетки из ядерных спинов позволило бы создать *квантовые автоматы* с высокой интеграцией, в которых весь кристалл будет представлять собой большой ансамбль идентичных параллельно работающих ЯМР квантовых компьютеров.

Другой твердотельный ансамблевый подход был предложен Бенжамином [5.37]. Им было показано, что для построения квантового компьютера, работающего на принципе клеточного автомата достаточно *только двух* разных типов двухуровневых элементов — физических кубитов A и B, в частности, ядерных спинов, отличающихся резонансными частотами. Пусть каждый спин имеет основное $|\downarrow\rangle$ и возбужденное $|\uparrow\rangle$ состояния, которые могут образовывать и квантовую суперпозицию. В исходном состоянии состояния всех спинов инициализированы, то есть вся структура находится в состоянии $|\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$, подобном ABA двухподрешеточному ферромагнетику. Для кодирования битов квантовой информации здесь предлагается использовать состояние не трех,

а четырех примыкающих спинов. Так логические состояния «|0⟩» и «|1⟩» представляются состояниями ячейки из *двух пар* спинов, соответственно, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$. Использование операций SWAP на основе соответствующих последовательностей радиочастотных импульсов позволяет и в этом случае выполнять как однокубитовые, так и двухкубитовые операции. Мы не будем здесь описывать процесс выполнения этих операций, поскольку подобные процессы подробно рассматриваются в следующем разделе при рассмотрении антиферромагнитного варианта ЯМР квантового автомата.

Основное преимущество ансамблевого подхода, использующего принципы клеточного автомата, отличающее его от всех других рассмотренных выше твердотельных вариантов квантового компьютера, состоит в том, что в этом случае можно вообще отказаться, если не от всех, то от многих типов затворов и соединений. К преимуществам такого компьютера относятся также возможность выполнения им как цифровых, так и квантовых вычислительных операций, а также возможность организации сравнительно простых процессов исправления ошибок, используя последовательность таких импульсов, которые осуществляют переход в короткоживущие возбужденные квантовые состояния атомов, несущих ошибочную информацию. Повышенной помехоустойчивости квантовых клеточных автоматов способствует и то, что кодирование состояний кубитов производится на состояниях нескольких спинов в ячейке [5.35, 5.38].

Современный уровень технологии может позволить реализовать такие компьютеры как на ядерных спинах, так и на электронных состояниях в полимерах или на квантовых точках.

5.4.2. ЯМР квантовый клеточный автомат на основе антиферромагнитной структуры

Основой для создания будущих ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров возможно станут не только искусственно созданные твердотельные наноструктуры, но также и некоторые естественные кристаллы, в частности, антиферромагнетики. Здесь мы обсудим вариант ансамблевого ЯМР квантового клеточного автомата в системах с антиферромагнитным упорядочением электронных спинов, предложенного одним из авторов [5.39].

Рассмотрим сначала простую одномерную модель антиферромаг-

нетика, в которой каждый элемент представляется магнитным атомом, имеющим один электронный и один ядерный спин $I = 1/2$, связанные сверхтонким взаимодействием. В качестве примера возможной реализации структуры такого рода может служить бесспиновый кристалл кремния с цепочкой регулярно расположенных атомов ^{31}P (см. рис. 5.1), в котором однако отсутствуют какие-либо наноструктурные элементы типа затворов. Ядерные резонансные частоты $\nu_{A,B}$ соседних ядерных спинов в одномерной цепочке АВАВ... зависят от магнитных квантовых чисел ядерных *соседних спинов слева* $m_<$ и *справа* $m_>$. Запишем для них выражение

$$\nu_{A,B}(m_< + m_>) \approx |g_N \mu_N B \pm A/2 - I_n(m_< + m_>)|/2\pi\hbar, \quad (5.48)$$

где $I_n \sim A^2/J$ — постоянная косвенного ядерного спин-спинового взаимодействия. Магнитные диполь-дипольные взаимодействия ядерных спинов с соседними электронными спинами будут влиять лишь на величину постоянной A . В магнитных полях $B \geq A/2g_N\mu_N \sim 3,5$ Тл и при температурах $T \sim 10^{-3}$ К ядерные спины в каждой из подрешеток А и В антиферромагнитной цепочки имеют практически полностью упорядоченную периодическую структуру.

Постоянная обменного взаимодействия $J \geq 2\mu_B B \sim 6,5 \cdot 10^{-23}$ Дж, критическая температура Нееля для антиферромагнитного упорядочения $T_{NS} \sim J/k \sim 4,5$ К, тогда как критическая температура для ядерного упорядочения $T_{NI} \sim I_n/k \sim A^2/Jk \sim 10^{-5}$ К. Различие резонансных частот ядерных спинов для по разному ориентированных соседних спинов $\Delta\nu_1 \sim I_n/2\pi\hbar \sim 0,5$ МГц, тогда как резонансная частота $\nu_1 \sim 120$ МГц.

Для организации вычислительных операций воспользуемся способами обращения к кубитам, аналогичными предложенным в [5.37].

Ядерные спины атомов при $g_N\mu_N B < A/2$ будут ориентироваться в соответствии с ориентацией электронных спинов и образовывать в основном состоянии периодическую структуру типа АВАВ...: $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots$, где $|\uparrow\rangle$ обозначает основное состояние ядерного спина в положении А, а $|\downarrow\rangle$ — состояние ядерного спина в состоянии В, то есть мы получаем *гомоядерную* систему спинов с *двумя различными основными состояниями*. Каждый ядерный спин в состоянии А и В в этой схеме помимо основного состояния имеет возбужденное, соответственно, $|\downarrow\rangle$ и $|\uparrow\rangle$. Заметим, что время жизни (спин-решеточное время релаксации T_1) возбужденного состояния при низких температурах, как уже

отмечалось, очень велико. Каждый логический кубит информации в этой схеме представляется, как и в варианте Бенжамина, состояниями *четырёх* элементов: основное состояние логического кубита «|0⟩» представляется ячейкой $|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$, тогда как состояние «|1⟩» — $|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$. Оба состояния содержат два возбужденных состояния и имеют *нулевую проекцию* полного ядерного спина.

Ввод и вывод информации из цепочки ядерных спинов должен производиться на конце цепочки, где ядерный спин имеет только один соседний спин (пусть это будет спин в состоянии А на левом конце) и поэтому имеет другую резонансную частоту $\nu_A(-1/2)$ ($m_{<} + m_{>} = -1/2$) (см. таблицу). Соответствующий селективный резонансный радиочастотный $\pi_{A,-1/2}$ -импульс будет инвертировать только этот один ядерный спин на конце цепочки (в состоянии А), не влияя на все другие. Затем подается новый селективный радиочастотный $\pi_{B,0}$ -импульс, который инвертирует следующий ядерный спин (в состоянии В), с противоположной ориентацией соседних ядерных спинов ($m_{<} + m_{>} = 0$) и, соответственно, с другой резонансной частотой, отличной от частоты спинов, соседние ядерные спины которых в это время находятся в одинаковых состояниях ($m_{<} + m_{>} = \pm 1$).

Таблица. π -импульсы для спинов в состояниях А и В

Соседние спиновые состояния для спина А	$\begin{array}{c} \\ \text{А} \\ \downarrow \end{array}$	$\downarrow\downarrow$	$\downarrow \uparrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \uparrow$
Резонансная частота π -импульсы	$\nu_A(-1/2)$ $\pi_{A,-1/2}$	$\nu_A(-1)$ $\pi_{A,-1}$	$\nu_A(0)$ $\pi_{A,0}$	$\nu_A(0)$ $\pi_{A,0}$	$\nu_A(1)$ $\pi_{A,1}$
Соседние спиновые состояния для спина В	$\begin{array}{c} \\ \text{В} \\ \uparrow \end{array}$	$\uparrow \uparrow$	$\uparrow \downarrow$	$\downarrow \uparrow$	$\downarrow \downarrow$
Резонансная частота π -импульсы	$\nu_B(1/2)$ $\pi_{B,1/2}$	$\nu_B(1)$ $\pi_{B,1}$	$\nu_B(0)$ $\pi_{B,0}$	$\nu_B(0)$ $\pi_{B,0}$	$\nu_B(-1)$ $\pi_{B,-1}$

Таким образом, логическое состояние кубита «|0⟩», то есть $|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$, формируется следующим образом (указанные импульсы действуют на подчеркнутые *слева* спины):

$$\underline{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} \dots \pi_{A,-1/2} \Rightarrow \underline{\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow} \dots \pi_{B,0} \Rightarrow \overline{\underline{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}} \dots$$

$\underline{ABAB} \qquad \underline{ABAB} \qquad \underline{ABAB}$

Дальнейшее перемещение кубита по цепочке производится с помощью последовательности импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0} \dots$, которые выполняют следующие операции SWAP:

$$\begin{aligned} \frac{\langle |1\rangle\rangle}{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow} \dots \pi_{A,0} &\Rightarrow \uparrow \overline{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow} \downarrow \dots \pi_{B,0} \Rightarrow \frac{\langle |1\rangle\rangle}{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow} \dots \pi_{A,0} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \uparrow\downarrow\uparrow \overline{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow} \downarrow \dots \pi_{B,0} \Rightarrow \frac{\langle |1\rangle\rangle}{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} \dots \end{aligned}$$

и так далее.

Роль атомов-портов на конце цепочки могут играть, как в случае, рассматривавшемся в [5.36], примесные атомы D в некоторых местах цепочки с отличающейся резонансной частотой. В полностью инициализированное состояние ядерных спинов информация вводится переводом ядерного спина атома D в требуемое состояние с помощью импульса на его резонансной частоте. Состояние ядерного спина ближайшего к примесному атому создается затем с помощью операции SWAP.

Перейдем к формированию логических операций. Для выполнения однокубитовой операции используются $\pi_{A,1}$ и $\pi_{B,-1}$ -импульсы, а также более общие унитарные операторы $\hat{U}_{A,1}$ и $\hat{U}_{B,-1}$, действующие на отдельный спин в состояниях A и B с резонансными частотами, соответствующими одинаково возбужденным состояниям обоих соседних ядерных спинов. Знак «+» относится к случаю, когда в возбужденных состояниях $|\uparrow\rangle$ находятся оба соседних спина B и знак «-», когда в возбужденном состоянии $|\downarrow\rangle$ находятся соседние спины A.

Кроме логических кубитов, представляемых четырьмя спинами, как и в [5.37], вводится *вспомогательная контрольная единица* CU, представляемая *шестью* спинами в следующих состояниях $\overline{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}$. Отдельные кубиты пространственно отделены в цепочке на число ядерных спинов, находящихся в основном состоянии, кратное четырем (рис. 5.9). Поэтому на каждый кубит в цепочке приходится минимум восемь ядерных спинов (четыре для кодирования и четыре для пространственного разделения). Контрольная единица находится в некотором месте цепочки и отделена от ближайшего кубита нечетным числом спинов в основном состоянии.

Под действием последовательности импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0} \dots$ кубиты перемещаются вправо, а контрольная единица CU вле-

операция SWAP прерывается и включается другая *вычислительная последовательность* из шести импульсов $\pi_{A,1}, \pi_{B,-1}, \pi_{B,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}, U_{A,1}$, которая заканчивается унитарной операцией $U_{A,1}$ (операция поворота в двухмерном гильбертовом пространстве). Последняя действует только на один спин А в основном состоянии, находящийся между возбужденными спинами В $\uparrow\uparrow\uparrow$, и образует суперпозицию состояний спина А:

$$U_{A,1}|\uparrow\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (5.49)$$

Схема действия последовательности для случая, когда CU проходит кубит в состоянии «|1⟩» (стадия отмеченная одной звездочкой * на рис. 5.9), представлена на рис. 5.10.

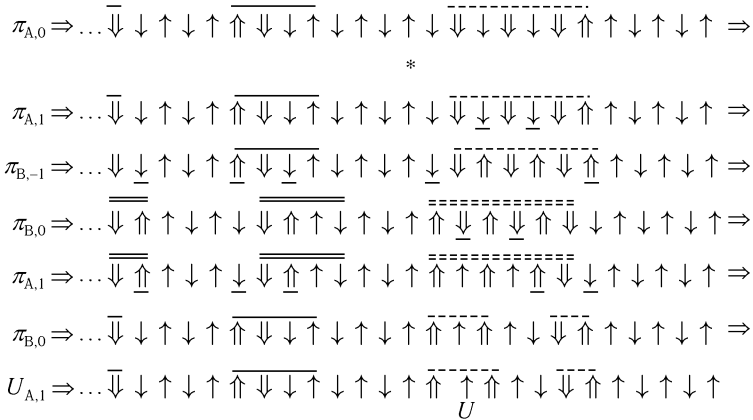


Рис. 5.10. Схема вычислительной последовательности импульсов после стадии *. Унитарная операция $U_{A,1}|\uparrow\rangle$ обозначается как $\overline{\uparrow\uparrow\uparrow}$.

Далее, за унитарной операцией $U_{A,1}$ выполняется та же полная последовательность импульсов, но в обратном порядке. При этом контрольная единица CU возвращается в исходное начальное состояние (первая строка на рис. 5.9), а начальное состояние логического кубита «|1⟩» переходит в суперпозицию состояний:

$$\langle\langle 1 \rangle\rangle \Rightarrow |\psi\rangle = a \overline{\overline{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}} + b \overline{\overline{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}}. \quad (5.50)$$

В результате контрольная единица СУ вместе с дополнительной вычислительной последовательностью импульсов осуществляет однокубитовую операцию образования суперпозиции двух логических кубитов. Заметим, что такая операция требует *семнадцати* элементарных импульсов.

Для выполнения *двухкубитовой* операции потребуется применение другой последовательности вычислительных импульсов. Так, при выполнении операции CNOT она должна быть такой, чтобы контрольная единица СУ, проходя контролирующий кубит в состоянии $\langle |0\rangle \rangle$, изменялась так, чтобы после последующего прохождения контролируемого кубита, последний не изменял своего состояния, а проходя контролируемый кубит в состоянии $\langle |1\rangle \rangle$, СУ производит инверсию контролируемого кубита. Пример такой последовательности импульсов представлен в приложении П.5.

В качестве возможного варианта реализации квантового клеточного автомата можно рассмотреть большой ансамбль квазиодномерных антиферромагнитно упорядоченных цепочек из донорных атомов ^{31}P в кремниевой подложке, слабо связанных между собой при $J(l_y) \gg J(l)$. Рассмотренную структуру нетрудно обобщить и на двух- и трехмерные антиферромагнитно упорядоченные структуры.

Структуры с необходимым двух- и трехмерным антиферромагнитным (или ферромагнитным) порядком возможно могут быть найдены среди *естественных* диэлектрических соединений *редкоземельных и переходных элементов*.

Для определения общих требований, которые должны быть предъявлены к естественным антиферромагнитным структурам, ограничимся здесь рассмотрением простой модели двухподрешеточного антиферромагнетика, в котором электронная намагниченность одной из подрешеток антиферромагнетика определяется выражением [5.42]:

$$2\mu_B N \langle \hat{S}_{jz} \rangle = 2\mu_B N (1 - P(T) - \psi) / 2, \quad (5.51)$$

где для низких температур в *спин-волновом приближении* функция

$$P(T) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k}{\exp(\varepsilon(k)/kT) - 1} \quad (5.52)$$

описывает вклад тепловых, а параметр ψ — вклад квантовых флуктуаций, $\varepsilon(k) = \sqrt{\varepsilon_0^2 + (Jak)^2}$ — энергетический спектр спиновых волн,

a — период решетки, d — размерность структуры, k — волновой вектор, J — параметр обменного взаимодействия, ε_0 — величина энергетической щели в спектре спиновых волн.

Для антиферромагнитного состояния типа *легкой оси*, когда гамилтониан взаимодействия двух электронных спинов j и g для одноосного кристалла имеет вид:

$$\hat{H}_{jg} = J\hat{S}_j\hat{S}_g - J_A(\hat{S}_{jx}\hat{S}_{gx} + \hat{S}_{jy}\hat{S}_{gy}), \quad (5.53)$$

где $J > J_A > 0$, J_A — постоянная анизотропии. Вклад квантовых флуктуаций, как показано в [5.42], $\psi = 0$. Кроме того, в этом случае, при $T \ll \varepsilon_0$, где $\varepsilon_0 \sim Z\sqrt{JJ_A}$, Z — число ближайших соседей,

$$P(T) \sim \text{const} \cdot (kT\varepsilon_0/J^2)^{d/2} \exp(-\varepsilon_0/kT) \Rightarrow 0. \quad (5.54)$$

То есть при достаточно низких температурах тепловые флуктуации в электронной системе практически *отсутствуют*. Заметим, что в случае состояния типа легкой плоскости ($\psi \neq 0$), частота ЯМР сильнее зависит от состояния соседних спинов, чем в случае легкой оси [5.43, 5.44].

Декогерентизация квантового состояния ядерных спинов при низких температурах определяется с одной стороны активной ролью электронных спин-волновых процессов [5.43]. Они генерируют флуктуационные локальные поля, обусловленные комбинационными процессами рассеяния электронных спиновых волн на отдельных ядерных спинах. Время декогерентизации или поперечное время релаксации T_2 для ЯМР в антиферромагнетике для низких температур ($\varepsilon_0/kT \gg 1$) определяется выражением [5.43]

$$1/T_2 \sim (A^2/J\pi^2\hbar)(kT/J)^3(\varepsilon_0/kT) \exp(-\varepsilon_0/kT), \quad (5.55)$$

из которого следует, что величина T_2 при уменьшении температуры *быстро растет*. С другой стороны, декогерентизация определяется неоднородностью локальных магнитных полей и разбросом резонансных частот. Ядерные спин-спиновые взаимодействия в естественном антиферромагнетике определяются в основном Сул–Накамуровским (H. Suhl, T. Nakamura) механизмом непрямого взаимодействия через возбуждение спиновых волн. Оно обычно больше прямого диполь-дипольного взаимодействия ядерных спинов.

Эти механизмы декогерентизации могут быть, в принципе, подавлены с помощью многоимпульсных методов ЯМР при стробоскопическом наблюдении спиновой динамики [5.34, 5.45, 5.46].

К естественным антиферромагнитным структурам, предназначенным для создания ЯМР квантовых компьютеров на принципах клеточного автомата можно предъявить следующие требования:

1) рабочая температура T должна соответствовать полностью упорядоченному антиферромагнетику $T_{NS} \gg T \gg T_{NI}$ и полностью поляризованным ядерным спинам $A/k \sim T_{NS}A/J > T \gg T_{NI}$. Откуда мы получим значение $T \leq 10^{-3}$ К;

2) для организации квантовых операций клеточного типа в двух и трех измерениях антиферромагнитные структуры должны быть шахматного типа;

3) кристалл должен иметь одноосную симметрию и легкую ось антиферромагнетизма;

4) атомы должны иметь ядерные спины $I = 1/2$. Электронные спиновые состояния $S \geq 1/2$.

Существуют, например, редкоземельные соединения стабильного изотопа *тулия* ^{169}Tm , который имеет ядерный спин $I = 1/2$, $g_N = 0.458$ и 100% распространение в природе, с антиферромагнитным упорядочением при низких температурах. Такими соединениями, например, могут быть: Tm_2O_3 , TmSi_2 , TmGe_2 , TmSe [5.47, 5.48]. Основное состояние магнитных ионов Tm^{3+} соответствует $S = 1$. В этих соединениях естественные элементы O, Si, Ge и Se имеют, соответственно, изотопы содержащие ядерные спины (в скобках приведена их распространенность) ^{17}O $I = 5/2$ (0.04%), ^{29}Si $I = 1/2$ (4.7%), ^{73}Ge $I = 9/2$ (7.76%), ^{77}Se $I = 1/2$ (7.78%) от которых потребуется очистка.

Из соединений переходных элементов отметим гематит ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) — антиферромагнетик с легкой осью при $T < 260$ К (точка Мориана). Антиферромагнетики с двумя различными ядерными спинами $I = 1/2$, например, FeF_2 со структурой рутила, TmAg со структурой типа CsCl , которые имеют, соответственно, критическую температуру 79 К и 9.5 К, возможно, также представляют интерес. Изотопы ^{57}Fe (2.19%), ^{19}F (100%), $^{107+109}\text{Ag}$ (100%) имеют, соответственно значения $g_N = 0.182$, $g_N = 5.26$ and $g_N = 0.24$.

Для окончательного выбора материала нужно провести теоретические и экспериментальные исследования указанных выше соединений и, возможно, ряда других, с более сложной магнитной структурой.

В заключение укажем на преимущества рассматриваемой модели: она основана на использовании антиферромагнитной структуры, содержащей только один тип атомов с ядерным спином $1/2$ (гомоядерная

структура); она не требует создания наноструктур с многочисленными затворами, в результате чего существенно упрощается конструкция квантового регистра и исчезает механизм декогерентизации, связанный с электрическими шумами; если удастся подобрать соответствующий естественный антиферромагнитный материал отпадает необходимость использования высокоточной нанотехнологии; для инициализации большого ансамбля ядерных спинов могут быть использованы динамические (оптические) методы поляризации ядерных спинов [5.49]; способ кодирования логических состояний на нескольких физических спинах-кубитах обеспечивает более высокую помехоустойчивость по отношению к случайным генерациям ошибочных кубитов; рассмотренная модель может быть базой для развития ансамблевых твердотельных трехмерных ЯМР квантовых компьютеров на естественных структурах.

Приложение П.5. Двухкубитовая операция CNOT в ЯМР квантовом клеточном автомате

Рассмотрим состояние квантового регистра, изображенное на рис. 5.9 после стадии ***, когда CU проходит середину кубита «|0⟩», и подействуем сначала последовательностью импульсов $\pi_{A,1}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}$. Результат представлен на рис. П.5.1.

Мы видим, что CU проходит кубит «|1⟩», затем под действием SWAP-операций продолжает движение, проходя до середины кубита «|0⟩» (стадия, отмеченная тремя звездочками). Затем после импульса $\pi_{A,1}$ контрольная единица CU сама подвергается преобразованию. Она изменяет свою форму от $\overline{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}$ до $\overline{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$ (такое изменение происходит только при прохождении кубита «|0⟩»), а сам кубит «|0⟩» при этом полностью разрушается.

Пусть теперь кубит «|0⟩» будет *контролирующим кубитом* в операции CNOT. Контрольная единица CU, проходя контролирующий кубит, изменяет свою форму, и затем после стадии **** регистр подвергается действию следующей последовательности импульсов, заканчивающейся операцией инверсии $U_{A,1} \equiv \pi_{A,1}; \pi_{A,1}, \pi_{B,-1}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,-1}, \pi_{A,1}$ (рис. П.5.2).

В этом случае видоизмененная единица CU проходит контролируемый кубит «|1⟩», никак *не изменяя* его состояние, как и должно быть

в операции CNOT. Сама единица CU при этом принимает новый вид $\begin{matrix} \equiv \\ \equiv \\ \equiv \\ \equiv \\ \equiv \end{matrix}$ $\begin{matrix} \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \end{matrix}$. Обратная последовательность импульсов возвращает CU и кубиты в их исходные состояния.

Пусть теперь состояние контролирующего кубита « $|1\rangle$ ». Вернемся к стадии ** на рис. 5.9, когда CU проходит середину кубита « $|1\rangle$ ». Подействуем снова той же последовательностью импульсов, как и в предыдущем случае. После прохождения единицы CU контролируемого кубита « $|0\rangle$ » и выполнения после импульса $\pi_{A,1}$ обратной последовательности происходит инверсия состояния контролируемого кубита « $|0\rangle$ » \Rightarrow « $|1\rangle$ », как и должно быть при операции CNOT.

Литература

- [5.1] Kane B. E. A Silicon-based Nuclear Spin Quantum Computer // Nature, 1998, v. 393, № 5, pp. 133–137.
- [5.2] Lyding J. W. UHV STM Nanofabrication: Progress, Technology Spin-Offs, and Challenges // Proc. IEEE, 1997, v. 85, № 4, pp. 589–600.
- [5.3] Валиев К. А., Кокин А. А. Полупроводниковые ЯМР квантовые компьютеры с индивидуальным и ансамблевым обращением к кубитам // Микроэлектроника, 1999, т. 28, № 5, с. 326–337.
- [5.4] Valiev K. A., Kokin A. A. Solid-State NMR Quantum Computer with Individual Access to Qubits and Some its Ensemble Developments // 1999, LANL, E-print quant-ph/9909008, 13 p.
- [5.5] Kane B. E. Silicon-based Quantum Computation // 2000, LANL, E-print arXiv: quant-ph/0003031, 14 p.
- [5.6] Ludwig G. W., Woodbury H. H. Electron Spin Resonance in Semiconductors, Solid State Physics, v. 13, ed. F. Seitz, D. Turnbull. — N.Y.-Lond.: Acad. Press, 1962. / Людвиг Дж., Вудбери Г. Электронный спиновый резонанс в полупроводниках. / Перевод с англ. под ред. Н. А. Пенина. — М.: Мир, 1964, 148 с.
- [5.7] Ramsey N. F. Nuclear Moments. Experimental Nuclear Physics, v. 1, ed. E. Segré. — N.Y.-Lond. 1953. / Рамзэй Н. Ф. Моменты и статистика ядер. В книге «Экспериментальная ядерная физика», т. 1. / Перевод с англ. — М.: ИИЛ, 1955, с. 299–417.
- [5.8] Валиев К. А. Магнитный резонанс на ядрах парамагнитных атомов // ЖЭТФ, 1957, т. 33, вып. 4(10), с. 1045–1047.
- [5.9] Kohn W. Shallow Impurity States in Silicon and Germanium // Solid State Physics. / Eds. F. Seitz, D. Turnbull. — N.Y.-Lond.: Acad. Press, 1957, v. 5, pp. 257–320.

- [5.10] *Kittel C.* Introduction to Solid State Physics. — N.Y.: John Wiley and Son. 1976. / *Ч. Киттель.* Введение в физику твердого тела. / Перевод с англ. под ред. А. А. Гусева. — М.: Наука, 1978, 792 с.
- [5.11] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Наука, 1974, 752 с.
- [5.12] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика т. 8. Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982, 622 с.
- [5.13] *Ларионов А. А., Кокин А. А., Федичкин Л. Е., Валиев К. А.* Сверхтонкая структура энергетического спектра донорных атомов ^{31}P в кремниевом ЯМР квантовом компьютере // Микроэлектроника, 2000, т. 29, № 5.
- [5.14] *Larionov A. A., Fedichkin L. E., Kokin A. A., Valiev K. A.* Nuclear Magnetic Resonance Spectrum of ^{31}P Donors in Silicon Quantum Computer // Nanotechnology, 2000, v. 11, pp. 1–6.
- [5.15] *Herring C., Flicker M.* Asymptotic Exchange Coupling of Two Hydrogen Atoms // Phys. Rev., 1964, v. 134, № 2A, pp. A362–A366.
- [5.16] *Vrijen R., Yablonovitch E., Wang K., Jiang H. W., Balandin A., DiVincenzo D.* Electron Spin Resonance Transistors for Quantum Computing in Silicon-Germanium Heterostructures // 1999, LANL E-print quant-ph/9905096, 9 p.
- [5.17] *Berman G. P., Cambell D. K., Doolen G. D., Nagaev K. E.* Dynamics of the Measurement of Nuclear Spins in a Solid-State Quantum Computer // 1999, LANL, E-print cond-mat/9905200, 5 p.
- [5.18] *Kikkawa J. M., Awschalom D. D.* Lateral Drag of Spin Coherence in Gallium Arsenide // Nature, 1999, v. 397, 14 Jan., pp. 139–141.
- [5.19] *Waugh J. S., Slichter C. P.* Mechanism of Nuclear Spin-Lattice Relaxation in Insulator at Very Low Temperatures // Phys. Rev., 1988, v. B37, pp. 4337–4339.
- [5.20] *Кузьмин Л. С., Лухарев К. К.* Непосредственное экспериментальное наблюдение дискретного коррелированного одноэлектронного туннелирования // Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 45, вып. 8, с. 389–390.
- [5.21] *Likharev K. K.* Single-Electron Transistors: Electrostatic Analogs of the DC SQUIDS // IEEE Trans. Magn., 1987, v. 23, № 2, pp. 1142–1145.
- [5.22] *Kane B. E., McAlpine N. S., Dzurak A. S., Clark R. G.* Single Spin Measurement using Single Electron Transistors to Probe Two Electron Systems // Phys. Rev., 2000, v. B61, pp. 2961.
- [5.23] *Schoelkopf R. J., Wahlgren P., Kozhevnikov A. A., Delsing P., Prober D. E.* The Radio-Frequency Single-Electron Transistor (RF-SET): A Fast and

- Ultrasensitive Electrometer // *Science*, 1998, v. 280, 22 may, pp. 1238–1242.
- [5.24] *DiVincenzo D. P.* Quantum Computing and Singlet-Qubit Measurements Using the Spin Filter Effect // *Jour. Appl. Phys.*, 1999, v. 85, pp. 4785.
- [5.25] *Молотков С. Н., Назин С. С.* Измерения состояния отдельного спина при помощи «турникета» // *Письма в ЖЭТФ*, 1999, т. 70, вып. 2, с. 141–147.
- [5.26] *Berman G. P., Doolen G. D., Hammel P. C., Tsifrinovich V. I.* Solid-State Nuclear Spin Quantum Computer Based on Magnetic Resonance Force Microscopy // 1999, LANL, E-print quant-ph/9909033, 22 p.
- [5.27] *Berman G. P., Doolen G. D., Tsifrinovich V. I.* A Magnetic Resonance Force Microscopy Quantum Computer with Tellurium Donors in Silicon // 2000, LANL, E-print arXiv: quant-ph/0003076, 10 p.
- [5.28] *Abraham A.* The Principles of Nuclear Magnetism. — Oxford: Clarendon Press, 1961. / *Абрагам А.* Ядерный магнетизм. / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скроцкого. — М.: ИИЛ, 1963, 552 с.
- [5.29] *Takyu K.-I., Itoh R. M., Oka K., Saito N., Ozhogin V. I.* Growth and Characterization of the Isotopically Enriched ^{28}Si Bulk Single Crystal // *Japan Jour. Appl. Phys.*, 1999, v. 38, Part 2, № 12B, pp. L1493–L1495.
- [5.30] *Bowden C. M., Pethel S. D.* Novel Scheme for Universal Quantum Computation // 1999, LANL, E-print quant-ph/9912003, 17 p.
- [5.31] *Privman V., Vagner I. D., Kventsel G.* Quantum Computation in Quantum-Hall Systems // *Physics Lett.*, 1998, v. A239, 2 March, pp. 141–146.
- [5.32] *Kane B. E., Pfeiffer L. N., West K. W.* Evidence for an Electric-Field Induced Phase Transition in a Spin-Polarized Two-Dimensional Electron Gas // *Phys. Rev.*, 1992-I, v. 46, № 11, pp. 7264–7267.
- [5.33] *Ladd T. D., Goldman J. R., Dânat A., Yamaguchi F., Yamamoto Y.* Quantum Computation in a One-Dimensional Crystal Lattice with NMR Force Microscopy // 2000, LANL, E-print arXiv: quant-ph/0009122, 5 p.
- [5.34] *Haerberlen U.* High Resolution NMR in Solids. Selective Averaging. — Acad. Press: N.Y., 1976. / *Хеберлен У., Меринг М.* ЯМР высокого разрешения в твердых телах. / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скроцкого и Э. Т. Липпмаа. — М.: Мир, 1980, 504 с.
- [5.35] *Lloyd S.* A Potentially Realizable Quantum Computer. *Science*, 1993, v. 261, pp. 1569–1571.
- [5.36] *Wei H., Xue X., Morgera S. D.* NMR Quantum Automata in Doped Crystals, 1998, LANL E-print: quant-ph/9805059.

- [5.37] *Benjamin S. C.* Schemes for Parallel Quantum Computation Without Local Control of Qubits // *Phys. Rev.*, 2000, v. A61, pp. 020301(R).
- [5.38] *Lloyd S.* Programming Pulse Driven Quantum Computers. LANL E-print: quant-ph/9912086.
- [5.39] *Kokin A. A.* A Model for Ensemble NMR Quantum Computer Using Antiferromagnetic Structure // 2000, LANL, E-print arXiv: quant-ph/0002034, 17 p.
- [5.40] *Bacon D., Kempe J., Lidar D. F. and Whaley K. B.* Universal Fault-Tolerant Computation on Decoherence-Free Subspaces, LANL E-print: quant-ph/9909058.
- [5.41] *Kempe J., Bacon D., Lidar D. A., Whaley K. B.* Theory of Decoherence-Free Fault-Tolerant Universal Quantum Computation // 2000, LANL, E-print, arXiv: quant-ph/0004064, 40 p.
- [5.42] *Тябликов С. В.* Методы квантовой теории магнетизма. — М.: Наука, 1975, 528 с.
- [5.43] *Куркин М. И., Туров Е. А.* ЯМР в магнито-упорядоченных веществах и его применение. — М.: Наука, 1990, 246 с.
- [5.44] *Туров Е. А., Петров М. А.* Ядерный магнитный резонанс в ферро- и антиферромагнетиках. — М.: 1969, 260 с.
- [5.45] *Slichter C. P.* Principles of Magnetic Resonance. — Berl., Heidelb., N.Y.: Springer-Verlag, 1990, 656 p. / *Сликтер Ч.* Основы теории магнитного резонанса. / Перевод с англ. со второго изд. под ред. Г. В. Скроцкого. — М.: Мир, 1981, 448 с.
- [5.46] *Viola L., Knill E., Lloyd S.* Dynamical Decoupling of Open Quantum Systems // 1998, LANL E-print quant-ph/9809071, 4 p.
- [5.47] *Taylor, K. N. R. and Darby, M. I.* Physics of Rare Earth Solids, — Lond.: Chapman and Hall, 1972. / *Тейлор К., Дарби М.* Физика редкоземельных соединений. / Перевод с англ. под ред. С. В. Вонсовского. — М.: Мир, 1974, 374 с.
- [5.48] *Нагаев Е. Л.* Физика магнитных полупроводников. — М.: Наука, 1979, 432 с.
- [5.49] *Luo J., Zeng X.* NMR Quantum Computation with a Hyperpolarized Nuclear Spin Bulk // 1998, LANL, E-print, quant-ph/9811044, 17 p.

ГЛАВА 6

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ НА КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

«Вред и польза действия обуславливаются совокупностью обстоятельств».

Козьма Прутков

6.1. Клеточные автоматы на ячейках из квантовых точек с зарядовой поляризацией

Начнем изложение с рассмотрения первых вариантов устройств, предлагаемых для создания высокопроизводительных компьютеров, построенных на *квантовых точках* (quantum dots), представляющих собой искусственно созданные атомоподобные нульмерные наноструктурные элементы с конечным числом дискретных энергетических уровней, в которых происходит *размерное квантование* электронных состояний и *удержание* (confinement) электронов во всех трех измерениях. Это удержание обычно достигается в полупроводниковых гетероструктурах с помощью либо использования электрических затворов, либо технологии травления в области двухмерного электронного газа.

Были предложены различные варианты устройств, состоящих из квантовых точек. К ним относятся и первые варианты логических систем, работающих по принципу *клеточного автомата* на основе *классической булевой логики*. Для этого используются бистабильные элементы, характеризующиеся двумя отличающимися друг от друга значениями наблюдаемого параметра, которые являются результатом проведенного *усреднения* состояния элемента по, вообще говоря, смешанному квантовому ансамблю. Однако такие существенно квантовые свойства системы элементов на квантовых точках, как возможность образования

суперпозиций чистых состояний, здесь никак не используются и поэтому указанные клеточные автоматы *не являются подлинно квантовыми* устройствами. Тем не менее будет полезно рассмотреть принципы их работы прежде чем переходить к подлинно квантовым компьютерам на квантовых точках.

В качестве базовых блоков в таких устройствах, получивших вначале не вполне удачное название квантовых клеточных автоматов, Ч. Лент (С. Lent) и П. Туго (Tougaw) предложили, в частности, использовать бистабильные ячейки из пяти квантовых точек [6.1, 6.2]. Такие ячейки имеют четыре квантовых точки, расположенные в углах квадрата, на которые приходится два подвижных электрона, способных посредством туннелирования через потенциальный барьер перемещаться между соседними угловыми точками в ячейке. Предполагается, что каждая точка в условиях полной изоляции имеет невырожденное основное (орбитальное) электронное состояние. Компенсирующий положительный заряд предполагается фиксированным и неподвижным. Пятая нейтральная квантовая точка, находящаяся в центре квадрата, несколько улучшает свойства ячейки, но не играет принципиальной роли.

Высота барьера между соседними ячейками предполагается достаточно большой для того, чтобы электроны были локализованы в ячейке, а ток между ячейками отсутствовал.

В отсутствие внешних воздействий на ячейку, а также туннельных переходов между соседними точками внутри ячейки, основное орбитальное состояние ячейки с двумя квантовыми точками *дважды вырождено*. Ему соответствуют два энергетически эквивалентных состояния ячейки, характеризующихся *двумя ориентациями* квадрупольного электрического момента ячейки, определяемыми параметром, названным авторами «поляризацией» $P = \pm 1$ (заметим, что этот параметр не имеет отношения к дипольному моменту ячейки!). Электроны в ячейке благодаря кулоновскому отталкиванию будут стремиться занять противоположные положения на концах одной из двух диагоналей квадрата (рис. 6.1). Это свойство и предполагается использовать для кодирования бинарной информации «0» и «1». При относительно слабом туннелировании между квантовыми точками в ячейке (высокий барьер) и низких температурах значения параметра $P = \pm 1$ являются достаточно хорошими квантовыми числами.

При квантовом описании состояния отдельной ячейки может быть

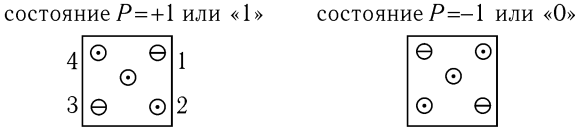


Рис. 6.1. Схема ячейки из пяти квантовых точек, \oplus — свободная квантовая точка, \ominus — квантовая точка, занятая одним электроном. Центральная нейтральная квантовая точка не играет принципиальной роли.

использовано узелное представление вторичного квантования с гамильтонианом, совпадающим, если не учитывать колебаний кристаллической решетки, с известным *гамильтонианом Хаббарда* (J. Hubbard) [6.2]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{i,\sigma} E_i \hat{n}_{i,\sigma} + \sum_{i>j,\sigma} (1/2) (T_{ij} \hat{a}_{i,\sigma}^+ \hat{a}_{j,\sigma} + T_{ji} \hat{a}_{j,\sigma}^+ \hat{a}_{i,\sigma}) + \\ & + \sum_i U \hat{n}_{i,\downarrow} \hat{n}_{i,\uparrow} + \sum_{i>j,\sigma,\sigma'} V_{ij} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{j,\sigma'}, \end{aligned} \quad (6.1)$$

где $\hat{a}_{i,\sigma}$ и $\hat{a}_{i,\sigma}^+$ — операторы уничтожения и рождения электрона на i -й квантовой точке (для рассматриваемых ячеек $i = 1, 2, 3, 4$) в спиновом состоянии, определяемом индексом $\sigma = \downarrow, \uparrow$, $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{a}_{i,\sigma}^+ \hat{a}_{i,\sigma}$ — оператор числа электронов в спиновом состоянии σ на i -й квантовой точке; первое слагаемое в (6.1) описывает одноэлектронные энергии квантовых точек, включая и потенциальную энергию электронов во внешнем поле и в поле других зарядов как внутри, так и вне ячейки; второе слагаемое в (6.1) описывает туннелирование между состояниями ближайших соседних квантовых точек; третье — энергию кулоновского отталкивания двух электронов на одной квантовой точке с противоположными спинами, а четвертое соответствует прямому кулоновскому взаимодействию между электронами, локализованными на различных точках в ячейке.

Параметр поляризации P для основного состояния определяется выражением

$$P = \frac{(\rho_1 + \rho_3) - (\rho_2 + \rho_4)}{\rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \rho_4}, \quad (6.2)$$

где

$$\rho_i = \sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} \langle \psi_0 | \hat{n}_{i\sigma} | \psi_0 \rangle \quad (6.3)$$

— квантово-механическое среднее число электронов на i -й квантовой точке по основному состоянию ячейки, описываемому вектором состояния $|\psi_0\rangle$.

Два состояния ячейки становятся энергетически неэквивалентными, если рядом находится другая ячейка с определенным параметром поляризации P . Если, например, вначале состояния ячеек были различны, то вся система оказывается в возбужденном состоянии благодаря увеличивавшемуся кулоновскому отталкиванию электронов на ближайших соседних квантовых точках. В результате первоначальное вырождение электронных состояний в первой ячейке снимается и происходит переход системы из двух ячеек в основное состояние с одинаковыми значениями параметра поляризации P (рис. 6.2). Переноса электронов из ячейки в ячейку при этом не происходит, то есть осуществляется так называемое *беспроводное* (wireless) взаимодействие ячеек, не сопровождающееся прохождением тока и диссипацией энергии.

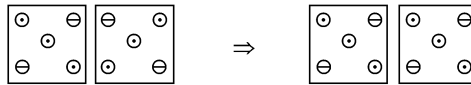


Рис. 6.2. Принцип беспроводного взаимодействия двух ячеек.

Рассмотрим далее простую цепочку пятиточечных ячеек. Перевод состояния первой ячейки в цепочке в возбужденное состояние в виде «неправильной» ориентации квадрупольного момента производится путем изменения заряда на ближайшем к ячейке проводнике. Это состояние, благодаря взаимодействию только ближайших квантовых точек соседних ячеек, будет затем передаваться по цепочке по принципу домино в виде солитонобразной волны на ее конец в результате беспроводного взаимодействия между ячейками. Для считывания полученного на выходе сигнала в [6.2] предполагается использовать маленький электромметр. В результате, возбужденное состояние будет выведено из системы, а вся цепочка перейдет в исходное основное поляризованное термодинамическое состояние, аналогичное сегнетоэлектрическому состоянию в твердом теле.

Основное состояние, в которое релаксирует большая совокупность таких ячеек, составляющих нанокompьютер, вообще говоря, энергетически многократно вырождено. При определенных заданных начальных и граничных условиях это вырождение снимается, и система перехо-

дит в одно из возможных основных состояний. Иначе говоря, каждой совокупности состояний ячеек на входе соответствует своя новая конфигурация основного состояния всей системы и соответствующее состояние ячеек на выходе, которое и определяет результат вычисления. В этом состоит принцип «*вычислений в основном состоянии*» (ground state computing), используемый в беспроводной архитектуре клеточного автомата на квантовых точках. Существует глубокая аналогия таких клеточных автоматов с известными моделями искусственных нейронных сетей и спиновых стекол с фазовыми переходами, обусловленными взаимодействием магнитных ионов. Основными преимуществами такой организации являются устойчивость работы системы, надежность вычислений, хорошая помехозащищенность и нечувствительность к наличию дефектов.

Однако клеточные автоматы на пятиточечных ячейках встречаются с рядом трудностей, среди которых отметим возможность образования «изгибов» (kink) в распределении ориентации квадрупольных моментов вдоль цепочек ячеек в системе благодаря захвату дополнительного электрона в процессе передачи сигнала на какой-либо свободной точке ячейки, переход системы при быстром переключении не на основное, а на метастабильное возбужденное состояние, релаксация из которого в основное состояние происходит с рассеянием энергии в окружающую среду или путем передачи ее другим ячейкам, вызывая ложное их переключение [6.2]. Для преодоления последней трудности предполагается производить достаточно плавное *адиабатическое* переключение, при котором система в каждый момент времени остается в основном состоянии, соответствующем мгновенному значению внешнего сигнала $V(t)$, плавно изменяя высоту потенциальных барьеров между квантовыми точками. При адиабатическом переключении в значительной степени сохраняется обратимость логических операций.

Рабочие температуры устройств на квантовых точках ограничены величиной энергии возбуждения электронов из основного состояния, которые в свою очередь определяются характерными размерами квантовых точек, и высотой барьера между квантовыми точками. Например, при размерах квантовых точек порядка 20 нм рабочая температура не превышает нескольких кельвинов.

Из обратимых пятиточечных ячеек могут быть построены любые логические элементы. На рис. 6.3 для примера представлена структура классического необратимого инвертора НЕ (NOT).

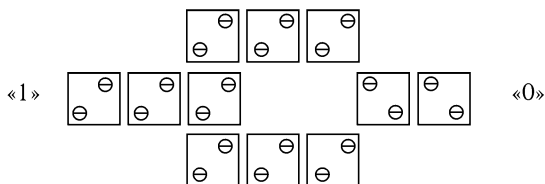


Рис. 6.3. Инвертор, построенный на пятиточечных ячейках [6.2]. Изображены только занятые электронами квантовые точки.

В качестве элементов клеточного автомата могут быть использованы и другие бистабильные устройства [6.1]. Например, в работе А. Короткова [6.3] было предложено в качестве отдельного элемента использовать *линейную цепочку* из нескольких квантовых точек, которая может находиться в двух состояниях — нейтральном и поляризованном (рис. 6.4), что позволяет обойти некоторые трудности, связанные с использованием пятиточечных ячеек.

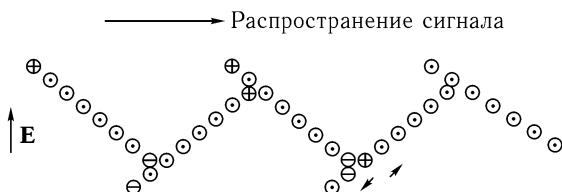


Рис. 6.4. Передача сигнала без переноса заряда путем поляризации линейных элементов из восьми квантовых точек в схеме А. Короткова.

Квантовая точечная структура, являющаяся аналогом атома, представляет интерес также и с точки зрения наблюдения многочастичных эффектов в матрице таких связанных между собой структур. Удерживаемые гетероструктурными барьерами электроны в них могут туннельным образом переходить на соседние точечные структуры, образуя суперпозицию локализованных электронных состояний. Такая регулярная квазидвумерная система ведет себя как искусственный узкозонный кристалл со свойствами, управляемыми в широком диапазоне. При наполовину заполненной электронами узкой минизоне система аналогична переходному металлу, который может испытывать фазовые переходы металл-диэлектрик первого рода моттовского типа при соотношении

параметров в модели Хаббарда $T_{abt}/U \sim 1$. Управлять удерживающими электроны потенциальными барьерами можно с помощью воздействия внешним электрическим полем и тем самым управлять моттовским переходом и транспортными свойствами матрицы из квантовых точечных структур. Для этой схемы в [6.4, 6.5] предлагается использовать систему связанных квантовых точек несимметричной выпуклой формы (рис. 6.5).

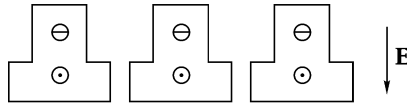


Рис. 6.5. Двухточечные ячейки выпуклой формы [6.4], E — напряженность электрического поля.

Под действием электрического поля электроны переходят в суженную часть квантовой точки, с более широким эффективным барьером между точками с меньшим значением параметра T_{abt} и большим значением U . Передача информации от одного элемента к другому в такой матрице будет осуществляться путем, подобным распространению *волн зарядовой плотности* в обычных полупроводниковых кристаллах.

Рассмотренные выше устройства не являются в полной мере квантовыми клеточными автоматами, поскольку способны производить лишь *цифровые вычисления* на основе булевой логики и не способны выполнять квантовые алгоритмы, основанные на использовании свойств чистых квантовых состояний системы квантовых точек. В них не соблюдаются четыре из пяти основных требований для квантовых компьютеров, которые были перечислены ранее в гл. 3. Во-первых, ячейка с двумя состояниями, соответствующими двум значениям параметра поляризации P , не обладает свойствами кубита. Во-вторых, в таких клеточных автоматах исходная инициализация квантовых состояний не производится. В-третьих, при тех температурах, которые предполагается использовать, время декогерентизации возбужденных состояний очень мало и, даже если бы инициализация была проведена, когерентность начального состояния была бы быстро разрушена. В-четвертых, квантовые состояния по крайней мере двух соседних ячеек не образуют контролируемые суперпозиции типа запутанных состояний, необходимые для выполнения двухкубитовых операций. Наконец, предполагаемые способы управления и контроля состояний отдельных квантовых

ячеек не предусматривают чувствительности к их когерентным свойствам, то есть являются в этом смысле «грубыми».

Тем не менее это не означает, что принцип клеточного автомата на ячейках из квантовых точек с зарядовой поляризацией должен быть совершенно исключен из использования в квантовых компьютерах.

Так, если потенциальный барьер, разделяющий ближайшие квантовые точки на разных диагоналях пятиточечной ячейки, достаточно прозрачен и энергия туннелирования (второй член в (6.1)) сравнима с энергией прямого кулоновского взаимодействия в ячейке (третий и четвертый члены в (6.1)), то вырождение основного состояния снимается, и в этом случае электроны уже не локализуются только на двух точках. Квантовое состояние ячейки будет определяться *суперпозицией* состояний электронов на всех четырех точках внутри ячейки. Вырожденные состояния, соответствующие полной локализации электронов на квантовых точках, становятся теперь нестационарными, а параметр поляризации P осциллирующим. Другими словами происходит когерентное туннелирование между *двумя* парами квантовых точек. Этой суперпозицией в принципе можно управлять путем изменения параметров потенциальных барьеров, разделяющих квантовые точки или воздействуя локально внешним электрическим полем на квантовые точки. Такую суперпозицию состояний одной ячейки формально можно описывать с помощью понятия псевдоспина, подобно суперпозиции состояний отдельного кубита. Однако в качестве кубита удобнее выбрать не пятиточечную, а более простую структуру на квантовых точках. Далее будут рассмотрены такие структуры с двумя зарядовыми состояниями, которые могут служить основой для создания квантовых компьютеров и, в частности, квантовых клеточных автоматов.

Варианты квантовых клеточных автоматов на ядерных спинах ранее были рассмотрены в гл. 5.

6.2. Клеточные автоматы на квантовых точках с электронной спиновой поляризацией

Среди других предлагаемых вариантов создания клеточного автомата на квантовых точках в литературе обсуждается возможность использования в качестве двухуровневого элемента квантовой точки с одним электроном, находящимся в дважды вырожденном по спину орбитальном состоянии. Одна из первых работ на эту тему была опубликована в 1994 году [6.6]. В ней рассматривалось устройство, работающее

по принципу клеточного автомата на основе классической булевой логики. Квазидвумерная (или квазиодномерная) структура из одноэлектронных квантовых точек представляла собой матрицу, в которой благодаря взаимодействиям между электронами возможно установление спинового упорядочения. Свойства таких систем достаточно детально исследованы теоретически и, в частности, на основе модели Хаббарда. Для реализации принципа вычислений в основном состоянии в структурах, предназначенных для создания вычислительных устройств типа клеточных автоматов, основное состояние системы должно соответствовать *антиферромагнитному* упорядочению. Температура «фазового перехода» в такое состояние должна быть значительно выше рабочих температур устройства. Для комнатных рабочих температур квантовые точки должны в этом случае иметь диаметр порядка 2 нм, а расстояние между их центрами порядка 4 нм. Передача информации от одного элемента к другому в таких системах будет осуществляться посредством своеобразных *волн спиновой плотности*. Заметим, что основное антиферромагнитно упорядоченное состояние при конечных температурах не является чистым квантовым состоянием системы электронных спинов, поскольку возбуждение спиновых волн нарушает фазовую когерентность состояний отдельных спинов.

Ввод и вывод информации в устройствах на квантовых точках со спиновой поляризацией может быть произведен с помощью специального типа сканирующего туннельного микроскопа, в котором зонд выполнен из магнитного материала. Булевые состояния отдельного электронного спина, создаваемые локальным полем, представляют собой квантово-механические средние значения проекции спина на направление поля.

Анализ функционирования основных логических элементов на квантовых точках с электронной спиновой поляризацией был выполнен С. Молотковым и С. Назиным [6.7] на основе модели, описываемой гайзенберговским спиновым гамильтонианом вида

$$\hat{H} = \sum_{i>j} J \hat{S}_i \hat{S}_j + 2\mu_B \sum_i \hat{S}_i \mathbf{B}_i, \quad (6.4)$$

где \hat{S}_i — операторы электронного спина квантовой точки, J — обменный интеграл, суммирование ведется только по ближайшим соседям, \mathbf{B}_i — локальное магнитное поле.

В качестве примера рассмотрим логический элемент NOT (НЕ) (обратимый инвертор) на спиново-поляризованных квантовых точках. Он представляет собой всего две близко расположенные квантовые точки А и В, электронные спины которых связаны обменным взаимодействием с $J > 0$. Идеально было бы иметь для него в качестве входа спиновое состояние $|\uparrow_A\rangle$, а в качестве выхода $|\downarrow_B\rangle$, или наоборот. Однако такие чистые состояния в структуре из двух точек при комнатных температурах невозможно реализовать из-за неизбежной при наличии обменного взаимодействия примеси других состояний и сильной неоднородности сигнального магнитного поля, используемого для индивидуального управления состояниями квантовых точек. Поэтому спиновые конфигурации входа и выхода следует рассматривать как квантовомеханические средние от оператора \hat{S}_z . Если выбрать в качестве базисных четырехкомпонентные составляющие прямых (или тензорных) произведений спиновых векторов состояния квантовых точек А и В $\left\{ |\uparrow_A\uparrow_B\rangle, |\uparrow_A\downarrow_B\rangle, |\downarrow_A\uparrow_B\rangle, |\downarrow_A\downarrow_B\rangle \right\}$, то диагонализировав гамильтониан (6.4), получим, что основному состоянию при $J > 0$, $B_A \neq 0$, $B_B = 0$, с энергией $\varepsilon = -J/2 - \sqrt{(\mu_B B_A)^2 + J^2}$ соответствует собственный вектор в виде суперпозиции [6.7]

$$|S_{AB}\rangle = (u|\uparrow_A\downarrow_B\rangle - v|\downarrow_A\uparrow_B\rangle), \quad (6.5)$$

где

$$\begin{pmatrix} u^2 \\ v^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\mu_B B_A}{\sqrt{(\mu_B B_A)^2 + J^2}} \right). \quad (6.6)$$

Квантово-механические средние значения для проекций спинов на входе и выходе при наличии локального сигнального магнитного поля B_A только на одной квантовой точке А (вход инвертора) принимают вид

$$\langle \hat{S}_{Az} \rangle = \frac{\mu_B B_A}{\sqrt{(\mu_B B_A)^2 + J^2}}, \quad \langle \hat{S}_{Bz} \rangle = -\frac{\mu_B B_A}{\sqrt{(\mu_B B_A)^2 + J^2}}. \quad (6.7)$$

На квантовых точках со спиновой поляризацией в рассмотренном варианте могут быть построены и любые другие логические элементы.

Соответствующие вычислительные устройства могут обладать рядом существенных преимуществ по сравнению с другими наноструктурными устройствами, работающими на классических булевых принципах. К основным из них можно отнести следующие [6.6]:

- а) Они могут в принципе работать при *комнатных* температурах.
- б) Электронный спин *не будет переориентироваться под действием внешнего шумового возмущения*, если эти шумовые поля немагнитные.
- в) Перезапись бита информации производится без физического перемещения заряда, и поэтому *нет емкостных ограничений на временные параметры*.
- г) Отсутствие движения зарядов *исключает проблему захвата носителей дефектами материала*.

Компьютеры, построенные из таких одноэлектронных спиновых элементов могли бы обладать очень высокой степенью интеграции (до 10^{13} бит/см²), ультравысоким быстродействием (до ~ 1 пс на элемент), ультранизкой рассеиваемой энергией ($\sim 10^{-20}$ Дж на элемент).

Однако, рассмотренные схемы клеточных автоматов на квантовых точках со спиновой поляризацией, также как и на ячейках с зарядовой поляризацией, также не являются квантовыми в полном смысле. Как те, так и другие можно рассматривать лишь как своего рода *прототипы* клеточных автоматов, которые однако при определенной доработке могут стать и полноправными квантовыми компьютерами или войти в состав квантового компьютера в виде вспомогательного классического (булевого) устройства.

6.3. Квантовые компьютеры на квантовых точках с электронными зарядовыми (орбитальными) состояниями

6.3.1. Кубиты на паре квантовых точек с зарядовыми состояниями

В ряде работ предлагались различные варианты собственно квантовых компьютеров на квантовых точках с двумя электронными орбитальными состояниями в качестве кубитов, описываемых с помощью псевдоспина $1/2$. Рассмотрим здесь вариант такого компьютера на основе более простых ячеек по сравнению с рассмотренными выше пятиточечными ячейками, предложенный Т. Танамото (Т. Tanamoto) [6.8]. В качестве отдельной ячейки рассматривалась *несимметричная* пара квантовых точек *разного размера* с существенно отличающимися собственными энергиями. Эти пары точек предполагалось располагать в

туннельных структурах с несимметричными барьерами в области между каналом и затвором некоторой МОП-структуры. Между собой точки разделяются *достаточно прозрачным* потенциальным барьером, благодаря чему осуществляется определенная связь между точками. Инжектируемый в структуру со стороны канала электрон занимает нижележащий уровень, то есть он оказывается локализованным в квантовой точке большего размера. Полной локализации электрона на одной квантовой точке **a** можно сопоставить логическое состояние $\lvert 1 \rangle \equiv \lvert 1_a, 0_b \rangle$, а локализации на другой квантовой точке **b** (более высокая собственная энергия) — состоянию $\lvert 0 \rangle \equiv \lvert 0_a, 1_b \rangle$ (рис. 6.6). Этим двум состояниям квантовых точек соответствуют собственные энергии E_a и E_b . Будем предполагать, что они содержат и вклад внешнего потенциала.

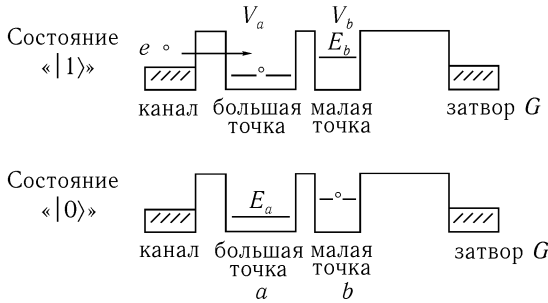


Рис. 6.6. Локализованные состояния электрона $\lvert 1 \rangle$ и $\lvert 0 \rangle$ на паре квантовых точек [6.8].

Для квантового описания рассматриваемой пары точек воспользуемся выражением (6.1). Опуская в нем здесь кулоновское взаимодействие и спиновые индексы и полагая для простоты $T_{ab} = T_{ba}$ запишем гамильтониан для системы с двумя квантовыми состояниями и фермиевскими операторами рождения и уничтожения на точках **a** и **b**

$$\hat{H} = E_a \hat{a}_a^+ \hat{a}_a + E_b \hat{a}_b^+ \hat{a}_b + (T_{ab}/2)(\hat{a}_a^+ \hat{a}_b + \hat{a}_b^+ \hat{a}_a). \quad (6.8)$$

Диагонализацию гамильтониана произведем с помощью следующего унитарного преобразования фермиевских операторов

$$\begin{aligned} \hat{a}_a^+ &= u \hat{A}_1^+ + v \hat{A}_2^+, \\ \hat{a}_b^+ &= -v \hat{A}_1^+ + u \hat{A}_2^+, \end{aligned} \quad (6.9)$$

где коэффициенты преобразования удовлетворяют условию $u^2 + v^2 = 1$. В результате для них будем иметь

$$\begin{pmatrix} u^2 \\ v^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{(E_b - E_a)}{\sqrt{(E_b - E_a)^2 + T_{ab}^2}} \right). \quad (6.10)$$

Преобразованный гамильтониан принимает диагональный вид

$$\begin{aligned} \widehat{H} &= E_- A_1^+ A_1 + E_+ A_2^+ A_2 = \\ &= (E_a + E_b)/2 - \Delta E (A_1^+ A_1 - A_2^+ A_2), \end{aligned} \quad (6.11)$$

где собственные энергии делокализованных на двух точках электронных состояний имеют значения

$$E_{\pm} = (E_a + E_b)/2 \pm \Delta E = (E_a + E_b)/2 \pm (1/2) \sqrt{(E_b - E_a)^2 + T_{a,b}^2}. \quad (6.12)$$

В (6.11) было учтено, что на две квантовые точки приходится один электрон, то есть

$$\widehat{a}_a^+ \widehat{a}_a + \widehat{a}_b^+ \widehat{a}_b = \widehat{A}_1^+ \widehat{A}_1 + \widehat{A}_2^+ \widehat{A}_2 = 1. \quad (6.13)$$

В гамильтониане для пары квантовых точек (6.8) от фермиевских операторов рождения и уничтожения электронов на квантовых точках \mathbf{a} и \mathbf{b} , при условии (6.13), можно перейти к матрицам Паули с помощью соотношений Н. Боголюбова [6.9]:

$$\widehat{a}_a^+ \widehat{a}_a = (1 - \widehat{\sigma}_z)/2, \quad \widehat{a}_b^+ \widehat{a}_b = (1 + \widehat{\sigma}_z)/2, \quad \widehat{a}_a^+ \widehat{a}_b + \widehat{a}_b^+ \widehat{a}_a = \widehat{\sigma}_x, \quad (6.14)$$

В результате получим в представлении состояний $\lvert 1 \rangle$ и $\lvert 0 \rangle$ для гамильтониана (6.8) выражение

$$\widehat{H} = (1/2) \cdot (E_a + E_b) \cdot \widehat{1} + (1/2) \cdot (E_b - E_a) \widehat{\sigma}_z + (T_{ab}/2) \cdot \widehat{\sigma}_x, \quad (6.15)$$

подобное гамильтониану спина $S = 1/2$ во внешнем поле с составляющими $B_z = (E_b - E_a)/2\mu_B$ и $B_x = T_{ab}/2\mu_B$.

Таким образом, мы видим, что рассмотренная несимметричная пара квантовых точек с одним электроном обладает основными свойствами, характерными для кубитов-спинов.

Цепочку из расположенных рядом пар квантовых точек — кубитов — в [6.8] предполагается поместить в подзатворный диэлектрик специально созданного кремниевого МОП-транзистора таким образом, чтобы перенос заряда между различными парами-кубитами был пренебрежимо мал. Для индивидуального управления кубитами помимо верхнего общего затвора предлагается ввести систему *индивидуальных* управляющих затворов внутри диэлектрика, действующих непосредственно на каждый кубит.

Основные этапы квантовых вычислительных операций состоят в следующем. Инициализация зарядового состояния осуществляется путем приложения к верхнему общему затвору (рис. 6.8) большого напряжения, приводящего к заполнению состояний больших точек и унифицирующего состояния кубитов. Этот же затвор служит защитой от внешних электромагнитных воздействий. Входные и выходные сигналы поступают через индивидуальные затворы каждого кубита.

С помощью внешнего электрического потенциала, создаваемого напряжением на соответствующих затворах, можно изменять относительное положение минимумов потенциала и положение энергетических уровней в квантовых точках. При совмещении этих уровней ($E_b = E_a$) в результате резонансного туннелирования электрон будет переходить из одной точки в другую. В результате образуются два новых состояния, представляемые *четными* и *нечетными суперпозициями* делокализованных по двум связанным точкам состояний, определяемых операторами рождения

$$\hat{A}_1^+ = \sqrt{1/2}(\hat{a}_a^+ - \hat{a}_b^+), \quad \hat{A}_2^+ = \sqrt{1/2}(\hat{a}_a^+ + \hat{a}_b^+). \quad (6.16)$$

Основному энергетическому состоянию, как следует из (6.11), соответствует антисимметричная суперпозиция состояний с энергией E_- , определяемая операторами рождения \hat{A}_1^+ , которые в гайзенберговском представлении зависят от времени следующим образом:

$$\hat{A}_{1,2}^+(t) = \exp(i\hat{H}t/\hbar)\hat{A}_{1,2}^+ \exp(-i\hat{H}t/\hbar) = \hat{A}_{1,2}^+ \exp(iE_{\mp}t/\hbar). \quad (6.17)$$

Если при $t = 0$ электрон был локализован на точке \mathbf{a} , то есть $\langle 1 \rangle = \hat{a}_a^+ \cdot |0_a, 0_b\rangle$, где $|0_a, 0_b\rangle$ — состояние «вакуума» (отсутствуют электроны на обоих квантовых точках \mathbf{a} и \mathbf{b}), то в условиях резонансного туннелирования ($E_a = E_b = E$), создаваемого импульсом напряжения на управляющем затворе, эволюция основного состояния двухкубитовой ячейки во времени будет описываться суперпозицией состояний

« $|1\rangle$ » $\equiv \hat{a}_a^+ \cdot |0_a, 0_b\rangle = |1_a, 0_b\rangle$ и « $|0\rangle$ » $\equiv \hat{a}_b^+ \cdot |0_a, 0_b\rangle = |0_a, 1_b\rangle$, соответствующих нахождению электрона на точках **a** и **b**:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{a}_a^+(t) \cdot |0_a, 0_b\rangle = (u\hat{A}_1^+(t) + v\hat{A}_2^+(t)) \cdot |0_a, 0_b\rangle = \\ &= \exp(i(E_a + E_b)t/2\hbar) [\cos(\Delta Et/\hbar) \cdot \langle 1 \rangle + \sin(\Delta Et/\hbar)] \cdot \langle 0 \rangle. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Выбирая длительность импульса напряжения на затворе $t = \pi\hbar/2\Delta E$, получим $|\Psi(t)\rangle = \exp(iE_a t/\hbar)\hat{a}_b^+ \cdot |0_a, 0_b\rangle = \exp(i\pi E/2\Delta E) \cdot \langle 0 \rangle$, то есть « $|1\rangle$ » $\Rightarrow \exp(i\pi E/2\Delta E) \cdot \langle 0 \rangle$, что с точностью до несущественного общего фазового множителя как раз соответствует операции NOT. При толщине потенциального барьера ~ 1 нм и высоте ~ 3 эВ, время переключения составляет ~ 20 пс [6.8].

Для выполнения двухкубитовой операции CNOT следует использовать не учтенное в гамильтониане (6.8) изменение потенциала на квантовых точках контролируемого кубита, определяемое кулоновским взаимодействием с зарядом на соседнем контролирующем кубите при изменении его состояния, благодаря которому происходит относительное смещение уровней энергии в квантовых точках контролируемого кубита, приводящее или не приводящее к выполнению на нем операции NOT.

Декогерентизация квантовых состояний в кремниевых наноструктурах в основном определяется влиянием поверхностных ловушек, поэтому потребуется использование сверхчистых технологий для исключения этого механизма декогерентизации. Предложенная схема удачно сочетает квантовую и обычные полупроводниковые интегральные схемы, что делает ее удобным вариантом для использования в квантовом компьютере.

Позднее Т. Танамото [6.10] рассмотрел другой вариант, в котором в качестве кубитов предлагалось использовать пары симметричных квантовых точек, но с несколько большими размерами (десятки нанометров), чем в предыдущем случае. В этом случае энергетический спектр отдельных квантовых точек близок к непрерывному. Предполагается, что между точками имеет место емкостная связь, при этом эта связь между кубитами более слабая, чем между квантовыми точками внутри кубита. Рассматривается случай, когда *разность чисел электронов* на квантовых точках в паре либо не изменяется ($n = N_a - N_b = 0$), либо изменяется на единицу ($n = 1$), что соответствует двум состояниям пары точек. Поляризованные зарядовые состояния ку-

бита (двух связанных квантовых точек) ведут себя как дипольные моменты в электрическом поле, создаваемом потенциалом индивидуальных затворов. Это поведение описывается уравнением Блоха и поэтому квантовые операции реализуются подобно тому, как это происходит в ЯМР квантовом компьютере. Электростатическая энергия пары точек определяется величиной параметра n и приложенного к индивидуальному затвору напряжения, при адиабатическом изменении которого эти состояния будут проходить точку пересечения, где энергии обоих состояний сравниваются, и затем происходит дальнейший обмен заселенностями состояний пары квантовых точек (то есть производится операция NOT). Две пары таких квантовых точек эквивалентны системе двух взаимодействующих кубитов.

Оценка времени декогерентизации, обусловленного преимущественно взаимодействием двухуровневой системы с деформационными акустическими фононами, показывает значительно большее значение по сравнению с временем декогерентизации в трехмерных структурах, достигающее порядка 0,1 мкс, что является проявлением так называемого эффекта «фононного узкого горла» [6.11] в таких низкоразмерных структурах, какими являются квантовые точки.

В [6.10] обсуждается и предложение использовать для детектирования зарядового распределения, создаваемого на кубитах из квантовых точек, расположенных в подзатворном окисле кремния длинноканальной МОП-транзисторной структуры. Систему кубитов в МОП-транзисторе можно рассматривать как последовательный ряд МОП-структур, соответствующих отдельными связанными квантовыми точками (рис. 6.7).

Если между истоком и стоком приложено напряжение V_D , то область обеднения будет распространяться от истока к стоку таким образом, что ширина области обеднения будет увеличиваться при приближении к стоку. Ток в канале транзистора I_D будет различаться в зависимости от положения кубитов, на которых происходит изменение распределение заряда. В канале между i -м кубитом и $(i-1)$ -м кубитом для области малых V_D этот ток определяется выражением (см. [6.12])

$$I_D^i \approx \beta_0 \left((V_G^{(i)} - V_T^{(i)})(V_i - V_{i-1}) - \frac{1}{2} \alpha (V_i^2 - V_{i-1}^2) \right), \quad (6.19)$$

где $\beta_0 = Z\mu_0 C_0/L_i$, Z — ширина канала, μ_0 — подвижность носителей в канале, L_i — длина канала для i -го кубита, C_0 — удельная емкость

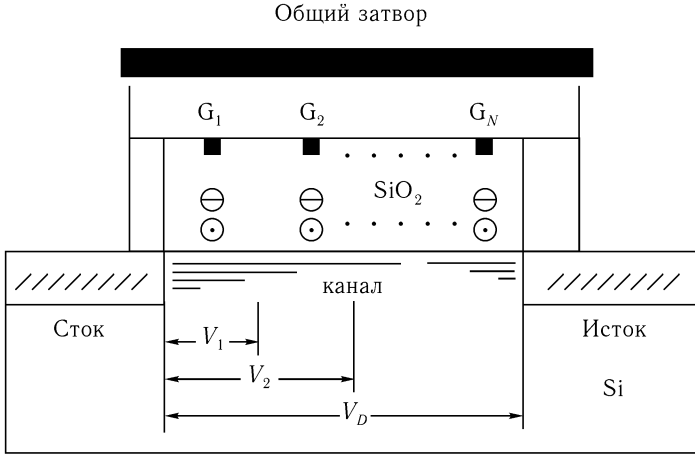


Рис. 6.7. Схема МОП-структуры с кубитами из квантовых точек в подзатворном диэлектрике. G_1, G_2, \dots, G_M — индивидуальные затворы при кубитах. Все кубиты находятся в состоянии с $n = 1$.

подзатворного диэлектрика, $\alpha = 1 + Q_B/4\varphi_B C_0$, где Q_B — заряд области обеднения на единицу поверхности, $V_G^{(i)}$ — напряжение на затворе, $V_T^{(i)} = V_T + \Delta V_T^{(i)}$ — пороговое напряжение, где $V_T = V_{FB} + 2\varphi_B + Q_B/C_0$, V_{FB} — напряжение плоских зон, φ_B — разность потенциалов между уровнем Ферми и собственным уровнем полупроводниковой подложки, $\Delta V_T^{(i)}$ — сдвиг порогового напряжения за счет изменения зарядового распределения i -го кубита. Из условия непрерывности тока следует, что токи на разных участках должны быть равны одному и тому же значению I_D .

Рассмотрим в качестве примера только *два кубита*, когда напряжение на первом кубите V_1 , а на втором $V_2 = V_D$. Значение V_1 определяется из условия равенства токов на обоих участках $I_D^{(1,2)} = I_D$. В результате найдем (здесь исправлена ошибка в [6.10])

$$I_D \approx \frac{\beta_0}{V_{G1} + V_{G2}} \left(V_{G2} V_{G1} V_D - \frac{\alpha(V_{G1}^2 + 2V_{G1}V_{G2} - V_{G2}^2)}{2(V_{G1} + V_{G2})} V_D^2 \right), \quad (6.20)$$

где $V_{Gi} = V_G^{(i)} - V_T^{(i)} \gg V_D$.

Если заряд перераспределился на первом кубите и вызвал сдвиг порогового напряжения ΔV_T на первом участке, то $V_{G1} = V_G - V_T - \Delta V_T$ и $V_{G2} = V_G - V_T$, а если это произошло на втором кубите, то $V_{G1} = V_G - V_T$ и $V_{G2} = V_G - V_T - \Delta V_T$. Для разности токов для этих двух случаев будем иметь [6.10]

$$\Delta I_D \approx \frac{\beta_0 \alpha}{[2(V_G - V_T) - \Delta V_T]} \Delta V_T V. \quad (6.21)$$

Следовательно, эта разность может наблюдаться только на нелинейном участке вольтамперной характеристики $I_D(V_D)$ ($\alpha \neq 0$).

Возможность использования оптических методов управления состояниями кубитов на асимметричных квантовых точках разных размеров и разного состава компонентов в гетероструктуре GaAs/Al_xGa_{1-x}As, вертикально расположенных на идентичных полупроводниковых столбиках, обсуждалось в [6.13]. В этом случае квантовый регистр предлагается строить на *основном* и *возбужденном* одноэлектронных состояниях каждой квантовой точки. Асимметричные квантовые точки имеют большой встроенный дипольный электростатический момент для переходов между основным и возбужденным состояниями. Связь электронных состояний соседних квантовых точек осуществляется посредством электрического диполь-дипольного взаимодействия. Асимметричный потенциал может быть выбран так, чтобы скорость дефазировки состояний, обусловленная спонтанной эмиссией фононов, была минимальной. Квантовые операции в этом случае также можно описывать с помощью понятия псевдоспина в полной аналогии с ЯМР квантовыми компьютерами, но здесь они будут выполняться с помощью лазерных импульсов. Преимуществом такого варианта является несколько большие размеры элементов по сравнению с квантовыми точками с зарядовой поляризацией в основном состоянии, поскольку взаимодействие между кубитами определяется электрическими диполь-дипольными взаимодействиями, а не туннелированием через прозрачные потенциальные барьеры между кубитами. Однако быстрая декогерентизация возбужденных электронных состояний в таких системах, по-видимому, может стать основным препятствием реализации их для квантовых вычислений.

Другого типа вариант оптически управляемых кубитов был предложен Л. Опёновым [6.14]. В качестве кубита рассматривалась па-

ра одинаковых двухуровневых квантовых точек с высоким разделяющим барьером. Двама состояниями кубита являлись два *основных орбитальных состояния* этой пары точек, соответствующие хорошей локализации электрона в одной из точек. Существенно, что в этих состояниях электрон имеет очень большое время декогерентизации. Заметную вероятность когерентным образом перейти из одной точки в другую электрон приобретает лишь при переводе его резонансным лазерным π -импульсом в возбужденное состояние с уровнем энергии вблизи края потенциальной ямы. Было показано, что при определенных значениях частоты, длительности и интенсивности лазерного импульса электрон перейдет с вероятностью близкой к единице из основного локализованного состояния в одной квантовой точке в локализованное основное состояние другой квантовой точки, что дает возможность осуществить однокубитовую обратимую операцию NOT.

Оптически управляемые двухкубитовые операции CNOT могут выполняться на двух парах квантовых точек, соответствующих контролируемому и контролирующему кубитам, с использованием еще одной дополнительной квантовой точки с меньшими размерами, расположенной у контролируемого кубита в области разделяющего барьера [6.15]. Энергия основного состояния последней близка к вершине потенциального барьера и поэтому волновые функции основного состояния электрона малой квантовой точки и более протяженных возбужденных состояний больших квантовых точек при оптическом возбуждении перекрываются и все квантовые точки начинают взаимодействовать между собой подобно атомам в молекуле. Структуры, состоящие из нескольких взаимодействующих между собой квантовых точек, стали называть «искусственными молекулами». Взаимодействие между кубитами, необходимое для выполнения двухкубитовой операции, осуществляется за счет гибридизацию их возбужденных состояний и основного состояния той же малой квантовой точки, которая благодаря параллельному сдвигу одного кубита относительно другого, оказывается расположенной еще и вблизи одной из больших точек контролирующего кубита. Таким образом, воздействие через нее на контролируемый кубит либо произойдет, если электрон на большой точке контролирующего кубита локализован (состояние $|1\rangle$), либо не произойдет, если он не локализован (состояние $|0\rangle$).

6.3.2. Кубит на одной квантовой точке, разделенной управляемым потенциальным барьером

Численное моделирование квантового кубита на квантовой точке, сформированной в арсениде галлия, с круговой цилиндрической симметрией, разделенной на *две симметричные части* дополнительным потенциальным барьером гауссовой формы, который создает два одинаковых потенциальных минимума на расстоянии порядка десятка нанометров друг от друга, было выполнено в [6.16]. Предполагалось, что система находится при низких температурах порядка милликельвинов, при которых kT много меньше энергии возбуждения электронных квантовых состояний, что обеспечивает их исходную инициализацию и требуемую когерентность. В качестве логических состояний служили полностью локализованные состояния электрона в минимумах потенциала при достаточно большой высоте потенциального барьера. Считывание состояний кубита предполагается выполнять, используя одноэлектронные методы для соответствующей пары считывающих затворов, расположенных вблизи потенциальных минимумов квантовой точки. Кубит управляется с помощью центрального контролирующего затвора, изменяющего, в отличие от варианта Таномото, высоту разделяющего потенциального барьера. Были рассмотрены способы осуществления основных квантовых операций. Однокубитовая операция производится, как и в предыдущем случае, путем выбора соответствующей длительности импульса напряжения на центральном контролирующем затворе.

При выполнении операции CNOT контролирующий кубит располагается таким образом, чтобы один из минимумов его потенциала, в котором находится или отсутствует электрон (соответственно, состояния $|1\rangle$ и $|0\rangle$), оказывается вблизи потенциального барьера соседнего контролируемого кубита, повернутого на угол $\pi/2$. Следовательно, контролирующий кубит может в зависимости от своего состояния изменять величину этого барьера, включая (или не включая) в контролируемом кубите операцию NOT. Например, если состояние контролирующего кубита $|0\rangle$ соответствует отсутствию электрона в ближайшем к потенциальному барьеру контролируемого кубита минимуме контролирующего кубита, то изменение высоты барьера контролируемого кубита будет минимально и для выполнения операции NOT на нем потребуются длительность воздействующего на него импульса t_{NOT0} , а если это состояние $|1\rangle$, то происходит существенное увеличение высоты барье-

ра и потребуется другая бóльшая продолжительность импульса t_{NOT1} . Продолжительность импульсного воздействия на контролирующей кубит t_{CNOT} выбирается следующим образом:

$$t_{\text{CNOT}} = t_{\text{NOT0}} \cdot t_{\text{NOT1}} / (t_{\text{NOT1}} - t_{\text{NOT0}}). \quad (6.22)$$

Изменяя амплитуду импульсов, можно достигнуть того, чтобы отношение

$$t_{\text{NOT1}} / 2(t_{\text{NOT1}} - t_{\text{NOT0}}) = N \quad (6.23)$$

было целым числом. Если контролирующей кубит находится в состоянии $|0\rangle$, то продолжительность $t_{\text{CNOT}} = t_{\text{NOT0}} 2N$ и действие такого импульса будет эквивалентно действию $2N$ последовательных операций NOT на втором кубите, что совпадает с операцией идентичности. Если контролирующей кубит находится в состоянии $|1\rangle$, то продолжительность $t_{\text{CNOT}} = t_{\text{NOT1}}(2N - 1)$ и действие такого импульса эквивалентно нечетному числу $(2N - 1)$ последовательных операций NOT на втором кубите, или просто операции NOT. Продолжительность операций NOT и CNOT при значениях характерных геометрических параметров рассматриваемой структуры порядка десятка нанометров лежит в области нескольких десятков пикосекунд.

В работе [6.16] были изучены также процессы декогерентизации. Для полупроводниковых структур на основе GaAs при нулевых температурах основными механизмами декогерентизации являются: спонтанная эмиссия фотонов, а также эмиссия акустических деформационных и пьезоэлектрических фононов. Преобладающим механизмом оказывается спонтанная эмиссия пьезоэлектрических акустических фононов, но и она имеет относительно малую вероятность при работе системы кубитов в гигагерцовом диапазоне рабочих частот.

6.4. Квантовые компьютеры на квантовых точках с электронными спиновыми состояниями

6.4.1. Квантовые точки с электронными спинами, связанными обменным взаимодействием

Собственно квантовые компьютеры на квантовых точках с дважды вырожденным состоянием электронного спина, которое снимается во внешнем магнитном поле, были предложены в 1998 году в работах [6.17, 6.18]. Можно указать на два основных преимущества использования реального спина вместо псевдospина, которое обычно используется для приближенного описания системы, где основную роль

играют лишь два зарядовых (орбитальных) состояния. Во-первых, реальный спин $1/2$, представляющий кубит, в отличие от псевдоспина всегда *хорошо определен*, то есть не существует излишнего гильбертового пространства, куда могла бы произойти «утечка» состояния кубита; во-вторых, время декогерентизации кубитов на реальных электронных спинах в полупроводнике может быть сравнительно *велико* (микросекунды).

Квантовые точки предполагалось создавать путем удержания двумерного электронного газа, образующегося в квантовой яме в плоскости гетероперехода, например, в гетероструктуре GaAs/Al_xGa_{1-x}As на ограниченных участках его площади, с помощью электрических электродов, расположенных над гетероструктурой. Чтобы получить кубиты с электронными спинами на такой структуре (один кубит на одну квантовую точку) необходимо точно контролировать число электронов на квантовой точке. Число электронов N в квантовой точке должно быть нечетным числом, сохраняющимся в процессе всех операций, что может быть обеспечено благодаря эффекту кулоновской блокады. В идеальном случае, который соответствует очень малым размерам квантовых точек, $N = 1$.

В качестве квантовых точек — кубитов рассматривались также и естественные донорные атомы, внедренные, например, в гетероструктуре на основе Si_xGe_{1-x} вблизи поверхности гетероперехода [6.19]. В этом случае удастся так контролировать эффективную массу электрона, что эффективный боровский радиус в напряженном сплаве SiGe может стать значительно больше чем в Si и отдельные донорные атомы могут располагаться на расстоянии друг от друга на порядок больше, чем в кремниевом квантовом компьютере Кейна. Следовательно, для формирования таких многокубитовых структур может быть *использована современная оптическая литография*.

Другим преимуществом такой системы является то, что в зависимости от состава сплава электронный g -фактор сплава изменяется от $g(x = 1) = 1,995$ до $g(x = 0) = 1,563$ и поэтому электронный спиновый резонанс легко настраивается с помощью задаваемого затвором на эпитаксиальной гетероструктуре электростатического поля, которое смещает максимум распределения электронной плотности на доноре из эпитаксиального слоя с одним значением g в сторону слоя с другим его значением. Индивидуальные электрические заряды на донорах могут детектироваться в этом случае при низких температурах с помо-

щью более простого по сравнению с одноэлектронными транзисторами устройства типа *обычного МОП-транзистора*.

При построении любого квантового компьютера на квантовых точках с электронными спинами необходимо выполнить ряд требований. Они были детально проанализированы в [6.20] и сводятся в основном к следующему:

1) Разность энергий возбужденного и основного орбитальных состояний ΔE должна быть достаточно велика для того, чтобы можно было пренебречь тепловыми переходами в возбужденные состояния:

$$\Delta E \gg kT. \quad (6.24)$$

В случае *гелиевых* рабочих температур эта разность энергий (порядка нескольких мэВ) достигается в квантовых точках с *размерами в десятки нанометров*.

2) Для формирования начального состояния квантового регистра из L кубитов на квантовых точках с электронными спинами типа $|0_1, 0_2, 0_3, \dots, 0_L\rangle$ при температурах жидкого гелия достаточно использовать магнитные поля порядка *нескольких тесла*. При этом геометрия регистра и окружение другими кубитами должны быть выбраны с таким расчетом, чтобы это состояние было стабильным и после выключения магнитного поля, то есть отдельные кубиты должны быть в значительной степени развязаны друг с другом.

3) Роль времени декогерентизации в спиновых системах T_D играет время поперечной или спин-спиновой релаксации электронных спинов τ_2 . Оно обычно на порядок больше зарядового времени декогерентизации. Типичное время релаксации τ_2 для электронных спинов донорных атомов в объемном кремнии составляет сотни микросекунд. Для сравнения заметим, что декогерентизация зарядовых состояний происходит за наносекунды. Это значение может существенно отличаться для нанoeлектронных квантовых структур, содержащих парамагнитные примеси. Серьезным механизмом декогерентизации электронных спиновых состояний в слабом магнитном поле может быть взаимодействие электронного спина с ядерными спинами основного материала [6.18]. Еще одним механизмом декогерентизации является неоднородность внешнего магнитного поля, которая приводит к неточности выполнения квантовых операций. Для надежной работы квантового компьютера необходима большая величина отношения $\tau_D/\tau_q \gg 1$, где

τ_q^{-1} — тактовая частота компьютера. С другой стороны, *время выполнения отдельной логической операции* τ_q должно быть достаточно велико для того, чтобы не вызывались переходы в возбужденное орбитальное состояние: $\tau_q \gg \hbar/\Delta E$, то есть для квантовых точек с размерами в десятки нанометров должно быть более *десятька пикосекунд*.

4) В отличие от клеточного автомата на квантовых точках с электронной спиновой поляризацией [6.6] в предлагаемом варианте ввод информации и управление вентилями должно производиться с помощью квантовых операций, описываемых *унитарными* преобразованиями. Для выполнения однокубитовых операций, соответствующих поворотам спина на определенный угол, могут быть использованы, в частности, расположенные по соседству с кубитами вспомогательные квантовые точки из магнитного материала [6.17]. Электрическое импульсное воздействие на потенциальный барьер между кубитом и магнитной точкой приводит к тому, что гамильтониан квантовой точки получает на время переключения дополнительное зеемановское слагаемое, приводящее к необходимому повороту спина.

Двухкубитовая унитарная операция SWAP выполняется путем импульсного включения обменного взаимодействия, описываемого гамильтонианом гайзенберговского типа

$$\hat{H}_s(t) = J(t)\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \quad (6.25)$$

при этом необходимо, чтобы длительность импульса τ соответствовала $\int_0^\tau dt J(t)/\hbar = \pi$. Для оператора SWAP получим

$$\text{SWAP} = \hat{T} \cdot \exp\left(-i/\hbar \cdot \int_0^\tau \hat{H}_s(t) dt\right), \quad (6.26)$$

где \hat{T} — оператор Дайсона (F. Dyson) упорядочения по времени множителей, получаемых при разложении экспоненциального оператора в ряд.

Заметим, что с помощью одного обменного взаимодействия, описываемого гамильтонианом (6.25), нельзя осуществить произвольную двухкубитовую квантовую операцию на кубитах, поскольку этот гамильтониан коммутирует с операторами $\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2$ и $\hat{S}_z = (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z})$, то есть на основе его возможны только операции с одним и тем

же значением S и M , такой операцией является операция SWAP. Однако в совокупности с однокубитовыми операциями такая двухкубитовая операция позволяет сформировать и другие двухкубитовые операции.

Так фундаментальная операция CNOT осуществляется с помощью последовательности следующих однокубитовых операций и операции SWAP (раздел 2.1):

$$\text{CNOT} = \left(\hat{Z}_A(\pi/2) \otimes \hat{Z}_B(-\pi/2) \right) \cdot \sqrt{\text{SWAP}} \cdot \left(\hat{Z}_A(\pi/2) \otimes \hat{I}_B \right) \cdot \sqrt{\text{SWAP}}. \quad (6.27)$$

Временная зависимость $J(t)$ в соответствии с теорией возмущения определяется временной зависимостью параметра туннелирования $T_{12}(t)$ с одной точки на другую $J(t) \sim T_{12}^2(t)/U$ [6.16], где U — кулоновская энергия отталкивания двух электронов, находящихся на одной квантовой точке (параметр в гамильтониане Хаббарда). Эта зависимость может быть обеспечена путем воздействия с помощью импульсов напряжения на соответствующем затворе на высоту барьеров, разделяющего соседние квантовые точки и определяющего степень пространственного перекрытия их волновых функций, а также путем непосредственного изменения параметра J без изменения высоты барьера с помощью импульсов магнитного поля [6.18]. Для выполнения быстрых операций переключения, соответствующим *гигагерцовому* диапазону, значение параметра J должно достигать порядка 0,1 мэВ. Для выключения процесса перекрытия волновых функций необходимо уменьшить значение параметра J на много порядков.

Механизм двухкубитовых операций в системах на электронных состояниях примесных донорах в полупроводнике, рассматриваемых в качестве кубитов, аналогичен рассмотренному выше.

5) Для обеспечения необходимой помехоустойчивости обменный интеграл должен контролироваться с точностью 10^{-4} . Флуктуации значения J в основном определяются воздействием на кубиты внешнего $1/f$ -шума. Однако для кубитов на электронных спинах *влияние этих шумов* гораздо слабее, чем для кубитов на зарядовых состояниях, но *не пренебрежимо мало*, и необходимо его подавление или использование соответствующих способов помехоустойчивого кодирования информации.

6) Для измерения спинового состояния отдельного электрона в твердом теле не требуется, в принципе, высокая квантовая эффек-

тивность. Если, например, квантовая эффективность составляет 1%, то квантовый компьютер может выдать достаточно надежный результат, если считывание повторить 100 раз (заметим, что этот процесс не нарушает теоремы о невозможности клонирования квантовых состояний, поскольку состояния дополнительных кубитов являются «копиями» только в измеряемом базисе). Однако лучше все-таки иметь *высокую квантовую эффективность*, поскольку желательно иметь малое число дополнительных кубитов, чтобы завершить измерение за более короткое время (например, в 100 раз), чем время декогерентизации.

Реально такое быстрое измерение состояния отдельного спина пока не может быть выполнено путем непосредственных магнитометрических методов воздействия на его магнитный момент из-за недостаточной их чувствительности. Наиболее обещающим способом является преобразование состояния спиновых степеней свободы электрона, которые трудно измерить, в состояния зарядовых степеней свободы, которые измеряются с помощью *одноэлектронной* электрометрической техники. Общая схема процесса считывания состояния одноэлектронного кубита с помощью одноэлектронного транзистора детально проанализирована в [6.21]. Этого можно в принципе достигнуть также с помощью других упоминавшихся в гл. 5 схем, в частности, путем использования *спинового фильтра*, представляющего собой частично прозрачный потенциальный барьер, разделяющий квантовую точку и одноэлектронный транзистор, с высотой, зависящей от спинового состояния электрона. В последнем случае к квантовой точке прикладывается такое напряжение, при котором электрон отражается от более высокого барьера, если спин имеет одну ориентацию, и туннелирует через более низкий барьер, если спин электрона имеет обратную ориентацию, что и детектируется электрометрическим устройством.

Вариант квантового компьютера на квантовых точках с электронными спинами, работающий на принципе клеточного автомата, управляемого *только оптическими импульсами*, был предложен в [6.22]. Автор вообще отказывается как от электрических, так и от магнитных методов управления и измерения. В качестве элементарной ячейки компьютера предлагается система, состоящая из основной квантовой точки и окружающих ее вспомогательных точек (*ancillas*), каждая ячейка имеет определенное число соединений с соседними ячейками.

Как однокубитовые, так и двухкубитовые операции выполняются в условиях, когда определенные вспомогательные точки возбужде-

ны (активное состояние ячейки). В основном состоянии ячейки не выполняют никаких операций (спящее состояние ячейки). Однокубитовые операции осуществляются с одной ячейкой стандартным способом путем поворота оператора электронного спина-кубита в основной квантовой точке на соответствующий угол при переходах под действием резонансных оптических импульсов круговой поляризации из возбужденного состояния определенной вспомогательной точки. Поскольку любой поворот может быть представлен как комбинация поворотов вокруг x и y осей, то предлагается расположить ячейки двумя слоями, в которых будут производиться тот или другой тип поворотов. Эти слои отличаются тем, что локальное магнитное поле на основных квантовых точках, которое создается с помощью постоянных магнитов нанометровых размеров, направлено для каждого слоя по разным диагоналям, образованным из ячеек квадратов.

Взаимодействие между двумя соседними ячейками, необходимое для выполнения двухкубитовых операций, включается в результате преобразования электронных волновых функций, вызванных переходом электронов с основных точек на более высокие свободные уровни энергии промежуточных вспомогательных точек. Этот переход осуществляется также с помощью соответствующих резонансных оптических импульсов. Декогерентизация состояний квантовых точек, находящихся в активном состоянии, определяется в рассматриваемой системе за счет декогерентизации состояний вспомогательной точки, которая однако имеет место только в сравнительно редкие периоды выполнения двухкубитовых операций, что *во много раз увеличивает* эффективное время декогерентизации кубитов. Вспомогательные точки необходимы также и для измерения конечных состояний.

Основные *преимущества* квантовых компьютеров на электронных спинах по сравнению с ЯМР квантовыми компьютерами состоят в следующем:

- 1) они способны работать при более высоких температурах, порядка температур жидкого гелия;
- 2) для них характерна гораздо бóльшая тактовая частота, порядка гигагерц;
- 3) для них характерна значительно бóльшая величина измеряемого сигнала;
- 4) при создании квантовых компьютеров на электронных спинах могут быть использованы многие достижения технологии мезоскопии-

ческих наноструктур и, в частности, технология соединений A_3B_5 , на которых *не могут быть в принципе* построены ЯМР квантовые компьютеры.

6.4.2. Квантовые точки с электронными спинами в электродинамическом резонаторе

Существенным недостатком рассмотренных выше подходов для реализации компьютеров на квантовых точках с электронными спиновыми состояниями является то, что благодаря локальному характеру обменных взаимодействий непосредственные двухкубитовые операции производятся только между соседними кубитами. Для этого квантовые точки должны располагаться на расстоянии не превышающем, как правило десятков нанометров.

В качестве одного из возможных способов осуществления быстрых двухкубитовых операций с *удаленными* друг о друга на большое расстояние (микроны) квантовыми точками, при котором практически полностью исключаются обменные спиновые взаимодействия, в работе [6.23] рассматривался вариант из системы кубитов на электронных спинах, помещенных в квантовый электродинамический (оптический) резонатор (cavity quantum electrodynamics, cavity-QED). Для создания когерентного взаимодействия между спинами удаленных квантовых точек предлагается использовать одновременное взаимодействие кубита с одной из мод этого резонатора и с внешним лазерным излучением.

В этом случае компьютер может представлять собой систему из легированных одним атомом квантовых точек, размещенных в полупроводниковом микродиске диаметром порядка 2 мкм и толщиной порядка 0,1 мкм, играющим роль электродинамического резонатора. Такой полупроводниковый резонатор, как показывает эксперимент, может иметь добротность, достигающую $Q \simeq 12000$. Предполагается, что квантовые точки располагаются в плоскости диска достаточно далеко друг от друга для того, чтобы гарантировать нахождение электронов в основном состоянии. Благодаря сильной локализации электронов в квантовых точках в направлении оси z , перпендикулярной плоскости диска, собственные состояния в валентной зоне в квантовых точках на соединениях A_3B_5 или A_2B_6 соответствуют состояниям $|m_z = \pm 1/2\rangle$ и $|m_z = \pm 3/2\rangle$. Квантовые точки легируются так, чтобы они имели полностью заполненную валентную зону и *один электрон* в зоне про-

водимости. Предполагается, что однородное магнитное поле приложено вдоль направления x -оси. Оно снимает спиновое вырождение состояния электрона в зоне проводимости. Состояниями кубитов являются $|m_x = \pm 1/2\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$ с соответствующими энергиями $\hbar\omega(\uparrow, \downarrow)$ (рис. 6.8).

Принципиальным отличием этого предложения от рассмотренных выше является использование в нем *полностью оптических* (all-optical) переходов, связывающих два спиновых состояния в зоне проводимости полупроводниковой квантовой точки, соответствующих двум состояниям кубита.

Ключевым элементом в предложенной схеме является комбинационная (рамановская) связь двух электронных спиновых собственных состояний квантовой точки, создаваемая сильными локально действующим лазерным полем и отдельной слабо затухающей модой микрорезонатора. Это позволяет достигнуть одновременно как очень больших времен спиновой декогерентизации для электронных спинов, так и обеспечить выполнение быстрых оптических двухкубитовых операций с сильно удаленными кубитами. Предлагаемая схема не требует, чтобы все квантовые точки были одинаковы по размерам, от которых зависит значение их g -фактора.

Однокубитовые операции осуществляются приложением двух лазерных полей $E_{L,x}(t)$ и $E_{L,y}(t)$, поляризованных вдоль осей x и y , с частотами Раби $\Omega_{L,x}$ и $\Omega_{L,y}$ и частотами $\omega_{L,x}$ и $\omega_{L,y}$, которые удовлетворяют условиям рамановского резонанса между состояниями $|-1/2\rangle = |\downarrow\rangle$ и $|1/2\rangle = |\uparrow\rangle$. Для моды резонатора, поляризованной по оси x и лазерного излучения, поляризованного по оси y это условие имеет вид (рис. 6.8):

$$\Delta\omega(\uparrow) = \omega(\uparrow) - \omega_v - \omega_{\text{cav}} = \Delta\omega(\downarrow) = \omega(\downarrow) - \omega_v - \omega_L, \quad (6.28)$$

где $\hbar\omega_v$ — энергия положения края валентного состояния $|m_z = \pm 3/2\rangle$ (слабо зависит от магнитного поля), $\hbar\omega_{\text{cav}}$ — энергия кванта моды резонатора.

Длительность лазерных импульсов для однокубитовых операций должна удовлетворять условию π/r -импульса, где r — любое целое число. Выполнение двухкубитовых операций типа CNOT обеспечивается взаимодействием между контролирующим и контролируемым кубитами через поле, создаваемое модой микрорезонатора, выполняющим роль линии связи между кубитами. Эффективный гамильтониан, описывающий эффективное двухфотонное взаимодействие между кубита-

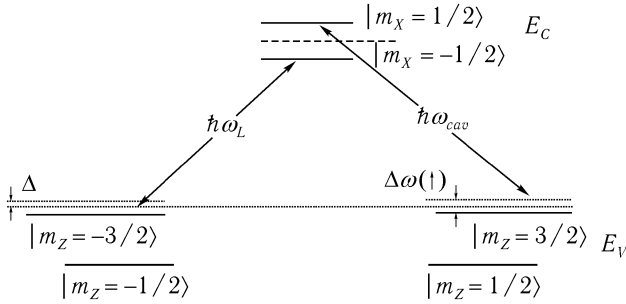


Рис. 6.8. Схема рамановских переходов под действием лазерного излучения с частотой $\hbar\omega_L$ (поляризовано по оси y) и поля одномодового резонатора с энергией $\hbar\omega_{cav}$ (поляризовано по оси x).

ми i -й и j -й удаленных друг от друга квантовых точек во вращающейся системе координат, может быть выражен через операторы Паули в виде [6.23]:

$$\hat{H}_{i,j} = \frac{\hbar g_{i,j}(t)}{2} [\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z], \quad (6.29)$$

где

$$g_{i,j}(t) \approx g_{cav}^2 \Omega_i^{Ly}(t) \Omega_j^{Ly}(t) / (\Delta \cdot \Delta\omega^2(\uparrow)), \quad (6.30)$$

$\Delta = \omega(\uparrow) - \omega(\downarrow) - \omega_{cav} + \omega_L \ll \omega(\uparrow, \downarrow)$, $\omega(\uparrow) - \omega(\downarrow) \gg kT/\hbar$, g_{cav} — постоянная взаимодействия электронного состояния с резонансной модой резонатора.

Если принять, что $\hbar\Omega_{L,x}$, $\hbar\Omega_{L,y} \simeq 1$ мэВ, $\hbar\Delta\omega(\downarrow, \uparrow) \simeq 5$ мэВ, время выполнения однокубитовых операций составляет 10 пс. Принимая $g_{cav} \simeq \hbar\Delta \simeq 0,5$ мэВ, будем иметь для времени выполнения двухкубитовой операции типа контролируемого изменения фазы ~ 100 пс.

Время спиновой декогерентизации для электронов проводимости в идеальной структуре квантовой точки на основе GaAs в структуре $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ составляет порядка 1 мкс, что больше времени выполнения квантовых операций. Реально оно значительно меньше. Основным ограничением для предлагаемой схемы является относительно быстрое затухание фотонов резонансной моды. Влияние затухания может быть, однако, ослаблено путем существенного улучшения добротности резонатора или использования схем адиабатически медленного прохождения.

Для измерения состояний кубитов в варианте с электродинамическим резонатором могут быть также использованы полностью оптические методы на основе двухфотонных (поляризованного лазерного излучения и поля резонатора) процессов, разрешения которых порядка микрона (размеры зауженных на концах оптоволоконных зондов) достаточно для индивидуального обращения к отдельным кубитам.

Другое применение оптического резонатора для твердотельных квантовых компьютеров предлагается в [6.24]. Небольшой объем кристалла, содержащий много примесных атомов, играющих роль квантовых точек, помещается в оптический резонатор с большой частотой Раби. Предполагается, что примесные атомы находятся в индивидуальном окружении, и поэтому имеют определенный разброс значений резонансных частот для оптических переходов в возбужденное состояние. В результате весь кристалл характеризуется неоднородным спектром поглощения, ширина которого во много раз больше одинаковой для всех атомов однородной ширины оптически разрешаемой линии, определяемой радиационным затуханием возбужденного состояния. Число оптически разрешаемых линий зависит от отношения неоднородной ширины к ширине индивидуального резонанса. При насыщении индивидуального резонанса в неоднородно уширенном спектре поглощения происходит образование провалов, называемое *«выжиганием дырок»* (holeburning). При числе примесных атомов в рассматриваемом объеме, меньшем, чем число оптически разрешаемых линий, выжигание отдельной дырки в спектре будет соответствовать индивидуальному обращению к отдельному атому.

При достаточно низкой плотности примесных атомов непосредственное взаимодействие между ними практически отсутствует, но можно осуществить косвенное взаимодействие посредством когерентного поля резонатора, играющего, как и в предыдущем случае, роль квантовой линии связи, по которой атомы обмениваются оптической когерентностью. Однако поскольку состояниями кубитов являются *спиновые состояния*, то оптическая когерентность должна при этом преобразовываться в спиновую когерентность.

В [6.24] рассматривается случай, когда отдельные атомы могут совершать Λ -образные оптические переходы, которые в простейшем случае соответствуют связи *двух невырожденных основных спиновых состояний* с одним оптически возбужденным состоянием (рис. 6.9).

Индивидуальное обращение к кубиту представляется как выжигание соответствующей дырки в спектре поглощения, обусловленное насыщением Λ -образных оптических переходов. Два атома с заданным спиновым расщеплением уровней основного состояния одинаковой разностью частот $\omega_L^{(1)} - \omega_{cav} = \omega_{cav} - \omega_L^{(2)}$ (рис. 6.9) будут связаны между собой при настройке на двойной резонанс частоты резонатора ω_{cav} и частот связывающих лазерных полей $\omega_L^{(1,2)}$. Квантовая линия связи, посредством которой передается спиновая когерентность между атомами обеспечивается двухфотонными процессами возбуждения в каждом из атомов. Рассмотренная схема позволяет производить двухкубитовые операции и организовать обмен информацией в достаточно большой совокупности удаленных друг от друга на микронные расстояния атомов.

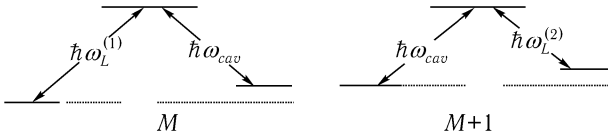


Рис. 6.9. Схема Λ -образных оптических переходов для атомов M и $M + 1$ с одинаковой разностью частот, определяемой спиновым расщеплением уровней основного состояния.

Для осуществления предложенной схемы предлагается использовать ансамбль спектрально разрешаемых атомов в среде, допускающих *выжигание дырок* в спектре поглощения. Существуют различные среды, допускающие большое число выжигаемых дырок, включая и структуры из квантовых точек. В качестве примера такой среды в [6.24] был рассмотрен алмаз с центрами окраски типа азот-вакансия (NV-diamond), имеющими сверхтонкое расщепление основных уровней в магнитном поле. В алмазе время релаксации для ядерных спинов T_2 около 0,1 мс. Его можно увеличить очищая алмаз от изотопа ^{13}C . Более существенным является декогерентизация, определяемая потерями в резонаторе. Как показали сделанные в [6.24] оценки, в алмазном диске толщиной 10 мкм можно разместить до 300 связанных кубитов, приходящих на область пятна лазерного луча и производить параллельно около 100 квантовых операций, что соответствует почти $4 \cdot 10^4$ операциям за время декогерентизации.

6.5. Квантовые компьютеры на квантовых точках с несколькими электронными и одним ядерным спином

Вариант квантового компьютера на квантовых точках, содержащих несколько электронов, с которыми взаимодействует один ядерный спин, был предложен в [6.25, 6.26]. Была рассмотрена обычная квазидвумерная квантовая точка (то есть в форме тонкой лепешки), но имеющая в отличие от рассматриваемых выше квантовых точек *два электрона*. Она может быть сформирована в бесспиновом кремнии ^{28}Si . В ее центре помещается примесный атом изотопа ^{13}C (или ^{29}Si) с ядерным спином $1/2$. Поскольку атомы кремния и углерода имеют одинаковое число электронов, примесные атомы такого типа не создают никакого дополнительного электрического поля и поэтому электронная структура квантовой точки не искажается из-за присутствия примесного атома. Пусть внешнее магнитное поле приложено перпендикулярно поверхности квантовой точки. Продольный удерживающий потенциал электрона с эффективной массой m^* в такой квазидвумерной квантовой точке в хорошем приближении описывается параболической зависимостью вида $m^*\omega_0^2 r^2/2$. Энергия отталкивания между электронами для простоты вычислений в [6.26] моделируется выражением αr^{-2} . Предполагается, что туннелирование электронов между квантовыми точками отсутствует. В приближении эффективной массы гамильтониан системы определяется выражением:

$$\hat{H} = \hat{H}_{2e} + C \sum_{\nu=1}^2 \widehat{\mathbf{I}}_{\nu} \delta(\mathbf{r}_{\nu}) - \gamma_n \widehat{B} \widehat{I}_z + \gamma_e \sum_{\nu=1}^2 B \widehat{S}_{\nu,z}, \quad (6.31)$$

где C — постоянная сверхтонкого электрон-ядерного взаимодействия

$$C = \frac{8\pi}{3} \gamma_e \gamma_n \hbar^2 |\Psi(z=0)|^2 \quad (6.32)$$

со значением одноэлектронной волновой функции в плоскости квантовой точки $\Psi(z=0)$, \mathbf{r}_{ν} — вектор в xy -плоскости, $\gamma_e = 2\mu_B/\hbar$, $\gamma_n = g_N \mu_N/\hbar$ — электронные и ядерные гиромангнитные отношения, $\widehat{\mathbf{I}}$ и $\widehat{\mathbf{S}}_{\nu}$ — спиновые операторы ядра и ν -го электрона. Первое слагаемое в (6.30) расщепляется на две коммутирующие между собой части, описывающие движение центра масс двух электронов и их относительное движение.

Двухэлектронная система рассматривается в своем орбитальном состоянии, соответствующем нижним уровням Ландау для движения центра масс $N = 0$ и относительного движения $n = 0$ электронов и квантовым числом момента импульса движения центра масс $M = 0$. Это состояние характеризуется квантовым числом момента импульса для относительного движения электронов m , определяющим орбитальную симметрию электронного состояния. При наличии магнитного поля все нижние уровни имеют $n = 0$, $m < 0$. Величина m увеличивается скачкообразно с увеличением магнитного поля B . Конкретное его значение зависит от электронного спинового состояния, поскольку полная волновая функция двух электронов всегда антисимметрична. Полное спиновое собственное состояние имеет вид $|I_z; S, S_z\rangle_m$, где S и S_z представляют квантовые числа полного спина и z -составляющую полного спина электронов. Значения $S = 0, 1$ определяют, соответственно, синглетное (антисимметричное) и триплетное (симметричное) состояния. При $S = 1$ квантовые числа m имеют только нечетные, а для $S = 0$ — только четные значения. Эффективный спиновый гамильтониан принимает вид [6.26]:

$$\hat{H}_S = A(m) \left[(\hat{I}_+ \hat{S}_- + \hat{I}_- \hat{S}_+) + 2\hat{I}_z \hat{S}_z \right] - \gamma_n \hbar B \hat{I}_z + \gamma_e \hbar B \hat{S}_z, \quad (6.33)$$

где $A(m) = C \cdot \Delta(m)/2$ — зависящая от поля и квантового числа m эффективная постоянная сверхтонкого взаимодействия,

$$\Delta(m) = \frac{1}{\pi l^2 2^{1+\mu_m}}, \quad (6.34)$$

$l = \sqrt{\hbar/m^* \omega_0}$ — эффективная магнитная длина, $\omega = \sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2}$ — эффективная частота, $\omega_c = qB/m^*$ — циклотронная частота, $\mu_m = \sqrt{m^2 + \alpha/l_0^2 \hbar \omega_0}$, $l_0 = \sqrt{\hbar/m^* \omega_0}$. Скачкообразные свойства параметра m приводят к скачкам и постоянной сверхтонкого взаимодействия $A(m)$.

Электроны в синглетном состоянии $S = 0$ (m — четное) не взаимодействуют с ядрами. В этом случае ядерная резонансная частота определяется частотой ЯМР сигнала для нелегированной квантовой точки $\omega_{\text{ЯМР},0} = \gamma_n B$. Для триплетного электронного состояния ЯМР-сигнал соответствует переходам, при которых состояния электронного спина не изменяются под действием возбуждающих радиочастотных импульсов, но которые вызывают переворачивание ядерного спина. Это

имеет место для перехода между состояниями $| -1/2; 1, -1 \rangle$ и $|\Psi\rangle = c_1|1/2; 1, -1\rangle + c_2| -1/2; 1, 0\rangle$. Диагонализация гамильтониана (6.32) позволяет определить коэффициенты c_1 и c_2 и найти значение частоты ЯМР, определяемой выражением [6.25]:

$$\begin{aligned} \hbar\omega_{\text{ЯМР}} = & \frac{3A(m)}{2} + \frac{(\gamma_n - \gamma_e)\hbar B}{2} + \\ & + \frac{1}{2} [[A(m) + (\gamma_n + \gamma_e)\hbar B]^2 + 8A^2(m)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Частота ядерного резонанса выражается через зависящую от поля и квантового числа m эффективную постоянную сверхтонкого взаимодействия. Так как $\gamma_e \gg \gamma$, то $\hbar\omega_{\text{ЯМР}} = \gamma_n \hbar B + 2A(m)$.

Величина эффективного сверхтонкого взаимодействия уменьшается с увеличением поля B благодаря увеличению протяженности волновой функции для относительного движения электронов с увеличением значения m , то есть когда электронная плотность в центре квантовой точки уменьшается. Таким образом, в рассматриваемом случае магнитное поле B является хорошим контролирующим параметром для эффективного электрон-ядерного взаимодействия. В частности $\Delta(m)$ испытывает резкое изменение при «магическом числе» $\omega_c/\omega_0 \approx 2, 1$, где электронное основное состояние переходит из триплетного состояния с $|m| = 1$ в другое триплетное с $|m| = 3$.

Для типичной квантовой точки диаметром 30 нм и потенциалом продольного удержания с параметром $\hbar\omega_0 = 5, 4$ мэВ при температурах $T < 1$ К синглет-триплетные переходы $(|m|, S) = (0, 0) \Rightarrow (1, 1)$ возможны при $B \approx 1, 3$ Тл, а триплет-триплетные переходы $(1, 1) \Rightarrow (3, 1)$ при $B \approx 6, 4$ Тл. Относительное изменение частоты ЯМР в зависимости от отношения частот ω_c/ω_0 также испытывает резкие скачки. Это позволяет путем изменения магнитного поля быстро настраиваться в резонанс с радиочастотным импульсом *без использования электрических затворов* в окрестности каждого кубита. Облучение инфракрасным излучением приводит к заметному сдвигу резонансной частоты и, тем самым, открывает еще одну возможность *полного оптического контроля* за ядерными кубитами.

Однокубитовые операции могут выполняться путем поворота ядерного спина с помощью включения соответствующего резонансного радиочастотного импульса. В кремниевых наноструктурах время спин-решеточной релаксации T_1 при $T < 4$ К и $B < 1$ Тл составляет 1–10 ча-

сов. Время спин-спиновой релаксации T_2 для ядер ^{31}P в изотопически чистом ^{28}Si более 0,5 мс, в случае электрически нейтральных примесных атомов оно должно быть значительно больше. Для выполнения двухкубитовых операций, как обычно, необходимо иметь взаимодействие между кубитами, оно определяется электрон-электронными взаимодействиями между квантовыми точками и влиянием электронов и ядерных спинов соседних квантовых точек. В результате возникает дополнительная зависимость магических чисел ω_c/ω_0 от внешнего поля B , что может быть использовано для селективного переключения квантовых точек. Так, в случае CNOT операции благодаря этому контролируемый ядерный спин зависит от состояния контролирующего спина. Двухкубитовые операции могут также осуществляться с помощью воздействия инфракрасным излучением.

Так как значение разности энергий между возбужденным и основными синглетным и триплетным состояниями $\Delta E \sim 0,3 \text{ мэВ}$, то для времени выполнения отдельной квантовой операции τ_g получим ограничение

$$\tau_g \gg \hbar/\Delta E > 1 \text{ пс.} \quad (6.36)$$

При τ_g более 0,1 нс высшими возбужденными состояниями квантовых точек можно пренебречь и рассматривать квантовые операции как *адиабатические*. Число элементарных операций, которые могут быть в принципе выполнены на одном ядерном кубите за время его декогерентизации $T_D/\tau_g \approx 10^9$. Этого вполне достаточно для того, чтобы удовлетворить критерию для схем помехоустойчивых квантовых вычислений. Процесс измерения сигнала с помощью оптических методов ЯМР может происходить с достаточной скоростью.

Квантовые точки могут содержать и более двух электронов. Более того, они могут быть разных размеров, то есть система квантовых точек может быть нерегулярной и тогда может быть использован ансамблевый метод обращения к кубитам. Это еще одно преимущество предложенного варианта. Наконец, большим преимуществом является электростатически нейтральный характер примесных атомов и то, что окружающие ядра кремния не имеют ядерных спинов. Ядерный спин примесного атома в этом случае хорошо изолирован от окружения и имеет много большее время декогерентизации по сравнению с ядрами заряженных доноров в модели Кейна.

Для индивидуального управления отдельным ядерным спином можно использовать переходы при магических числах, определяемых значениями распределенного по системе из квантовых точек магнитного поля. Локальное значение сверхтонкого взаимодействия в каждой квантовой точке может быть обеспечено путем настройки на такие переходы с магическими числами. Возможность контроля локальных значений сверхтонкого взаимодействия с помощью распределенного магнитного поля может быть использована как для *индивидуальных* операций с отдельными ядерными спинами, так и в *твердом ансамбле* эквиваленте жидкостного ЯМР квантового компьютера для структуры из идентичных или неидентичных квантовых точек.

Оптическая спектроскопия квантовых точек обнаружила у них богатую тонкую структуру. Было найдено, что с увеличением интенсивности возбуждения появляющиеся новые пики в спектре вытесняют первоначальные линии даже высокой интенсивности. Эта оптическая нелинейность в конечном счете обусловлена общим усилением кулоновских корреляций и, в частности, экситон-экситонными взаимодействиями. В сообщении [6.27] на примере модели квантовой точки с коррелированными электрон-дырочными (экситонными) состояниями показано, что такие оптические нелинейности в полупроводниковых квантовых точках могут быть успешно использованы для выполнения элементарных квантовых операций. Отдельные экситонные состояния в квантовых точках можно отождествить с квантовыми состояниями кубитов, а в области биэкситонного резонанса естественным образом могут осуществляться когерентные двухкубитовые операции, такие как операции CNOT. Типичное время дефазировки (декогерентизации) оптических возбуждений в полупроводниковых квантовых точках оценивается в ≈ 40 пс. Таким образом, операции с квантовыми состояниями на экситонах в квантовых точках должны осуществляться с помощью методов ультраскоростной импульсной оптической спектроскопии. Длительность лазерных импульсов, соответствующих резонансным переходам в рассматриваемой модели с энергией порядка 20 мэВ значительно меньше $\approx 0,25$ пс, что позволило бы выполнить значительное число операций за время декогерентизации.

Основным преимуществом предложенной схемы является то, что квантовые операции выполняются исключительно ультракороткими лазерными импульсами без использования других внешних полей, которые вносят дополнительные временные задержки и декогерентизацию.

Экситоны квантовых точек являются хорошими кандидатами для надежного приготовления запутанных состояний в твердотельных структурах. В [6.26, 6.28] показано, что оптически контролируемое взаимодействие между пространственно разделенными экситонами, обусловленное резонансным переносом экситонов, может быть использовано для создания максимально запутанных состояний, таких как состояния Белла и Гринбергера–Хорна–Цейлингера (GHZ) (см. раздел 2.2.3) из соответствующих инициализированных состояний, а также для демонстрации явления телепортации. Экспериментальное подтверждение важной роли резонансного переноса энергии между квантовыми объектами было получено в некоторых биологических и органических системах. Этот процесс (он обычно называется процессом Фёстера (Föster)) не требует физического переноса электронов и дырок, а только их энергии и поэтому оказывается нечувствительным к примесям, которые находятся между квантовыми точками. Для образования состояния Белла в квантовых точках на ZnSe с энергетической щелью 2,8 эВ, как показывают оценки [6.26], потребуется длительность лазерного импульса в фемтосекундном диапазоне.

Литература

- [6.1] *Goldhaber–Gordon D. J., Montemerlo M. S., Love J. C., Opiteck G. J., Ellenbogen J. C.* Overview of Nanoelectronic Devices // Proc. IEEE, 1997, v. 85, № 4, pp. 521–540.
- [6.2] *Lent C. C., Tougaw P. D.* A Device Architecture for Computing with Quantum Dots // Proc. IEEE., 1997, v. 85, № 4, pp. 542–557.
- [6.3] *Korotkov A. N.* Wireless Single-Electron Logic Based by Alternating Electric Field // Appl. Phys. Lett., 1995, v. 67, pp. 2412–2414.
- [6.4] *Ugajin R.* Mott Metal-Insulator Transition Driven by an External Field in Coupled Quantum Dot Arrays and Its Application to Field Effect Devices // Jour. Appl. Phys., 1994, v. 76, № 5, pp. 2932–2836.
- [6.5] *Ugajin R.* Correlated Electrons in Coupled Quantum Dots and Related Phenomena. // Physica, 1997, v. E1, pp. 226–231.
- [6.6] *Bandyopadhyay S., Das B., Miller A. E.* Supercomputing with Spin-Polarized Single Electrons in a Quantum Coupled Architecture. // Nanotechnol., 1994. v. 5, pp. 113–133.
- [6.7] *Molotkov S. N., Nazin S. S.* Single-Electron Computing: Quantum Dot Logic Gates // ЖЭТФ, 1996, т. 110, вып. 4(10), с. 1439–1452.

- [6.8] *Tanamoto T.* Quantum Computation by Coupled Quantum Dot System and Controlled NOT Operation // 1999, LANL, E-print quant-ph/9902031, 12 p.
- [6.9] *Боголюбов Н. Н.* Лекції з квантової статистики. — Київ, Радян. школа, 1949, 228 с. / *Боголюбов Н. Н.* Лекции по квантовой статистике. в кн. «Избранные труды», т. 1. — Киев: Наукова Думка, 1970, с. 288–485.
- [6.10] *Tanamoto T.* Quantum Gates by Coupled Quantum Dots and Measurement Procedure in Si MOSFET // 1999, LANL, E-print quantphys/9908021, p. 5.
- [6.11] *Zanardi P., Rossi F.* Quantum Information in Semiconductor Noiseless Encoding in a Quantum-Dot Array // Phys. Rev. Lett., 1998, v. 81, pp. 4752.
- [6.12] *Sze S. M.* Physics of Semiconductor Devices. — N.Y., John Wiley & Sons, 1981. / *Зу С.* Физика полупроводниковых приборов, кн. 1 и 2. / Перевод с англ. под ред. Р. А. Сурица. — М.: Мир, 1984, 454+454 с.
- [6.13] *Sanders G. D., Kim K. W., Holton W. C.* An Optically Driven Quantum Dot Quantum Computer // 1999, LANL, E-print quant-ph/9909070, 11 p.
- [6.14] *Openov L. A.* Resonant Electron Transfer between Quantum Dots // Phys. Rev., 1999, v. B60, № 12, pp. 8798–8803.
- [6.15] *Oh J. H., Ahn D., Hwang S. W.* Optically Driven Qubits in Artificial Molecules // 2000, LANL, E-print, arXiv: quant-ph/0005057, 15 p.
- [6.16] *Fedichkin L., Yanchenko M., Valiev K. A.* Novel Coherent Quantum Bit Using Spatial Quantization Levels in Semiconductor Quantum Dot // Квантовые компьютеры & квантовые вычисления (Quantum Computers & Computing), 2000, т. 1, № 1, pp. 58–76.
- [6.17] *Loss D., DiVincenzo D.* Quantum Computation with Quantum Dots // Phys. Rev., 1998, v. A57, № 1, pp. 120–126.
- [6.18] *Burkard G., Loss D., DiVincenzo D.* Coupled Quantum Dots as Quantum Gates // Phys. Rev., 1999, v. B59, pp. 2070.
- [6.19] *Vrijen R., Yablonovich E., Wang K., Hong Wen Jiang, Balandin A., DiVincenzo D.* Electron Spin Resonance Transistors for Quantum Computing in Silicon-Germanium Heterostructures // 1999, LANL, E-print, quant-ph/9905096, 9 p.
- [6.20] *DiVincenzo D., Burkard G., Loss D., Sukhorukov E. V.* Quantum Computation and Spin Electronics // 1999, LANL, E-print, cond-mat/9911245, 28 p.

-
- [6.21] *Wiseman H. M., Utami D. W., Sun H. B., Milburn G. J., Kane B. E., Dzurak A., Clark R. G.* Quantum Measurement of Coherence in Coupled Quantum Dots // 2000, LANL, E-print, arXiv: quant-ph/0002279, 19 p.
- [6.22] *Ohshima T.* All Optical Cellular Quantum Computer Having Ancilla Bits for Operations in Each Cell // 2000, LANL, E-print, arXiv: quant-ph/0002004, 9 p.
- [6.23] *Imamoglu A., Fuchs D., Burkard G., DiVincenzo D. P., Loss D., Sherwin M., Small A.* Quantum Information Processing Using Electron Spin and Cavity-QED // 1999, LANL, E-print, quant-ph/9904096, 6 p.
- [6.24] *Shahriar M. S., Hemmer P. R., Lloyd S., Dowers J. A., Craig A. E.* Solid State Quantum Computing Using Spectral Holes // 2000, LANL, E-print, arXiv: quant-ph/0007014, 13 p.
- [6.25] *Reina L. H., Quiroga L., Johnson N. F.* An NMR-based Nanostructure Switch for Quantum Logic // Phys. Rev., 2000, v. B62, pp. 2267–2269.
- [6.26] *Reina L. H., Quiroga L., Johnson N. F.* Quantum Information Processing in Semiconductor Nanostructures // 2000, LANL, E-print, arXiv:quant-ph/0009035, 27 p.
- [6.27] *Troiani F., Hohenester U., Molinari E.* Exploiting Exciton-Exciton Interactions in Semiconductor Quantum Dots for Quantum-Information Processing // 2000, LANL, E-print, arXiv: quant-ph/0005064, 4 p.
- [6.28] *Quiroga L., Johnson N. F.* Entangled Bell and GHZ States of Excitons in Coupled Quantum Dots // Phys. Rev. Lett. 1999, v. 83, pp. 2270.

ГЛАВА 7

КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ НА СВЕРХПРОВОДНИКОВЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

*«Лучшим каждому кажется то, к чему
он имеет охоту.»*

Козьма Прутков

7.1. Основные типы сверхпроводниковых кубитов

Сверхпроводящее состояние является макроскопическим квантовым состоянием, аналогичным чистым квантовым состояниям в простейших квантовых системах. Качественное отличие сверхпроводников состоит в том, что в этом состоянии образуется бозе-конденсат из макроскопически большого числа куперовских пар электронов.

Обращение к сверхпроводниковым элементам с целью использования их в качестве кубитов связано, главным образом, с надеждой на то, что в этом случае удастся исключить использование таких сложных и громоздких вспомогательных устройств, как лазеры, СВЧ-генераторы, мощные магниты и т. п., и создать квантовый компьютер, управляемый только электрическими импульсами. Кроме того, проявление квантовых свойств в сверхпроводниковых устройствах макроскопических размеров делает их привлекательными и с точки зрения создания масштабируемых квантовых схем: режим когерентной квантовой динамики в них может быть достигнут уже на макроскопических элементах микрометровых масштабов, не требующих для своего изготовления высокоточной нанотехнологии. Это позволило бы уже при современном уровне развития технологии создавать *сверхпроводниковые интегральные схемы высокой степени интеграции*, подобные полупроводниковым интегральным схемам и дало бы сверхпроводниковым квантовым элементам существенные преимущества при создании полномасштабных квантовых компьютеров по сравнению с любыми другими вариантами.

7.1.1. Кубиты на зарядовых состояниях куперовских пар в сверхпроводниковых островках

Квантовая динамика сверхпроводниковых устройств определяется не коммутирующими между собой сопряженными величинами — фазой макроскопической волновой функции θ и оператором числа куперовских пар в конденсате $n = -i \frac{\partial}{\partial \theta}$ ($[\theta, n] = i$), которые не могут контролироваться одновременно. Отсюда следуют два различных режима управления и наблюдения этой динамики: либо *фазовый*, либо *зарядовый*.

Были предложены два различных типа устройств с использованием физических явлений в сверхпроводниках для создания кубитов и организации квантовых вычислений. Их детальный анализ был выполнен в [7.1, 7.2].

В одном из них в качестве двух состояний кубита предлагается использовать два различных зарядовых состояния *куперовских* пар в сверхпроводниковых островках нанометрового масштаба (superconducting island, single-Cooper-pair box), связанных с внешней схемой *переходами Джозефсона* (B. Josephson) малой емкости. Такая схема была рассмотрена Д. Авериным [7.3] и группой авторов в работе [7.4]. Затем она развивалась в [7.5–7.7]. О первой экспериментальной попытке реализации сверхпроводникового кубита на сверхпроводниковом островке сообщалось в работе [7.8].

Схема простейшего варианта идеального сверхпроводникового кубита изображена на рис. 7.1 [7.5]. Кубит состоит из маленького сверхпроводящего островка (n), связанного со сверхпроводящим электродом L (или другим островком) туннельным переходом, характеризуемого емкостью C_J и джозефсоновской энергией связи E_J . Внешнее напряжение V воздействует на систему через емкость затвора C .

Сверхпроводниковый островок с переходом Джозефсона является искусственной твердотельной структурой, обладающей макроскопическими квантовыми свойствами. К основным свойствам, используемым для создания сверхпроводникового кубита, относятся следующие:

- 1) Макроскопическое число электронов в островке (этим он отличается от одноэлектронной квантовой точки) при температурах ниже некоторой температуры, которая для достаточно малых островков может быть *на порядок меньше* температуры сверхпроводящего перехода [7.5], образует куперовские пары. Иначе говоря, электроны конденсируются

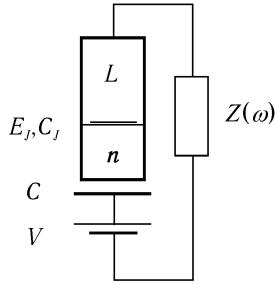


Рис. 7.1. Схема идеального сверхпроводникового кубита на зарядовых состояниях куперовских пар, $Z(\omega)$ — импеданс внешней цепи.

в одно сверхпроводящее макроскопическое квантовое основное состояние $|n\rangle$, характеризующееся числом куперовских пар n . Это состояние отделено от состояний с неспаренными квазичастицами сверхпроводящей энергетической щелью Δ .

2) Если изменение кулоновской энергии островка при увеличении числа куперовских пар электронов на единицу $E_C = (2q)^2/2(C + C_J)$, то единственными возбуждениями с низкой энергией являются переходы между различными состояниями $|n\rangle$, которые происходят благодаря *туннелированию куперовских пар* через джозефсоновский переход.

3) Если, помимо того, энергия E_C больше как тепловой энергии kT , так и джозефсоновской энергии связи двух сверхпроводников $E_J = 2\pi\Delta\hbar/(4q^2R)$ [7.9], где R — сопротивление туннельного перехода в нормальном состоянии, происходит существенное подавление больших флуктуаций числа n (так называемая кулоновская блокада). Таким образом, если учитывать только два состояния с малой энергией, отличающихся на *одну куперовскую пару*, то рассматриваемая система будет представлять собой *эффективный квантовый элемент — кубит*.

4) Электростатическая часть гамильтониана кубита, равная $E_C(n - Q_t/2q)^2$, зависит от дискретно изменяющегося заряда куперовских пар $2qn$ и непрерывно изменяющегося заряда, индуцированного затвором $Q_t = CV$. Разность энергий двух зарядовых состояний такого кубита может контролироваться с помощью напряжения на затворе V . В частности, электростатические энергии для базисных состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$, отличающихся одной лишней куперовской парой, с изменением заряда Q_t на сверхпроводящем островке пересекаются (оказываются

вырожденными) при $Q_t/q = 1$. Полный гамильтониан кубита с учетом джозефсоновской энергии связи имеет вид:

$$\hat{H} = E_C(n - Q_t/2q)^2 - E_J \cos \theta, \quad (7.1)$$

где θ — фазовая переменная, сопряженная с числом куперовских пар n . Джозефсоновская связь описывает переход куперовской пары между двумя состояниями кубита $|n\rangle \rightarrow |n+1\rangle$ с отличным от нуля матричным элементом $\langle n+1 | \exp i\theta | n \rangle = 1$. Таким образом, система соответствует двухуровневой квантовой модели, псевдоспиновый гамильтониан которой, пользуясь матрицами Паули $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, можно представить в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2} E_C(1 - 2Q_t/q + 2(Q_t/q)^2) + \frac{1}{2} E_C(1 - Q_t/q)\sigma_z - \frac{1}{2} E_J \sigma_x. \quad (7.2)$$

В этом случае зарядовые состояния с $n = 0$ и $n = 1$ соответствуют базисным состояниям псевдоспина $|\downarrow\rangle \equiv |0\rangle$ и $|\uparrow\rangle \equiv |1\rangle$, соответственно, а энергия зарядки островка $E_C(1 - Q_t/q)$ играет роль внешнего поля, направленного по оси z , которое контролируется напряжением на затворе V . Джозефсоновская связь играет роль поперечной составляющей поля, аналогичную роли, которую играет амплитуда радиочастотного поля b в ЯМР при переходе во вращающуюся систему координат. Благодаря этой связи образуются два *антипересекающихся состояния*, уровни энергии которых отделены друг от друга на величину энергии расщепления, которая имеет вид

$$\Delta E(Q_t) = \sqrt{(E_C(1 - Q_t/q))^2 + E_J^2} = E_J / \sin \nu \quad (7.3)$$

и вырождение невозмущенных уровней при $Q_t/q = 1$ снимается. Роль резонансной частоты Раби играет величина E_J/\hbar .

Два квантовых состояния сверхпроводникового островка с джозефсоновским туннельным переходом, являющиеся собственными состояниями гамильтониана (7.2), описывают суперпозицию состояний $|n\rangle$ и $|n+1\rangle$. Они же являются логическими состояниями сверхпроводникового кубита. Изменяя с помощью напряжения на затворе величину Q_t , можно производить поворот состояния кубита в пространстве псевдоспиновых состояний $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, то есть осуществлять *однокубитовую операцию* во многом подобно тому, как это делается с ядерными и электронными спинами-кубитами.

Для выполнения двухкубитовых операций необходимо наличие взаимодействия между отдельными кубитами. Как предполагается организовать требуемое взаимодействие в системе кубитов на сверхпроводниковых островках и производить операцию типа CNOT, мы кратко обсудим в параграфе 7.2.

7.1.2. Кубиты на флюксоидных состояниях в сверхпроводящих квантовых интерференционных приборах

Другой вариант сверхпроводникового кубита основан на использовании квантования магнитного потока в *сверхпроводящих квантовых интерференционных приборах* (сквидах, SQUID) [7.1], представляющих собой в простейшем случае сверхпроводящее кольцо, прерванное туннельным *переходом Джозефсона*. Величина сверхпроводящего когерентного тока в кольце зависит от разности фаз на переходе Джозефсона, которая в свою очередь определяется величиной магнитного потока, проходящего через кольцо. Два состояния кубита в таком варианте представляют собой два способных интерферировать (образовывать квантовую суперпозицию) сверхпроводящих тока, соответствующих двум разным значениям разности фаз на переходе.

В этом случае гамильтониан (7.1) следует дополнить слагаемым, учитывающим энергию магнитного потока в сверхпроводящем кольце с индуктивностью L_l [7.2]:

$$\hat{H} = E_C(n - Q_t/2q)^2 - E_J \cos \theta + \frac{(\Phi_0/2\pi - \Phi)^2}{2L_l}, \quad (7.4)$$

где $\Phi_0 = \pi\hbar/q$ — квант магнитного потока, Φ — магнитный поток, создаваемый внешним магнитным полем. Здесь так же, как и в (7.1), не учтены механизмы релаксации и дефазировки (декогерентизации), определяемые взаимодействием системы со степенями свободы окружения.

Состояния такой системы, отличающиеся по фазе на 2π , называются флюксоидными (fluxoid) состояниями. Они хорошо различаются, но число n перестает быть целым. В сквиде оба электрода перехода Джозефсона являются частью одной и той же индуктивности, а заряд $2qn$ является поляризационным зарядом на электродах перехода, который может меняться непрерывно. Как следствие, внешний заряд Q_t может

быть экранирован зарядом, поступающим из петли. Поэтому он перестает играть роль в динамике перехода и может не учитываться. Тогда с учетом выражения $n = -i \frac{\partial}{\partial \theta}$ гамильтониан (7.4) преобразуется к виду, аналогичному виду гамильтониана для частицы с эффективной массой, обратно пропорциональной E_C , и с потенциальной энергией $U(\theta)$:

$$U(\theta) = -E_J \cos \theta + \frac{(\Phi_0 \theta / 2\pi - \Phi)^2}{2L_I}. \quad (7.5)$$

Основная схема кубита на флюксонидных состояниях аналогична схеме на зарядовых кубитах. Если внешний магнитный поток $\Phi = \Phi_0/2$ и $E_J = \Phi_0^2/2\pi^2 L_I$, то при $|\theta - \pi| \leq \pi$ потенциальная энергия сквида имеет два симметричных минимума при $\theta = \pi \pm \Delta\theta$, $\Delta\theta = 1,9$, разделенных потенциальным барьером высотой $\sim 0,4E_J$ с двумя вырожденными состояниями в них, соответствующих двум разным направлениям тока в кольце. Эти состояния отделены от возбужденных состояний энергией, соответствующей частоте колебаний эффективной частицы вблизи минимума $\hbar\omega_p \sim (E_J E_C)^{1/2}$. Если вероятность туннелирования через барьер мала, то при температурах $kT \ll \hbar\omega_p$ устройство со сквидом ведет себя как система с двумя базисными квантовыми состояниями, которые можно обозначить как $|1\rangle$ и $|0\rangle$ и, следовательно, оно может служить в качестве кубита. Разность энергий этих двух состояний определяется величиной отклонения внешнего магнитного потока от значения $\Phi_0/2$, то есть $\varepsilon = (\Phi - \Phi_0/2)\Delta\Phi/L$, а величина амплитуды туннелирования — величиной, модулированной дополнительным магнитным потоком джозефсоновской энергии связи E_J . Если скорость декогерентизации мала по сравнению со скоростью туннелирования, то благодаря туннелированию через барьер происходит раздвижка пересекающихся (вырожденных) при резонансе $\varepsilon = 0$ уровней квантовых состояний $|1\rangle$ и $|0\rangle$ с сохранением когерентности. Антипересекающиеся состояния, как и в случае рассмотренного выше зарядового кубита, будут представлять собой при $\varepsilon = 0$ симметричную и антисимметричную суперпозиции состояний $|1\rangle$ и $|0\rangle$, разделенных энергетической щелью Δ_c , определяемой амплитудой туннелирования через барьер (не джозефсоновского перехода!), создаваемый в этом случае максимумом потенциальной функции $U(\theta)$. При адиабатическом прохождении резонанса происходит непрерывный переход из одного состояния $|1\rangle$ в другое состояние $|0\rangle$, то есть выполняется простейшая однокубитовая

операция инверсии. Для наглядного представления адиабатической инверсии удобно снова использовать представление о псевдоспине и обратиться к методу адиабатического прохождения в ЯМР [7.11]. Несмотря на термин адиабатический переход, эта операция может происходить быстрее, чем за счет переходов типа Раби, скорость которых в рассматриваемом случае определяется частотой Δ_c/\hbar .

Квантовая когерентность флюксoidных состояний долгое время не наблюдалась и только сейчас появились сообщения об экспериментальном наблюдении интерференции или когерентной суперпозиции двух упомянутых выше состояний, соответствующих двум сверхпроводящим токам в кольце, текущих навстречу друг другу [7.10]. Для наблюдения этой интерференции потребовалась хорошая изоляция системы от внешнего шума. Эксперимент проводился при температуре 40 мК на скивде с двумя параллельными джозефсоновскими переходами со структурой Nb/Al_x/Nb, который был защищен от внешнего излучения экраном из PdAu. Переходы между минимумами происходили под действием импульсов СВЧ излучения частоты 96 ГГц и детектировались с помощью магнетометра. Параметры системы определялись экспериментально и были равны $L = 240$ пГн, $Z = L/C = 48$ Ом, $\beta = LE_J/\Phi_0^2 = 2,33$. Им соответствовали макроскопические квантовые состояния приблизительно 10^9 куперовских пар. Рабочие температуры (40 мК) были в 500 раз меньше температуры сверхпроводящего перехода, поэтому все микроскопические степени свободы были заморожены и только коллективные флюксoidные моды определяли динамику системы. Измеренное расщепление антипересекающихся уровней составляло по потоку более $14\Phi_0$, а по току 2–3 мкА. Для заданной геометрии (размеры петли порядка миллиметра) это соответствует макроскопическому магнитному моменту порядка $10^{10} \mu_B$.

7.1.3. Вариант кубита на переходах Джозефсона в высокотемпературных сверхпроводниках

В сообщении [7.12] был предложен и проанализирован вариант кубита на высокотемпературных сверхпроводниках типа YBa₂Cu₃O₇ (*d*-сверхпроводник), отличающийся от обычных сверхпроводников симметрией волновых функций спаривающихся электронов. Основная идея такого кубита состоит в использовании *d*-характера симметрии волновой функции сверхпроводящего макроскопического состояния. В этом

варианте кубит представляет собой структуру, состоящую из двух джозефсоновских переходов между обычными s -сверхпроводниками (S) и расположенным между ними d -сверхпроводником (D), образующих так называемый SDS -переход, включенный в интерференционную петлю скивда с малой индуктивностью, большой емкости C_{ext} и обычного (SS) джозефсоновского перехода.

Зависимость потенциальной энергии такой структуры от фазовой переменной θ имеет вид

$$U(\theta) = -(E_d \cos(2\theta) + E_s \cos \theta), \quad (7.6)$$

где E_d и E_s — энергии связи для SD - и SS -переходов. В отличие от случая обычного сверхпроводникового кубита она имеет два минимума при $\theta = 0, \pi$ и, соответственно, два квантовых состояния, способных образовывать суперпозиции. В обычном устройстве на скивде управление низколежащими квантовыми состояниями производится с помощью внешнего магнитного поля или тока в петле. В этом случае возникают дальние взаимодействия между различными скивдами, а также нежелательные взаимодействия с окружением. В предлагаемом в [7.12] варианте в зависимости от типа выполняемых квантовых операций с помощью ключей, выполненных на одноэлектронных транзисторах, производится подключение емкости C_{ext} параллельно SDS - и SS -переходам. При этом система остается изолированной от окружения, состояния кубита не имеют токов, а переключения производятся при минимальном контакте с окружением. Геометрия петли позволяет обеспечить выполнение функции бистабильного элемента, удовлетворяющего всем требованиям, предъявляемым для кубита. Кроме того, такая система обладает и свойствами, необходимыми для выполнения классических вычислительных операций на основе булевой логики. Основные преимущества такого кубита, по мнению авторов [7.12], состоят в следующем:

- 1) прежде всего, это естественный бистабильный элемент, не требующий для поддержания стационарного состояния внешнего питания или магнитных полей;

- 2) базисные состояния интерференционной петли с малой индуктивностью не зависят от тока в петле, а магнитный поток в ней постоянен и равен одному кванту Φ_0 , поэтому дальние взаимодействия с другими элементами компьютера исключены. Кубит оказывается максимально изолированным от окружения;

3) отсутствует механизм декогерентизации, связанный с накоплением различия фаз в исходном состоянии с течением времени;

4) все операции могут быть выполнены как простые обратимые процессы переключения при минимальном контакте с внешним миром.

7.2. Квантовый компьютер на сверхпроводниковых островах с переходами Джозефсона

Квантовый компьютер должен иметь регистр, состоящий из большого числа кубитов L , в котором пары кубитов связаны контролируемым образом. Более проработанными в настоящее время с этой точки зрения являются варианты на зарядовых кубитах. Так для этой цели, например в [7.5], предлагается подсоединить все L кубитов, типа представленных на рис. 7.1, параллельным образом к одной общей катушке индуктивности L_l . Если $L_l = 0$, такая система сводится к серии несвязанных кубитов. При конечном значении L_l в $L_l C$ -цепи возникает переменное напряжение с характерной частотой $\omega_{LC} = (LL_l C_t)^{-1/2}$, где $C_t^{-1} = C^{-1} + C_J^{-1}$, которое действует одновременно на все кубиты и таким образом магнитный поток в общей катушке индуктивности Φ оказывается связанным с фазой каждого i -го кубита θ_i . В результате связь между кубитами осуществляется в виде сдвига фазы в слагаемых, описывающих джозефсоновскую связь, определяемого колебаниями напряжения. Ситуация напоминает обычный SQUID за исключением того, что магнитный поток теперь является динамической переменной. Поскольку характеристическая частота осциллятора, описывающего колебания магнитного потока и заряда, велика по сравнению с характерными частотами изменения состояния кубитов $\omega_{LC} \gg \Delta E(Q_t)/\hbar$, то при вычислении энергии основного колебательного состояния можно воспользоваться адиабатическим приближением, рассматривая переменные θ_i как постоянные параметры. Это дает в гамильтониан слагаемое, описывающее взаимодействие между кубитами, которое имеет вид [7.5]

$$\hat{H}_{int} = -\frac{E_L}{2} \sum_{i < j} \sigma_{yi} \sigma_{yj}, \quad (7.7)$$

где $E_L = 2\pi^2(C_t^2 E_J^2 L_l / C_J^2 \Phi_0^2)$.

Это взаимодействие имеет место во все моменты времени. Его можно приближенно контролировать, настраиваясь на резонанс определенных кубитов. В случае когда $E_L \leq E_J$ и все кубиты имеют напряжения на затворах V_i , при которых они находятся вдали от резонанса (точки пересечения уровней), различные двухкубитовые состояния $|\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle$, разделены энергиями много большими, чем E_L и взаимодействие (7.7) оказывается очень слабым. Только кубиты, состояния которых в резонансе (уровни в отсутствии взаимодействия пересекаются $V_1 = V_2$), будут образовывать за счет этого взаимодействия двухкубитовые суперпозиции типа запутанных состояний $2^{-1/2}(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)$, разделенные энергией E_L .

Чтобы произвести двухкубитовую операцию, пара соответствующих кубитов путем быстрого включения импульса напряжения $V(t)$ приводятся на время Δt в резонанс, затем импульс выключается. В результате взаимодействия (7.7) осуществляется операция, соответствующая повороту только этих двух кубитов в субпространстве состояний $|\uparrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\uparrow\rangle$ на угол $= E_L \Delta t / 2$. Для выполнения операции CNOT может быть также использована разность в энергии двух состояний взаимодействующих контролирующего и контролируемого кубитов [7.3]. Если контролирующий кубит находится в состоянии $|1\rangle \equiv |\uparrow\rangle$, эта разность меньше, чем когда он находится в состоянии $|0\rangle \equiv |\downarrow\rangle$. Под действием импульса напряжения система адиабатически проходит точку вырождения, где $V_1 = V_2$ и имеет место раздвижка пересекающихся уровней, в результате два состояния контролируемого кубита инвертируются, то есть включается операция NOT. Если контролирующий кубит находится в состоянии $|0\rangle$, то импульс напряжения той же длительности не успеет привести контролирующий кубит к прохождению точки пересечения и его состояние не изменится, как это и требуется для выполнения операции CNOT. Альтернативный вариант выполнения однокубитовой и двухкубитовой операций рассматривался в [7.7].

Для приведенных выше характерных параметров имеет место следующая цепочка неравенств:

$$kT, E_L \ll E_J \ll E_C \ll \Delta. \quad (7.8)$$

Измерение состояния сверхпроводникового кубита предполагается выполнять с помощью одноэлектронного транзистора [7.2, 7.5, 7.6].

7.3. Диссипация и декогерентизация в сверхпроводниковых устройствах на обычных сверхпроводниках

Одним из основных источников диссипации и декогерентизации в сверхпроводниковых устройствах является шумовое напряжение внешних источников Джонсона–Найквиста, которое в случае частот $\omega \ll 1/RC_t$ полностью определяется сопротивлением цепи R (омическое окружение). Это сопротивление должно сравниваться с квантовым сопротивлением $R_K = 2\pi\hbar/q^2 \sim 25,8$ кОм. Кроме того, следует учесть, что связь напряжения с зарядом кубита пропорционально отношению $C/(C_J + C) = C_t/C_J \ll 1$. Поэтому параметр, определяющий влияние флуктуаций напряжения, имеет вид $(R/R_K)(C_t/C_J)^2$. При сопротивлении $R \sim 50$ Ом можно надеяться, что влияние этих шумов будет мало.

Оценки скорости диссипации энергии (затухания диагональных элементов матрицы плотности) Γ_{in} и скорости декогерентизации (затухания недиагональных элементов матрицы плотности) Γ_ϕ кубита, взаимодействующего с окружением, моделируемого системой бозонов, были выполнены в [7.5, 7.13]:

$$\Gamma_{in} = \sin^2 \nu 4\pi \frac{R}{R_K} \frac{C_t^2}{C_J^2} \frac{\Delta E}{\hbar} \operatorname{cth} \frac{\Delta E}{2kT}, \quad (7.9)$$

$$\Gamma_\phi = \frac{1}{2}\Gamma_{in} + \cos^2 \nu \cdot 8\pi \frac{R}{R_K} \frac{C_t^2}{C_J^2} \frac{kT}{\hbar}, \quad (7.10)$$

где параметр $\sin^2 \nu = (E_J/\Delta E)^2$ определяется выражением (7.3), в точке пересечения $\sin^2 \nu = 1$.

Декогерентизация начального квантового состояния сверхпроводникового кубита определяется двумя различными процессами: диссипативными переходами между логическими уровнями и флуктуациями разности энергии между уровнями. Первый процесс сохраняется и при низких температурах, второй — приводит к дополнительному вкладу в скорость декогерентизации, пропорциональному температуре при $E_J/\Delta E < 1$. При низких температурах $kT \ll E_J$ исходное состояние ($\sin^2 \nu \ll 1$) имеет большое время декогерентизации.

Заметим, что серьезным источником ошибок является также несовершенство контроля временных характеристик управляющих импульсов и значений энергий связи.

Приведем некоторые численные оценки для процессов декогерентизации [7.5, 7.13]:

1) для того чтобы уменьшить связь с окружением, емкость джозефсоновского перехода $C_J = 4 \cdot 10^{-16}$ Ф, соответствующей кулоновской энергии $E_C/k \sim 2$ К, выбирается меньшей, чем емкость затвора $C = 2,5 \cdot 10^{-18}$ Ф. Рабочая температура должна быть достаточно низкой для того, чтобы гарантировать начальную инициализацию состояния системы кубитов. Хорошим выбором будет $kT \sim E_J/2$, поскольку дальнейшее охлаждение, как следует из (7.10), не приведет к заметному уменьшению скорости декогерентизации в точке пересечения уровней. Для нее найдем $T = 50$ мК. Выберем далее $E_J/k = 100$ мК, то есть временная шкала однокубитовых операций будет определяться параметром $\tau_{op} = \hbar/E_J \sim 7 \cdot 10^{-11}$ с;

2) пусть резистор в цепи затвора имеет сопротивление $R \sim 50$ Ом. Флуктуации напряжения ограничивают время декогерентизации $\Gamma_{\Phi}^{-1} \sim 10^{-4}$ с. Оценки приводят к числу $(\Gamma_{\Phi} \tau_{op})^{-1} \sim 8 \cdot 10^5$ когерентных операций на один бит. Использование сверхпроводящих соединений и фильтров может существенно улучшить ситуацию;

3) чтобы обеспечить достаточно быстрые двухкубитовые операции, выберем $L_l \sim 3$ мкГн. В этом случае время декогерентизации будет в 650 раз больше, чем время самой операции.

7.4. Экспериментальная реализация сверхпроводникового кубита

Первая попытка экспериментальной реализации сверхпроводникового кубита была предпринята в 1999 году [7.8]. Эквивалентная схема созданного в [7.8] устройства представлена на рис. 7.2.

С помощью постоянного смещения V_g на сверхпроводящем острове n размерами $700 \times 50 \times 15$ нм³ из алюминия с вероятностью ~ 1 устанавливается начальное состояние $Q_t = Q_0$, соответствующее числу электронов $\sim 10^8$. Это чистое состояние $|0\rangle$. Импульсное напряжение адиабатически приводит два антипересекающихся зарядовых состояния в резонанс, и волновые функции когерентно эволюционируют в

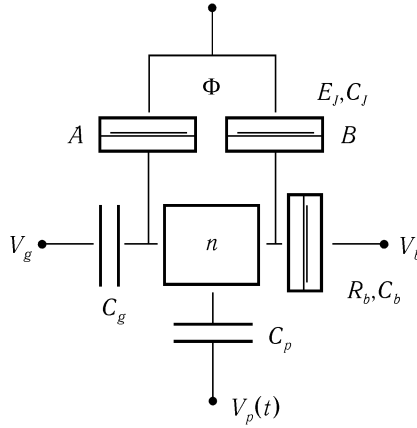


Рис. 7.2. Эквивалентная схема экспериментально реализованного в [7.8] кубита. n — сверхпроводящий островок, V_g — постоянное смещение на затворе, $V_p(t)$ — импульсный электрический потенциал, V_b — потенциал на пробном высокоомном туннельном переходе, Φ — магнитный поток в интерференционной петле, контролирующий энергию связи E_J пары джозефсоновских переходов A и B .

течение времени длительности импульса Δt , образуя когерентные суперпозиции.

Пробное напряжение вызывает переход состояния $|0\rangle$ в состояние $|1\rangle$ с туннелированием двух квазичастиц через пробный туннельный переход с известными вероятностями Γ_{qp1} и Γ_{qp2} (около $(6 \text{ нс})^{-1}$ и $(8 \text{ нс})^{-1}$ в эксперименте), $R_b \sim 30 \text{ МОм}$. Роль пробного перехода в рассматриваемом устройстве двойкая: во-первых, детектирование пары туннелирующих квазичастиц позволяет детектировать и состояние $|1\rangle$, и, во-вторых, с его помощью можно подготавливать начальное основное состояние для последующих операций с кубитами.

Эксперимент проводился при температуре $T \sim 30 \text{ мК}$ ($kT \sim 3 \text{ мкэВ}$), кулоновская энергия островка составляла $E_C = 117 \pm 3 \text{ мкэВ}$, а энергия связи туннельных переходов A и B при $\Phi = 0$ составляла $E_J = 51,8 \text{ мкэВ}$.

Время декогерентизации в рассматриваемом устройстве оценивается в несколько наносекунд при продолжительности переключающего импульса в сотни пикосекунд.

В заключение укажем на некоторые трудности, которые можно ожидать на пути создания сверхпроводниковых многокубитовых квантовых компьютеров. Они связаны:

1) с необходимостью жесткого контроля за совершенством изготовления туннельных джозефсоновских переходов и за временными характеристиками импульсных воздействий;

2) с необходимостью использования для управления отдельными кубитами затворов, флуктуации напряжения на которых являются основной причиной декогерентизации;

3) с наличием связи большого числа кубитов с электромагнитным окружением, благодаря которой образуется сложная нелинейная система, где могут проявляться нежелательные нелинейные эффекты.

Литература

- [7.1] *Bocko M. F., Herr A. M., Feldman V. J.* Prospects for quantum coherent computation using superconducting electrons // IEEE Trans. Appl. Supercond., 1997, v. 7, pp. 3638–3641.
- [7.2] *Averin D. V.* Quantum Computing and Quantum Measurement with Mesoscopic Josephson Junctions // 2000, LANL E-print arXiv: quant-ph/0008114, 13 p.
- [7.3] *Averin D. V.* Adiabatic Quantum Computation with Cooper Pairs // Solid State Comm. 1998, v. 105, № 10, pp. 659–664.
- [7.4] *Shnirman A., Schön G., Hermon Z.* Quantum Manipulations of Small Josephson Junction // Phys. Rev. Lett., 1997, v. 79, № 12, pp. 2371–2374.
- [7.5] *Schön G., Shnirman A., Makhlin Y.* Josephson-Junction Qubits and the Readout Process by Single-Electron Transistors // 1998, LANL E-print cond-mat/9811029.
- [7.6] *Shnirman A., Schön G.* Quantum Measurements Performed with a Single-Electron Transistor // 1998, LANL E-print cond-mat/9811125.
- [7.7] *Makhlin Y., Schön G., Shnirman A.* Josephson-Junction Qubits with Controlled Coupling // Nature, 1998, v. 398, pp. 305.
- [7.8] *Nakamura Y., Pashkin Yu. A., Tsai J. S.* Coherent Control of Macroscopic Quantum States in a Single-Cooper-Pair box // Nature, 1999, v. 398, pp. 786.
- [7.9] *Кулик И. О., Янсон И. К.* Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах. — М.: Наука, 1970, 272 с.

- [7.10] *Friedman J.R., Patel V., Chen W., Tolpygo S.K., Lurens J.E.* Quantum Superposition of Distinct Macroscopic States // *Nature*, 2000, v. 406, 6 July, pp. 43–46.
- [7.11] *Silvestrini P., Stodolsky L.* Adiabatic Inversion in the SQUID, Macroscopic Coherence and Decoherence // 2000, LANL E-print arXiv: cond-mat/0010129, 7 p.
- [7.12] *Ioffe L.B., Geshkenbein V.B., Feigel'man M.V., Fauchure A.L., Blatter G.* Quiet SDS' Josephson Junction for Quantum Computing // *Nature*, 1999, v. 398, pp. 679.
- [7.13] *Makhlin Y., Schön G., Shirman A.* Quantum State Engineering with Josephson–Junction Devices. // 2000, LANL, E-print arXiv: cond-mat/0011269, 46 p.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

*«О сколько нам открытий чудных
Готовит просвещенья дух
И опыт, сын ошибок трудных,
И гений, парадоксов друг,
И случай, бог изобретатель».*

А. С. Пушкин

Ясно, что время, как наилучший судья, сможет определить цену всем рассмотренным нами возможным вариантам квантовых компьютеров. Некоторые из них будут отброшены, другие, наоборот, существенно переработаны и развиты и, наконец, успешная экспериментальная реализация какого-то из них вынесет окончательный приговор всем остальным.

Тем не менее даже в настоящее время можно рискнуть сделать некоторые общие выводы и прогнозы, касающиеся возможности создания полномасштабных высокопроизводительных квантовых суперкомпьютеров, которое только и может оправдать прилагаемые громадные интеллектуальные усилия в области квантовых вычислений. Они состоят в следующем:

1) согласно одному из пяти основных требований, которые должны быть выполнены при создании квантовых суперкомпьютеров, необходимо иметь физическую систему с достаточно большим числом кубитов (тысячи). Вариант квантового компьютера на ионах в ловушке, несмотря на успехи, достигнутые в технологии их создания, встречается со значительными трудностями при увеличении числа ионов-кубитов. Это связано с конфигурационной неустойчивостью одномерного линейного ионного кристалла, образованного ионами в ловушке; с проблемой декогерентизации квантовых состояний, определяемой сильным взаимодействием заряженных ионов с окружением; с необходимостью сверхглубокого лазерного охлаждения ионов. Реально достигнутое число кубитов в таких системах составляет несколько десятков и, по-видимому,

не может быть существенно увеличено. Отсюда следует вывод: рассмотренные системы из ионов на ловушках без дальнейшего развития принципов работы кубитов на ионах, по-видимому, не могут рассматриваться в качестве аппаратного средства для квантового суперкомпьютера, хотя в качестве модельных структур они несомненно имеют определенные перспективы;

2) ансамблевый ядерный магнитно-резонансный (ЯМР) квантовый компьютер на органической жидкости имеет ряд значительных преимуществ. Компьютеры могут работать при комнатной температуре; для управления кубитам и измерения их состояний может быть использована хорошо развитая техника ЯМР; физической системой, представляющей кубиты, является ансамбль естественных органических молекул жидкости, содержащих атомы с ядерными спинами, различающимися по резонансной частоте. Поэтому технология создания такой системы в значительной мере основана на использовании методов органической химии. На этом пути уже удалось реализовать простейшие квантовые компьютеры. Однако такой вариант также встречается с рядом существенных проблем. Одной из них является проблема подготовки начального квантового состояния (инициализации) системы кубитов при температурах жидкого состояния, что требует разработки специальных методов. Число различающихся по резонансной частоте ядерных спинов-кубитов в одной молекуле не может быть произвольно большим. Но главная проблема связана с экспоненциальным уменьшением интенсивности измеряемого сигнала с увеличением числа кубитов, которое в результате для жидкостных ЯМР квантовых компьютеров не может превышать двух десятков. Таким образом, этот, как и предыдущий вариант, тоже не может лечь в основу для создания квантового суперкомпьютера;

3) полупроводниковые ЯМР квантовые компьютеры с индивидуальным обращением к кубитам (вариант Кейна) при работе в условиях низких температур способны решить проблемы с инициализацией и экспоненциальным уменьшением интенсивности сигнала с ростом числа кубитов. Роль кубитов здесь играют ядерные спины одинаковых донорных атомов в полупроводниковой структуре, для электрического управления которыми и измерения их состояний должна быть создана структура из затворов нанометрового масштаба. Учитывая достижения современной нанотехнологии, в этом варианте можно создать систему из многих тысяч кубитов. Основной проблемой полупровод-

никового варианта является необходимость измерения состояния отдельного кубита, для решения которой уже предложено ряд способов. Однако ни один из них не реализован пока даже на простейшем макете. Другая трудность связана с наличием управляющих затворов, шумовое напряжение на которых является существенным источником декогерентизации. Тем не менее, вариант Кейна полупроводникового ЯМР квантового компьютера, несмотря на имеющиеся трудности, может в принципе рассматриваться в качестве кандидата для использования в квантовом суперкомпьютере и заслуживает дальнейшей разработки;

4) более перспективным представляется вариант твердотельного ЯМР квантового компьютера с ансамблевым обращением к кубитам. В этом случае появляется возможность существенно упростить управление кубитами и измерение их состояний. Кроме того, при использовании в ансамблевых вариантах принципов квантового клеточного автомата можно в значительной степени упростить и систему управляющих затворов и даже, возможно, отказаться от их совсем. Это позволило бы исключить связанные с ними существенные механизмы декогерентизации. Этот вариант так же может рассматриваться как один кандидатов для создания суперкомпьютера;

5) альтернативной по отношению к модели Кейна может быть модель полупроводникового ЯМР квантового компьютера, в котором для управления кубитами и измерения их состояний наряду с электрическими используются СВЧ и лазерные импульсы. Этот вариант облегчает решение задач, связанных с измерениями состояний отдельных кубитов, но при этом сохраняются недостатки, связанные с наличием системы затворов. Использование ансамблевого подхода в этом случае позволило бы рассматривать этот вариант как еще одну возможность для создания квантового суперкомпьютера;

6) пока еще не реализованные, как и предыдущие варианты твердотельных ЯМР квантовых компьютеров, квантовые компьютеры на квантовых точках с электронными орбитальными и спиновыми состояниями имеют ряд преимуществ перед ЯМР квантовыми компьютерами: они способны работать при более высоких температурах, чем полупроводниковые ЯМР квантовые компьютеры, имеют значительно более высокие тактовую частоту и величину измеряемого сигнала. Современная нанотехнология позволяет создавать квантовые структуры с практически неограниченным числом квантовых точек. Основной трудностью для них является относительно быстрая декогерентизация

квантовых состояний, связанная с электрическим зарядом электрона и электрическими методами управления кубитами, для подавления которой нет хорошо разработанных методов. Выходом может быть использование для этого не электрических, а оптических ультраскоростных методов. Вариант квантовых компьютеров на квантовых точках наряду с полупроводниковыми вариантами ЯМР квантовых компьютеров тоже может рассматриваться в качестве базового при создании квантовых суперкомпьютеров;

7) сверхпроводниковый вариант квантового компьютера, несмотря на уже имеющиеся достижения в реализации отдельного кубита, имеет ряд трудностей, препятствующих пока тому, чтобы считать его наиболее подходящим в качестве основы для суперкомпьютера. Они связаны с необходимостью жесткого контроля за совершенством изготовления туннельных джозефсоновских переходов, за временными характеристиками импульсных воздействий, с использованием для управления отдельными кубитами электрических схем, флуктуации напряжений в которых являются и здесь основной причиной декогерентизации. Система большого числа кубитов, связанная с электромагнитным окружением, представляет собой сложную нелинейную систему, в которой могут проявляться многие нежелательные нелинейные эффекты. Тем не менее этот вариант также может быть основой при разработке квантового суперкомпьютера.

Таким образом, наиболее перспективными с точки зрения возможности использования для создания полномасштабных квантовых компьютеров вариантами элементной базы представляются твердотельные варианты на ядерных спинах, на квантовых точках и сверхпроводниковых элементах. Однако, по-видимому, можно ожидать и появления таких комбинаций, в которых будут одновременно учитываться преимущества тех или других возможных вариантов.

Рассмотренные выше варианты квантовых компьютеров относятся к группе «обычных» квантовых компьютеров. Они предполагают использование достаточно изученных квантовых явлений. Не затронутыми в книге оказались обсуждаемые в последнее время так называемые «необычные» квантовые компьютеры, в которых в качестве базовых носителей информации — кубитов — в двухмерных и трехмерных системах рассматриваются частицы, подчиняющихся фермиевской статистике — фермионы. Это могут быть, например, электроны и дырки в полупроводнике. Состояние занятое фермионом в таких системах мо-

жет представлять состояние «1», а незанятое — состояние «0». В качестве другого варианта «необычных» компьютеров рассматриваются также «бозонные» компьютеры, использующие свойства бозе-конденсата с нелинейным взаимодействием между бозонами, проявляющиеся, например, в фотонных кристаллах, в системах из нейтральных атомов в оптических ловушках. Наконец, рассматривались квантовые компьютеры, использующие экзотические частицы, не подчиняющиеся ни фермиевской, ни бозевской статистике. Компьютер на анионах (anyon) — квазичастицах, отличающихся тем, что волновая функция аниона при обходе другого аниона приобретает произвольную фазу, был предложен А. Китаевым. Примером анионов являются элементарные возбуждения в двумерном электронном газе в условиях квантового эффекта Холла. Привлекательным свойством анионных квантовых систем является возможность, используя нелокальную природу анионов, обеспечить защиту квантовых операций от влияния случайных помех.

Экспоненциально растущее количество публикаций по самым разным направлениям в области квантовых вычислений привело уже к тому, что стало невозможным сколько-нибудь полно охватить целый ряд вопросов, связанных, в частности, с помехоустойчивостью квантовых вычислений и методами исправления случайных ошибок, с методами подавления декогерентизации в квантовых системах, с формированием квантовых схем, выполняющих сложные квантовые алгоритмы (квантовая схемотехника), с процессами, приводящими к образованию хаотического состояния в системе многих связанных кубитов и многое другое. Каждый из указанных вопросов заслуживает детального рассмотрения.

Наступает Новый век и Новое тысячелетие. Будут новые открытия, идеи и решения.

Предметный указатель

- α -аланин 204
1-хлоро-2-нитро-бензола 205
2,3-дибромопропановая кислота 206
2,3-дибромотиофен 177, 195
- Адиабатическая динамическая логика 26
Адиабатическое быстрое прохождение резонанса 253
— переключение 290
— приближение 52, 334
— прохождение резонанса 331, 332
Аккумуляция погрешностей 164
Алгоритм Гровера 92, 199, 202
— Добешьи 108
— Дойча–Джозса 71, 199
— Евклида 87, 90
— Кули–Тьюки 85
— Меллата 108
— факторизации Шора 86, 114
Амплитуда туннелирования 331
Ансамблевый квантовый компьютер 172, 259
Антипересечение состояний 241, 244, 246, 264, 329, 331
Антиферромагнетик 270, 277
Антиферромагнитное упорядочение 263, 277, 294
- Апостериорная (условная) энтропия Шеннона 34
Априорная энтропия Шеннона 34
- Базис Белла 75
Базисные состояния 15
Боровский радиус 229, 241, 247
Булевые состояния 21
- Вейвлет-преобразование Хаара 111, 115
Вектор Блоха 38
— состояния 29
Векторная модель 188
Вентиль Тоффоли 14, 28, 70
— Фредкина 14, 28
Взаимная информация 33
Взаимодействие Рудерман–Кителевского 247
— Сул–Накамуровское 278
— беспроводное 289
— диполь-дипольное 231, 303
— обменное 240, 306
— сверхтонкое 231
— скалярное 243
— спиновое косвенное 245, 260, 271
— суперсверхтонкое 256
Волны зарядовой плотности 292
— спиновой плотности 294
Временное усреднение 180

- Время декогерентизации 51, 92, — фильтра 109
308 Дочерняя базисная функция 105
— дефазировки 322
— корреляции 53, 210
— релаксации поперечное 52
— — спин-решеточное 52
— — энергии 51
— спин-спиновой релаксации 308
Выжигание дырок 316
- Гайзенберговский спиновый гам- Импульс неселективный 190, 192,
мильтониан 102, 294, 309 193
Гайзенберговское представление — селективный 184, 190, 192
299 Импульсы рефокусирующие 191,
Гамильтониан Кальдейры–Лег- 192
гетта 55 Инвертор 290, 295
— Хаббарда 288 Инициализация 15
— средний 210 — состояний 122
Гематит 279 Инозин 206
Генератор ошибок 102 Информационная энтропия Шен-
Гетероструктура 286, 307 нона 20
Гетероядерная система 180, 198 Информация Холево 33, 34
Гильбертово пространство 14 — достижимая 35
Гомоядерная система 177, 254, 271
- Кантилевер 252, 265
Квазидвумерная структура 294
Квазиэнергии 210
Квант магнитного потока 330
Квантовая двухуровневая система
(кубит) 35
— телепортация 74, 103
— эффективность фотодетектора
311
Квантовое вейвлет-преобразование
91, 104
— сопротивление 336
— фурье-преобразование 81
- Двумерный электронный газ 260, 286
Двухкубитовые вентили 68
— операции 122, 146, 148, 186, 195,
277, 280, 300
Девиация матрицы плотности 175
Декогерентизация 30, 50, 55, 122,
156, 159, 161, 248, 278, 300
— коллективная 186
Диадные интервалы 106
Диметилсульфоксид 206
Длина декогерентизации 54

- Квантовые клеточные автоматы — логический 99, 272
267, 270, 286, 287, 293
— физический 99
— точки с зарядовой поляризацией 286
— с зарядовыми состояниями 296
— с электронной спиновой поляризацией 293, 306
- Квантовый ансамбль приведенный 173
— вентиль 66
— канал 74, 76
— оракул 72
— параллелизм 15, 40, 86, 88
— регистр 81
— эффект Холла 260
- Клонирование сигнального состояния 79
- Когерентная суперпозиция 14, 36, 332
- Количество информации 20
- Коллапс волновой функции 54
- Контролируемое НЕ (CNOT) 28, 68
— усреднение 208
- Контролируемый обмен (CSWAP) 28
- Концентрация запутанности 45
- Корректирующие коды 96, 99
- Криптография 40, 91
- Кубит 14, 36
— запутанности — забит 43
— контролируемый 68, 188, 277, 280
— контролирующий 68, 188, 277, 280
- Кубиты внутренние 139, 143
— на зарядовых состояниях куперовских пар 327
- Кулоновская блокада 307, 328
- Куперовские пары 327
- Легкая ось 278
— плоскость 278
- Лемма Клейна 33
- Ловушка Пауля 124
— Пеннинга 123
- Ловушки для ионов 121, 123
— для нейтральных атомов 132
- Логическая метка 178
- Логические операции квантовые 14, 66
— обратимые 14, 25
- МОП-структура 228, 297, 301
- Магнитно-резонансный силовой микроскоп (MRFM) 252, 265
- Малоновая кислота 214
- Материнская базисная функция 105
- Матрица Паули 298
- Мера запутанности 43
- Модель Кейна 228
— Хаббарда 294
- Монотоны запутанности 78
- Напряжение плоских зон 302
- Населенность состояний 39, 173
- Несепарабельное состояние 41
- Обменное взаимодействие 240, 306

- Однокубитовые квантовые вентили 185
— операции 122, 146, 182, 274
Однофотонная отдача 139
Одноэлектронный транзистор 250, 251
— турникет 251
Оператор Адамара 67, 146, 185
— Паули 315
— Уолша – Адамара 67
— контролируемого изменения фазы 68
— неунитарный 173
— обмена 69
— плотности 29
— поворота 184
— унитарный 173
Операторы рождения 288, 297
— уничтожения 288, 297
Операция инверсии НЕ (NOT) 66, 300
— обмена SWAP 69
Операция НЕ (NOT) 301
Оптическая патока 138
— система адресации 153
Оптические решетки 132, 133
Отцовская функция масштабирования 107
Охлаждение лазерное 134
— сизифово 133, 139
Очистка запутанности 45

Параметр Лэмба – Дика 147
— поляризации 288
Пересечение состояний 241, 328
Переход Джозефсона 327
Подпространство, свободное от декогерентизации 101
Помехоустойчивость квантовых вычислительных процессов 95, 99
Порог точности 99
Постоянная анизотропии 278
Принцип Ландауэра 25
Проблема NP 14
Проекционный оператор 29
Пропускная способность канала 23
Пространственное разделение ансамбля 180
— усреднение 180
Псевдооператоры Адамара 187
Псевдоспин 303, 307, 329
Пятиточечная ячейка 287

Разложение Магнуса 209
— Шмидта 42, 77
Редукция (коллапс) квантового состояния 32

СВЧ-импульс 254, 256
Сверхпроводниковые элементы 326
Сверхпроводниковый квантовый интерференционный прибор (сквид) 330
— островок 327
Сверхтонкое взаимодействие 231, 234
Селективная развязка 192
Сепарабельность состояния 35
Сжатие информации 45
Сизифово охлаждение 133, 139
Симметричное состояние 244

- Синглетное состояние 44, 102, 241, 249, 319
- Скалярное произведение 172
- Следящая система координат 209
- Согласованность 44
- Состояние Белла 323
- Гринбергера–Хорна–Цейлин-гера (GHZ) 323
 - квазичистое 174
 - сепарабельное 50, 216
 - симметричное 244
 - смешанное 30
 - чистое 29
 - шредингеровского кота 53, 75
- Состояния антипересекающиеся 241, 244, 246, 264, 329, 331
- булевые 12, 81
 - флюксидные 330
- Спин-волновое приближение 277
- Спиновые волны 277, 294
- Спиновый гамильтониан 231, 240, 256
- фильтр 251, 311
- Стробоскопическая выборка 210
- Супероператор 173
- Суперотбор 51
- Суперсверхтонкое взаимодействие 256
- Сфера Блоха 38
- Телепортация квантовая 40
- Теорема Вуттерса и Зурека 80
- Левитина–Холево 34
 - Нильсена 77
 - Шумахера 46
- Теория многоуровневого разреше-ния 106
- Термодинамический предел для энергии переключения 23
- Точка пересечений 241
- Точность воспроизведения 31, 162
- Транс-котоновая кислота 207
- Триплетное состояние 241, 250, 319
- Трихлорэтилен 204
- Удержание 286, 307
- Унитарное преобразование До-бешьи 109
- Унитарные преобразования 16, 297
- Унитарный преобразования 66
- Уровни Ландау 260, 319
- Условие компактности 106, 111
- цикличности 212
- Уширение резонансной линии не-однородное 52
- однородное 52
- Фаза Берри 199, 222
- Фильтры Добешьи 108, 109
- зеркальные 109
- Флюксидные состояния 330
- Флуктуации напряжения 248
- Флюоропатит 265
- Формула Блоха 58
- Брейта–Раби 232
 - Ферми 231
 - Шеннона 24
- Функции зеркальные 109
- масштабирования 107
 - сбалансированные 71
- Хлороформ 198

-
- Цикл антисимметричный 210
— симметричный 210
- Циклическая последовательность импульсов 209
- Цитозин 199
- Частота Раби 233, 314
- Число «магическое» 320
— Шмидта 44
- Шумы $1/f$ 249, 310
- Энергетическая цена 24
- Энергия переключения 23
- Энергия связи Джозефсона 328
- Энтропия Шеннона 32
- запутанности 43
— — относительная 48
— информационная 21
— физическая 20
— фон Неймана 31
- Эффект Допплера 135
- Эффективная масса 231, 235
- Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) 52
— спин 121, 171, 228

**Камиль Ахметович Валиев
Александр Александрович Кокин**

**КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ:
НАДЕЖДЫ И РЕАЛЬНОСТЬ**

*Дизайнер М. В. Ботя
Технический редактор А. В. Ширококов
Оригинал-макет подготовили: М. А. Дьячкова, А. П. Степанов
Корректор М. А. Ложкина*

Подписано в печать 12.12.00. Формат 60 × 84¹/₁₆.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 20,46. Уч. изд. л. 20,76.
Гарнитура Computer Modern Roman. Бумага офсетная № 1.
Тираж 1000 экз. Заказ №

Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика»
426057, г. Ижевск, ул. Пастухова, 13.
Лицензия на издательскую деятельность ЛУ № 084 от 03.04.00.
<http://rcd.ru> E-mail: borisov@uni.udm.ru

Отпечатано в полном соответствии с качеством
предоставленных диапозитивов в ГИПП «Вятка».
610033, г. Киров, ул. Московская, 122.
