

0- 753408

На правах рукописи

Яковлева

Яковлева Наталья Михайловна

**Квантовые вычисления
на многоуровневых ядерных спин-системах**

Специальности: 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ,
01.04.02 - теоретическая физика

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань – 2005

Работа выполнена в Казанском физико-техническом институте им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор
Кессель Александр Рахмиэлевич

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
член-корреспондент РАН
Салихов Кев Минуллинвич

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Захаров Вячеслав Михайлович

доктор физико-математических наук,
профессор
Тагиров Ленар Рафгатович

Ведущая организация: Институт проблем химической физики
РАН, г. Черноголовка

Защита состоится « 25 » декабря 2005 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета Д 212.079.01 при Казанском государственном техническом университете им. А.Н. Туполева (420111, г. Казань, ул. К. Маркса, 10).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Казанского государственного технического университета им. А.Н. Туполева.

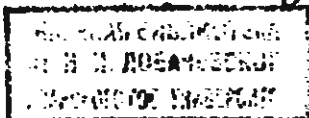
Автореферат разослан « 21 » ноября 2005 г.

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА КГУ



0000062228

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
профессор *Г. Данилаев*



П.Г. Данилаев

Общая характеристика работы

Актуальность исследования. Квантовая информатика в настоящее время является одной из самых бурно развивающихся областей науки. Такой интерес объясняется тем, что квантовые компьютеры, в которых для кодирования информации вместо битов используются квантовые биты (кубиты) – двухуровневые квантовые системы, предоставляют новые возможности для кодирования, обработки и передачи информации [1, 2].

В качестве основы для построения квантовых компьютеров было предложено большое количество различных двухуровневых физических систем, включая ядерные спины 1/2. Кодирование кубитов в этом случае осуществляется по принципу «одна двухуровневая физическая система – один кубит». В рамках такого кодирования кубитов экспериментально реализован ряд квантовых гейтов (квантовых вентилях) и квантовых алгоритмов. В частности, на семикубитном ЯМР квантовом компьютере, работающем на ядерных спинах 1/2, был реализован квантовый алгоритм Шора, осуществляющий факторизацию числа 15.

Кодирование кубитов по принципу «один ядерный спин 1/2 – один кубит» имеет ряд недостатков. Для срабатывания двухкубитных квантовых гейтов требуется «включать» в определенный момент на заданную длительность взаимодействие между спинами и подавлять его на все оставшееся время. Для этого необходимо воздействовать на систему сложными импульсными последовательностями. Существует тенденция к убыванию интервалов между отдельными резонансными частотами по мере увеличения числа взаимодействующих спинов в системе, что затрудняет селективное возбуждение отдельных переходов в больших коллективах спинов.

Эти недостатки могут быть устранены посредством перехода к твердотельным спиновым системам, содержащим квадрупольные ядра со спинами $I > 1/2$ или к другим многоуровневым квантовым системам с дискретным неэквидистантным спектром и применению нового подхода «многоуровневость вместо многочастичности» [3]. Суть этого подхода состоит в том, что кубиты вводятся не на состояниях отдельных двухуровневых частиц, а на состояниях многоуровневых систем, например, на состояниях ядерных спинов $I > 1/2$ или на коллективных состояниях взаимодействующих спинов, то есть собственных состояниях гамильтониана с учетом взаимодействия между спинами.

Цель и задачи исследования. Целью работы является развитие, в рамках парадигмы «многоуровневость вместо многочастичности», нового подхода к кодированию кубитов на многоуровневых квантовых системах – представлении виртуального спина. В связи с этим были поставлены следу-

ключные задачи: разработка схем реализации квантовых гейтов и квантовых алгоритмов на состояниях ядерных спинов $3/2$, $7/2$ и на состояниях модели равных спин-спиновых взаимодействий в представлении виртуального спина. Обобщение понятия виртуального спина на случай квантовой системы с произвольным числом уровней.

Научная новизна. Применительно к многоуровневым системам впервые разработаны точные схемы реализации квантовых гейтов и алгоритмов в представлении виртуального спина. Понятие виртуального спина обобщено на случай произвольной многоуровневой квантовой системы и предложены схемы реализации квантовых гейтов, составляющих универсальный набор.

Исследована математическая модель равных спин-спиновых взаимодействий. На состояниях модели равных спин-спиновых взаимодействий осуществлено кодирование кубитов в представлении виртуального спина.

Достоверность результатов обеспечивается корректностью постановки задачи и применения математического аппарата, согласованностью результатов численных расчетов и выражений полученных аналитически.

Практическая значимость. Разработанный подход к кодированию кубитов — представление виртуального спина, позволяет существенно расширить круг систем, которые могут быть использованы в качестве основы для построения квантовых компьютеров, включив в их число многоуровневые квантовые системы, в частности, ядерные спины $I > 1/2$.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. В представлении виртуального спина впервые разработаны точные схемы реализации квантовых гейтов и квантовых алгоритмов Дойча-Джозса и Гровера с различными начальными состояниями на состояниях ядерных спинов $I > 1/2$.
2. Обобщено понятие виртуального спина на случай произвольной многоуровневой квантовой системы.
3. Квантовые вычисления на многоуровневой квантовой системе с использованием представления виртуального спина осуществлены для модели равных спин-спиновых взаимодействий.

Апробация работы. Результаты работы были представлены на следующих конференциях: V International Congress on Mathematical Modelling (Дубна, 2002), Workshop «Modern Development of Magnetic Resonance» (Казань, 2002), Конференция молодых ученых КФТИ КазНЦ РАН (Казань, 2003), V Всероссийская научно-техническая конференция «Нейроинформатика-2003» (Москва, 2003), Международная конференция «New Geometry of Nature» (Казань, 2003), IX Международные Чтения по

квантовой оптике (Санкт-Петербург, 2003); VII Российская молодежная научная школа «Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений» (Казань, 2003); VII Всероссийская молодежная научная школа «Когерентная оптика и оптическая спектроскопия» (Казань, 2003); Итоговая научная конференция КазНЦ РАН (Казань, 2003, 2004); VIII Международная молодежная научная школа «Actual Problems of Magnetic Resonance and Its Application» (Казань, 2004).

Полученные результаты были включены в отчеты по грантам РФФИ (грант 03-01-00789) и НИОКР РТ (грант 06-6.1-158).

По теме диссертации опубликовано 11 статей и тезисов в международных и российских журналах, сборниках статей и тезисов докладов.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, выводов и списка цитируемой литературы. Общий объем работы составляет 134 страницы, включая 32 рисунка и 5 таблиц. Список литературы содержит 112 наименований.

Схемы реализации квантовых гейтов и алгоритмов на состояниях ядерного спина $I = 3/2$ в представлении виртуального спина

В ЯМР квантовых компьютерах, работающих на ядерных спинах $I = 2$, для реализации двухкубитных квантовых гейтов используются два взаимодействующих ядерных спина $I = 2$. Покажем, что двухкубитный квантовый компьютер, реализующий одно- и двухкубитные квантовые гейты, может быть построен на одной квантовой частице – квадрупольном ядре со спином $3/2$.

Уровни энергии квадрупольного спина в градиенте электрического поля решетки и в постоянном магнитном поле, направленном параллельно главной оси градиента электрического кристаллического поля, определяются гамильтонианом [3]

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_q, \quad \mathcal{H}_z = -\hbar\omega_z I_z, \quad \mathcal{H}_q = \hbar\omega_q \{3I_z^2 - I^2 + \frac{\eta}{2}(I_x^2 - I_y^2)\},$$

где \mathcal{H}_z – гамильтониан взаимодействия с внешним постоянным магнитным полем, \mathcal{H}_q – гамильтониан электрического квадрупольного взаимодействия, ω_q – константа квадрупольного взаимодействия, ω_z – зееманова частота, η – безразмерная величина ($0 \leq \eta \leq 1$), описывающая отклонение градиента электрического поля от аксиальной симметрии.

В случае, когда зеемановская энергия превосходит квадрупольную ($\omega_z > \omega_q$), квадрупольное ядро со спином $3/2$ обладает четырьмя неэквидистант-

ными уровнями энергии $\hbar\epsilon_M$ ($\hbar\epsilon_0 > \hbar\epsilon_1 > \hbar\epsilon_2 > \hbar\epsilon_3$), которым соответствуют собственные функции $|\Psi_M\rangle$.

Пусть на квадрупольные ядра действует переменное импульсное магнитное поле, направленное вдоль оси y . Гамильтониан взаимодействия с этим полем имеет вид

$$\mathcal{H}_{rf}(t) = -\hbar\gamma H_{rf} \cos(\Omega t - f) I_y,$$

где γ – гиромагнитное отношение ядра, H_{rf} , f и Ω – амплитуда, фаза и частота переменного поля. Оператор эволюции спиновой системы под влиянием этого взаимодействия в условиях ($\Omega = \omega_{mn} = \epsilon_m - \epsilon_n$) селективного возбуждения резонансных переходов между некоторой парой уровней энергии $\hbar\epsilon_m \leftrightarrow \hbar\epsilon_n$ ($\hbar\epsilon_m > \hbar\epsilon_n$) имеет форму [3]

$$Y_{mn}(\varphi, f) = \mathbf{E} + (\mathbf{I}_{nn} + \mathbf{I}_{mm})[\cos(\varphi/2) - 1] + (\mathbf{I}_{nm}e^{-if} - \mathbf{I}_{mn}e^{if}) \sin(\varphi/2), \quad (1)$$

где $\varphi = \gamma H_{rf} t_i |\langle \Psi_m | I_y | \Psi_n \rangle|$, t_i – длительность импульса и $\mathbf{E} = \sum_m \mathbf{I}_{mm}$, $\mathbf{I}_{mn} = |\Psi_m\rangle\langle\Psi_n|$. При поляризации поля вдоль оси x или при смещении фазы $f \rightarrow f + \pi/2$ оператор эволюции принимает вид

$$X_{mn}(\varphi, f) = \mathbf{E} + (\mathbf{I}_{nn} + \mathbf{I}_{mm})[\cos(\varphi/2) - 1] - i(\mathbf{I}_{nm}e^{-if} + \mathbf{I}_{mn}e^{if}) \sin(\varphi/2), \quad (2)$$

где $\varphi = \gamma H_{rf} t_i |\langle \Psi_m | I_x | \Psi_n \rangle|$.

В стандартной модели двухкубитного ЯМР квантового компьютера в качестве основы для кодирования кубитов и построения квантовых гейтов рассматриваются два взаимодействующих ядерных спина $1/2$. В формализме квантовой механики состояния такой системы и операции над ними описываются в абстрактном четырехмерном гильбертовом пространстве, являющемся прямым произведением двумерных пространств собственных состояний спинов $1/2$. Проведем обратную процедуру: четырехмерное пространство Γ_I , соответствующее реальному спину $3/2$, представим как прямое произведение $\gamma_r \otimes \gamma_s$ двух абстрактных двумерных пространств состояний виртуальных спинов r и s . Любой оператор \mathbf{I} , заданный в четырехмерном гильбертовом пространстве Γ_I , может быть выражен в виде линейной комбинации прямых произведений $\mathbf{r} \otimes \mathbf{s}$ операторов виртуальных спинов, заданных в пространствах γ_r и γ_s . Между базисом $|\Psi_M\rangle$ пространства Γ_I и базисом $|\xi_m\rangle \otimes |\zeta_n\rangle$ прямого произведения $\gamma_r \otimes \gamma_s$ имеет место изоморфное соответствие

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &\leftrightarrow |\xi_0\rangle \otimes |\zeta_0\rangle = |0, 0\rangle, & |\Psi_1\rangle &\leftrightarrow |\xi_0\rangle \otimes |\zeta_1\rangle = |0, 1\rangle, \\ |\Psi_2\rangle &\leftrightarrow |\xi_1\rangle \otimes |\zeta_0\rangle = |1, 0\rangle, & |\Psi_3\rangle &\leftrightarrow |\xi_1\rangle \otimes |\zeta_1\rangle = |1, 1\rangle. \end{aligned}$$

Для построения произвольных квантовых вычислений достаточно одного универсального набора квантовых гейтов. Один из универсальных наборов

состоит всего из двух квантовых гейтов — однокубитной операции поворота и двухкубитного квантового гейта $CNOT$ [2].

Однокубитные операции поворота в пространствах состояний виртуальных спинов r и s вокруг осей y и x на угол φ реализуются посредством пар некаскадных, независимых (не затрагивающих общих уровней энергии) селективных радиочастотных импульсов

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_r(\varphi) &= \mathbf{Y}_{02}(\varphi, 0)\mathbf{Y}_{13}(\varphi, 0), & \mathbf{Y}_s(\varphi) &= \mathbf{Y}_{01}(\varphi, 0)\mathbf{Y}_{23}(\varphi, 0), \\ \mathbf{X}_r(\varphi) &= \mathbf{X}_{02}(\varphi, 0)\mathbf{X}_{13}(\varphi, 0), & \mathbf{X}_s(\varphi) &= \mathbf{X}_{01}(\varphi, 0)\mathbf{X}_{23}(\varphi, 0). \end{aligned}$$

Частными случаями операции поворота являются квантовый гейт NOT ($NOT|\xi\rangle = |-\xi\rangle$), инвертирующий состояние кубита

$$\mathbf{NOT}_r = i\mathbf{X}_r(\pi), \quad \mathbf{NOT}_s = i\mathbf{X}_s(\pi)$$

и псевдооператор Адамара h ($h|\xi\rangle = [|0\rangle + (-1)^{1-\xi}|1\rangle]/\sqrt{2}$)

$$\mathbf{h}_r = \mathbf{Y}_r(\pi/2), \quad \mathbf{h}_s = \mathbf{Y}_s(\pi/2), \quad \mathbf{h}_r^{-1} = \mathbf{Y}_r(-\pi/2), \quad \mathbf{h}_s^{-1} = \mathbf{Y}_s(-\pi/2).$$

Схемами реализации оператора Адамара H ($H|\xi\rangle = [|0\rangle + (-1)^\xi|1\rangle]/\sqrt{2}$), который позволяет получить равновероятную суперпозицию состояний, являются

$$\mathbf{H}_r = \mathbf{Y}_r(\pi/2)\mathbf{Y}_{23}(2\pi, 0), \quad \mathbf{H}_s = \mathbf{Y}_s(\pi/2)\mathbf{Y}_{13}(2\pi, 0).$$

Двухкубитный квантовый гейт $CNOT_{\alpha \rightarrow \beta}$ ($ICNOT_{\alpha \rightarrow \beta}$), который инвертирует состояния кубита β («контролируемый»), если кубит α («контролирующий») находится в состоянии $|1\rangle$ ($|0\rangle$), и не меняет состояние кубита β , если кубит α находится в состоянии $|0\rangle$ ($|1\rangle$), может быть реализован как

$$\begin{aligned} \mathbf{CNOT}_{r \rightarrow s} &= e^{-i\pi/2}\mathbf{Z}_r(1)\mathbf{X}_{23}(\pi, 0), & \mathbf{CNOT}_{s \rightarrow r} &= e^{-i\pi/2}\mathbf{Z}_s(1)\mathbf{X}_{13}(\pi, 0), \\ \mathbf{ICNOT}_{r \rightarrow s} &= e^{-i\pi/2}\mathbf{Z}_r(0)\mathbf{X}_{01}(\pi, 0), & \mathbf{ICNOT}_{s \rightarrow r} &= e^{-i\pi/2}\mathbf{Z}_s(0)\mathbf{X}_{02}(\pi, 0), \end{aligned}$$

где $\mathbf{Z}_i(k) = \mathbf{Y}_i(\pi/2)\mathbf{X}_i((-1)^k\pi/2)\mathbf{Y}_i(-\pi/2)$ ($i = r, s$; $k = 0, 1$).

Могут также оказаться полезными двухкубитные квантовые гейты $SWAP$, обменивающий состояния двух кубитов.

$$\mathbf{SWAP}_{r \leftrightarrow s} = e^{-i\pi/2}\mathbf{Y}_s(\pi/2)\mathbf{X}_{01}(-\pi/2, 0)\mathbf{X}_{23}(\pi/2, 0)\mathbf{Y}_s(-\pi/2)\mathbf{X}_{12}(\pi, 0)$$

и квантовый гейт изменения знака $\mathbf{P}_i = \mathbf{E} - 2\mathbf{I}_{ii}$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_0 &= e^{-i\pi/2}\mathbf{Z}_r(0)\mathbf{Y}_{01}(\pi, 0)\mathbf{X}_{01}(\pi, 0), & \mathbf{P}_1 &= e^{-i\pi/2}\mathbf{Z}_r(0)\mathbf{Y}_{01}(-\pi, 0)\mathbf{X}_{01}(\pi, 0), \\ \mathbf{P}_2 &= e^{-i\pi/2}\mathbf{Z}_r(1)\mathbf{Y}_{23}(\pi, 0)\mathbf{X}_{23}(\pi, 0), & \mathbf{P}_3 &= e^{-i\pi/2}\mathbf{Z}_r(1)\mathbf{Y}_{23}(-\pi, 0)\mathbf{X}_{23}(\pi, 0). \end{aligned}$$

Матричные элементы квантовых гейтов NOT , $CNOT$, $ICNOT$, $SWAP$ являются положительными действительными числами (единицами). Их

экспериментальная реализация в ЯМР сталкивается с трудностями, заключающимися в том, что операторы эволюции реальных импульсных последовательностей содержат либо все чисто мнимые недиагональные матричные элементы, либо часть отрицательных недиагональных матричных элементов. В некоторых случаях (NOT_r , NOT_s) удается так построить схему импульсных последовательностей, что квантовые гейты достаточно простым образом реализуются с точностью до фазового множителя $e^{i\alpha}$, который не влияет на результат квантово-механических измерений. В других случаях требуется использовать либо существенно более сложные импульсные последовательности ($\text{CNOT}_{r \rightarrow s}$, $\text{CNOT}_{s \rightarrow r}$, $\text{ICNOT}_{r \rightarrow s}$, $\text{ICNOT}_{s \rightarrow r}$, $\text{SWAP}_{r \leftrightarrow s}$, P_i), либо учитывать эти различия на протяжении всей цепочки квантовых гейтов, составляющих квантовый алгоритм (при этом результат вычислений будет представлен в несколько измененной форме). Это обстоятельство не является атрибутом кодирования кубитов в представлении виртуального спина, оно присуще любому известному способу кодирования кубитов. В ряде случаев наличие мнимых или отрицательных недиагональных матричных элементов не влияет на результаты вычислений, например, если последовательность квантовых гейтов только имитирует классические обратимые вычисления, то есть преобразует состояние квантового регистра из одного состояния вычислительного базиса в другое состояние вычислительного базиса, а не в суперпозицию состояний, или если квантовый гейт образует в последовательности пару с другим подобным гейтом.

Можно предложить упрощенные схемы реализации (состоящие из существенно меньшего количества импульсов) некоторых квантовых гейтов, например,

$$\begin{aligned} P_0^* &= Y_{01}(\pi, 0)X_{01}(\pi, 0), & P_1^* &= Y_{01}(-\pi, 0)X_{01}(\pi, 0), \\ P_2^* &= Y_{23}(\pi, 0)X_{23}(\pi, 0), & P_3^* &= Y_{23}(-\pi, 0)X_{23}(\pi, 0), \end{aligned}$$

где оператор O^* – оператор O , в котором часть матричных элементов умножена на мнимую единицу.

В качестве начальных состояний для реализации квантовых алгоритмов в ансамблевых квантовых компьютерах используются псевдочистые состояния, которые соответствуют чистым состояниям $|k\rangle$ и характеризуются матрицей плотности

$$\rho_k^{pp} = \alpha E + \beta I_{kk}.$$

Перед началом вычислений физическая система обычно находится в термодинамически равновесном состоянии ρ^T , которое может быть преобразовано в псевдочистое состояние методом перераспределения населенностей уровней [4]. В работе [4] также описан метод считывания результатов квантовых

вычислений. Еще один тип начальных состояний - пары псевдоцистных состояний [5]

$$\rho_{kl}^{ppcs} = \alpha' \mathbf{E} + \beta' (\mathbf{I}_{kk} - \mathbf{I}_{ll}).$$

Здесь α , β , α' и β' - постоянные, зависящие от параметров системы.

Алгоритм Дойча-Джозса. Задача Дойча-Джозса для двухкубитной системы состоит в следующем [1]. Дана функция $f(x) : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}$ (для записи аргументов и значений функции используется по одному кубиту). Функция может относиться к одному из типов: постоянная ($f_{00}(0) = f_{00}(1) = 0$ и $f_{11}(0) = f_{11}(1) = 0$), сбалансированная ($f_{01}(0) = 0$, $f_{01}(1) = 1$ и $f_{10}(0) = 1$, $f_{10}(1) = 0$). Для того, чтобы определить тип функции на «классическом компьютере» необходимо вычислить значения функции и при $x = 0$, и при $x = 1$. Квантовый алгоритм Дойча-Джозса позволяет решить задачу, вычислив функцию всего один раз. Наиболее простым является случай, когда функции $f_{mn}(x)$ заданы в табличной форме. В этом случае им соответствуют преобразования $(\mathbf{O}_{mn} : |x\rangle|y\rangle \rightarrow |x\rangle|y \oplus f_{mn}(x)\rangle$, где \oplus - сложение по модулю 2)

$$\mathbf{O}_{00} = \mathbf{E}, \quad \mathbf{O}_{01} = \text{CNOT}_{r \rightarrow s}, \quad \mathbf{O}_{10} = \text{ICNOT}_{r \rightarrow s}, \quad \mathbf{O}_{11} = \text{NOT}_s.$$

Двухкубитный квантовый алгоритм Дойча-Джозса может быть реализован как следующая последовательность $f(x)$ а б с квантовых гейтов

$$\mathbf{D}_{mn} = \mathbf{h}_r \mathbf{h}_s^{-1} \mathbf{O}_{mn} \mathbf{h}_s \mathbf{h}_r^{-1}.$$

На Рис. 1 схематически изображен спектр ЯМР, который может быть получен при считывании результатов квантовых вычислений после действия операторов \mathbf{D}_{mn} на различные начальные состояния. В случае псевдоцистного начального состояния в результате вычислений оно переводится в псевдоцистное состояние, которое соответствует чистому состоянию $|0, 0\rangle$, если функция является постоянной и в состояние, соответствующее $|1, 0\rangle$, если функция сбалансированная. В случаях, когда начальным состоянием являются пара псевдоцистных состояний и термодинамически равновесное состояние, результирующие состояния не соответствуют конкретным

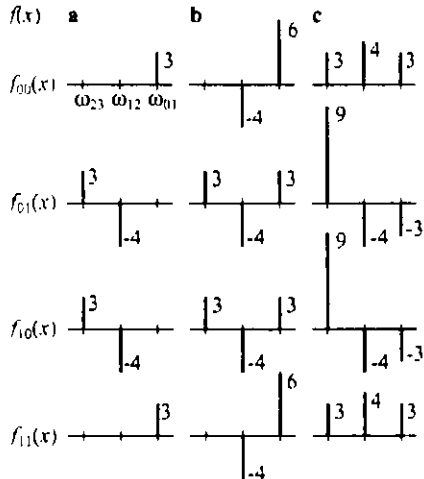


Рис. 1. Спектр ЯМР после действия операторов двухкубитного алгоритма Дойча-Джозса на начальные состояния ρ_0^{pp} (а), ρ_{01}^{ppcs} (б) и ρ^T (с).

псевдочистым состояниям, однако, они совпадают для постоянных функций ($f_{00}(x)$ и $f_{11}(x)$) и сбалансированных функций ($f_{01}(x)$ и $f_{10}(x)$), что позволяет однозначно определить тип функции.

Алгоритм Гровера. В случае системы, состоящей из двух кубитов, алгоритм Гровера служит для решения следующей задачи [1]. Имеется совокупность четырех x_0, x_1, x_2, x_3 неупорядоченных элементов. Необходимо найти элемент, удовлетворяющий некоторому заданному условию, если известно, что такой элемент в совокупности существует и он единственный. В случае, когда задача решается на «классическом компьютере», необходимо проверить от одного до трех элементов из четырех для того, чтобы найти требуемый элемент. Квантовый алгоритм Гровера позволяет решить задачу за один шаг. Двухкубитный алгоритм Гровера в случае, когда искомым является состояние x_i , состоит из следующих квантовых гейтов

$$G_i = H_1 H_2 P_i H_1 H_2 P_0 H_1 H_2.$$

На Рис. 2 представлен ожидаемый спектр ЯМР, который может быть получен при считывании результатов квантовых вычислений после действия

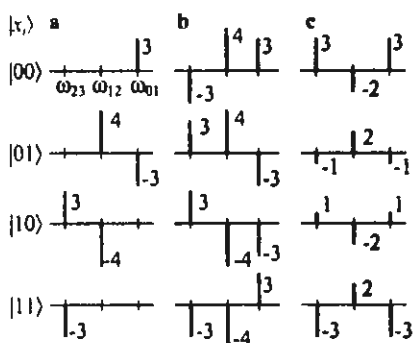


Рис. 2. Спектр ЯМР после действия операторов двухкубитного алгоритма Гровера на начальные состояния ρ_0^{pp} (а), ρ_{01}^{pp} (б) и ρ^{pp} (с).

операторов G_i на различные начальные состояния. В случае, когда начальным состоянием является псевдочистое начальное состояние, результатом вычислений является псевдочистое состояние, которое соответствует искомому состоянию. Если начальным состоянием является пара псевдочистых состояний и термодинамически равновесное состояние, результирующие состояния не соответствуют конкретным псевдочистым состояниям, тем не менее различия в форме ожидаемого спектра ЯМР (положение

линий поглощения и излучения) позволяют однозначно идентифицировать искомое состояние. Сигналы ЯМР, полученные для случая термодинамически равновесного начального состояния, для $x_i = |00\rangle$ и $x_i = |10\rangle$, а также для $x_i = |01\rangle$ и $x_i = |11\rangle$ совпадают по структуре. Тем не менее эти спектры могут служить визитной карточкой искомых состояний x_i . Величина амплитуды линии в центре относится к величинам амплитуд крайних линий как 2 : 3 в случае $x_i = |00\rangle$ и как 2 : 1 в случае $x_i = |10\rangle$. Аналогично при $x_i = |01\rangle$ отношение амплитуд есть 2 : 1 и при $x_i = |11\rangle$ - 2 : 3.

Таким образом, в качестве начального состояния для реализации алго-

ритмов Дойча-Джозга и Гровера в представлении виртуального спина помимо псевдоочистого состояния также могут быть использованы пары псевдоочистых состояний и термодинамически равновесное. Использование начальных состояний, отличающихся от псевдоочистого состояния не требует модификации алгоритма.

Схемы реализации квантовых гейтов и алгоритмов на состояниях ядерного спина $I = 7/2$ в представлении виртуального спина

В качестве основы для построения трехкубитного квантового компьютера будем рассматривать квадрупольные ядра со спином $7/2$, помещенные в постоянное магнитное поле и аксиально симметричное электрическое кристаллическое поле. Спектр такой системы состоит из восьми уровней энергии $\hbar\epsilon_M$ и семи резонансных линий на частотах $\omega_{mn} = \epsilon_m - \epsilon_n$. Переход к представлению виртуального спина состоит в сопоставлении восьми собственным состояниям $|\Psi_M\rangle$ спина $7/2$ прямых произведений $|\chi_k\rangle \otimes |\xi_m\rangle \otimes |\zeta_n\rangle$ состояний трех виртуальных спинов q , r и s (Рис. 3).

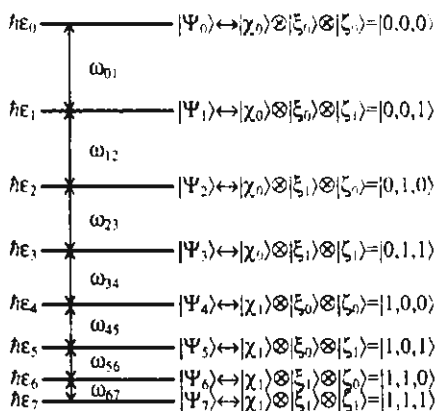


Рис. 3. Уровни энергии $\hbar\epsilon_M$, собственные состояния $|\Psi_M\rangle$ спина $I = 7/2$ и соответствующие прямые произведения $|\chi_k\rangle \otimes |\xi_m\rangle \otimes |\zeta_n\rangle$ состояний виртуальных спинов.

Следует отметить, что для перехода в представление виртуального спина не обязательно, чтобы прямые произведения состояний виртуальных спинов $|0, 0, 0\rangle$, $|0, 0, 1\rangle$, ..., $|1, 1, 1\rangle$ в энергетической шкале располагались последовательно одно над другим. Состояния $|0, 0, 0\rangle$, $|0, 0, 1\rangle$, ..., $|1, 1, 1\rangle$ могут быть приписаны состояниям $|\Psi_M\rangle$ реальной физической системы в произвольном порядке, который определяется в основном удобством воплощения квантовых гейтов. В частности, между состояниями физической системы, участвующими в кодировании кубитов, могут оказаться состояния, которые не принимают участия в кодировании кубитов.

Операция вращения отдельного виртуального спина на угол φ вокруг осей y и x может быть реализована следующим образом

$$\begin{aligned}
 Y_q(\varphi) &= Y_{04}(\varphi, 0)Y_{15}(\varphi, 0)Y_{26}(\varphi, 0)Y_{37}(\varphi, 0), \\
 Y_r(\varphi) &= Y_{02}(\varphi, 0)Y_{13}(\varphi, 0)Y_{46}(\varphi, 0)Y_{57}(\varphi, 0),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Y_s(\varphi) &= Y_{01}(\varphi, 0)Y_{23}(\varphi, 0)Y_{45}(\varphi, 0)Y_{67}(\varphi, 0), \\
X_q(\varphi) &= X_{04}(\varphi, 0)X_{15}(\varphi, 0)X_{26}(\varphi, 0)X_{37}(\varphi, 0), \\
X_r(\varphi) &= X_{02}(\varphi, 0)X_{13}(\varphi, 0)X_{46}(\varphi, 0)X_{57}(\varphi, 0), \\
X_s(\varphi) &= X_{01}(\varphi, 0)X_{23}(\varphi, 0)X_{45}(\varphi, 0)X_{67}(\varphi, 0).
\end{aligned}$$

где $Y_{mn}(\varphi, f)$ и $X_{mn}(\varphi, f)$ – операторы (1) и (2) эволюции системы.

Квантовый гейт NOT и псевдооператор Адамара являются вращениями на угол π вокруг оси x и на угол $\pi/2$ вокруг оси y , соответственно,

$$\begin{aligned}
NOT_q &= iX_q(\pi), \quad NOT_r = iX_r(\pi), \quad NOT_s = iX_s(\pi), \\
h_q &= Y_q(\pi/2), \quad h_r = Y_r(\pi/2), \quad h_s = Y_s(\pi/2), \\
h_q^{-1} &= Y_q(-\pi/2), \quad h_r^{-1} = Y_r(-\pi/2), \quad h_s^{-1} = Y_s(-\pi/2).
\end{aligned}$$

Схемами реализации операторов Адамара являются

$$\begin{aligned}
H_q &= Y_q(\pi/2)Y_{45}(2\pi, 0)Y_{67}(2\pi, 0), \\
H_r &= Y_r(\pi/2)Y_{23}(2\pi, 0)Y_{67}(2\pi, 0), \\
H_s &= Y_s(\pi/2)Y_{13}(2\pi, 0)Y_{57}(2\pi, 0).
\end{aligned}$$

Квантовый гейт P_i изменения знака реализуется как

$$\begin{aligned}
P_i &= Y_{01}(\eta_1\pi, 0)Y_{12}(\eta_2\pi, 0)Y_{23}(\eta_3\pi, 0)Y_{34}(\eta_4\pi, 0) \times Y_{45}(\eta_5\pi, 0) \times \\
&\times Y_{56}(\eta_6\pi, 0)Y_{67}(\eta_7\pi, 0)Y_{67}(\pi, \pi/8)Y_{56}(\pi, \pi/8)Y_{45}(\pi, \pi/8) \times \\
&\times Y_{34}(\pi, \pi/8)Y_{23}(\pi, \pi/8)Y_{12}(\pi, \pi/8)Y_{01}(\pi, \pi/8),
\end{aligned}$$

где $\eta_j = 1$, для $j = i$ и $\eta_j = -1$, для $j \neq i$.

В Таблице 1 приведены точные схемы реализации двухкубитных ($CNOT$, $SWAP$) и трехкубитных ($CCNOT$, $CSWAP$) квантовых гейтов. Квантовый гейт $CCNOT_{(\alpha,\beta)\rightarrow\gamma}$ инвертирует состояние кубита γ , если кубиты α и β находятся в состоянии $|0, 0\rangle$. Квантовый гейт $CSWAP_{\alpha\rightarrow(\beta\leftrightarrow\gamma)}$ обменивает состояниями кубиты β и γ , если кубит α находится в состоянии $|0\rangle$. Можно также предложить упрощенные схемы реализации, в которых допускается, что операторы могут содержать мнимые или отрицательные матричные элементы вместо действительных положительных, например,

$$\begin{aligned}
SWAP_{q\rightarrow r}^* &= Y_{24}(-\pi, 0)Y_{35}(\pi, 0), & CSWAP_{q\rightarrow(r\leftrightarrow s)}^* &= Y_{56}(\pi, 0), \\
SWAP_{q\rightarrow s}^* &= Y_{14}(-\pi, 0)Y_{36}(\pi, 0), & CSWAP_{r\rightarrow(q\leftrightarrow s)}^* &= Y_{36}(\pi, 0), \\
SWAP_{r\rightarrow s}^* &= Y_{12}(-\pi, 0)Y_{56}(\pi, 0), & CSWAP_{s\rightarrow(q\leftrightarrow r)}^* &= Y_{35}(\pi, 0).
\end{aligned}$$

Алгоритм Дойча-Джозса. Трехкубитный квантовый алгоритм Дойча-Джозса служит для решения следующей задачи. Дана функция

Таблица 1. Схемы реализации квантовых гейтов.

Квантовый гейт	Схема реализации
$\text{CNOT}_{q \rightarrow r}$	$Y_{56}(2\pi, 0)Y_{46}(-\pi, 0)Y_{57}(\pi, 0)$
$\text{CNOT}_{q \rightarrow s}$	$Y_{56}(2\pi, 0)Y_{45}(-\pi, 0)Y_{67}(\pi, 0)$
$\text{CNOT}_{r \rightarrow q}$	$Y_{36}(2\pi, 0)Y_{28}(-\pi, 0)Y_{37}(\pi, 0)$
$\text{CNOT}_{r \rightarrow s}$	$Y_{36}(2\pi, 0)Y_{23}(-\pi, 0)Y_{67}(\pi, 0)$
$\text{CNOT}_{s \rightarrow q}$	$Y_{35}(2\pi, 0)Y_{15}(-\pi, 0)Y_{37}(\pi, 0)$
$\text{CNOT}_{s \rightarrow r}$	$Y_{35}(2\pi, 0)Y_{13}(-\pi, 0)Y_{37}(\pi, 0)$
$\text{SWAP}_{q \rightarrow r}$	$Y_{34}(-\pi, 0)Y_{24}(-\pi, 0)Y_{35}(\pi, 0)$
$\text{SWAP}_{q \rightarrow s}$	$Y_{34}(-\pi, 0)Y_{14}(-\pi, 0)Y_{36}(\pi, 0)$
$\text{SWAP}_{r \rightarrow s}$	$Y_{25}(-\pi, 0)Y_{12}(-\pi, 0)Y_{56}(\pi, 0)$
$\text{CCNOT}_{(q,r) \rightarrow s}$	$P_6 Y_{67}(\pi, 0)$
$\text{CCNOT}_{(q,s) \rightarrow r}$	$P_5 Y_{57}(\pi, 0)$
$\text{CCNOT}_{(r,s) \rightarrow q}$	$P_3 Y_{37}(\pi, 0)$
$\text{CSWAP}_{q \rightarrow (r \leftrightarrow s)}$	$P_5 Y_{56}(\pi, 0)$
$\text{CSWAP}_{r \rightarrow (q \leftrightarrow s)}$	$P_3 Y_{36}(\pi, 0)$
$\text{CSWAP}_{s \rightarrow (q \leftrightarrow r)}$	$P_3 Y_{35}(\pi, 0)$

$f(x) : \{0, 1\}^2 \rightarrow \{0, 1\}$, т.е. для записи аргументов функции используется два кубита, для записи значений функции один кубит. Предполагается, что функция может быть либо постоянной, либо сбалансированной. Существуют два типа постоянных функций ($f_{0000}(x)$, $f_{1111}(x)$) и шесть типов сбалансированных функций ($f_{0011}(x)$, $f_{0101}(x)$, $f_{0110}(x)$, $f_{1001}(x)$, $f_{1010}(x)$), где запись $f_{klmn}(x)$ означает $f_{klmn}(00) = k$, $f_{klmn}(01) = l$, $f_{klmn}(10) = m$, $f_{klmn}(11) = n$. Будем рассматривать случай, когда функции заданы в табличной форме, им соответствуют преобразования ($O_{klmn} : |x\rangle|y\rangle \rightarrow |x\rangle|y \oplus f_{klmn}(x)\rangle$)

$$O_{0000} = E, O_{0011} = \text{CNOT}_{q \rightarrow s}, O_{0101} = \text{CNOT}_{r \rightarrow s},$$

$$O_{0110} = \text{CNOT}_{r \rightarrow s} \text{CNOT}_{q \rightarrow s}, O_{1001} = \text{NOT}_s \text{CNOT}_{r \rightarrow s} \text{CNOT}_{q \rightarrow s},$$

$$O_{1010} = \text{NOT}_s \text{CNOT}_{r \rightarrow s}, O_{1100} = \text{NOT}_s \text{CNOT}_{q \rightarrow s}, O_{1111} = \text{NOT}_s.$$

Для решения задачи на «классическом компьютере» необходимо вычислить значения функции для трех значений аргументов из четырех возможных. Квантовый алгоритм Дойча-Джозса позволяет решить задачу за один шаг. Последовательность квантовых гейтов, составляющих трехкубитный квантовый алгоритм Дойча-Джозса, можно записать следующим образом

$$D_{klmn} = h_q h_r h_s^{-1} O_{klmn} h_s h_r^{-1} h_q^{-1}.$$

На Рис. 4 схематически изображен спектр ЯМР, который может быть получен после действия операторов D_{klmn} на различные начальные состояния. Различия в форме ожидаемого спектра ЯМР (положение линий поглощения и излучения) позволяют однозначно определить тип функции.

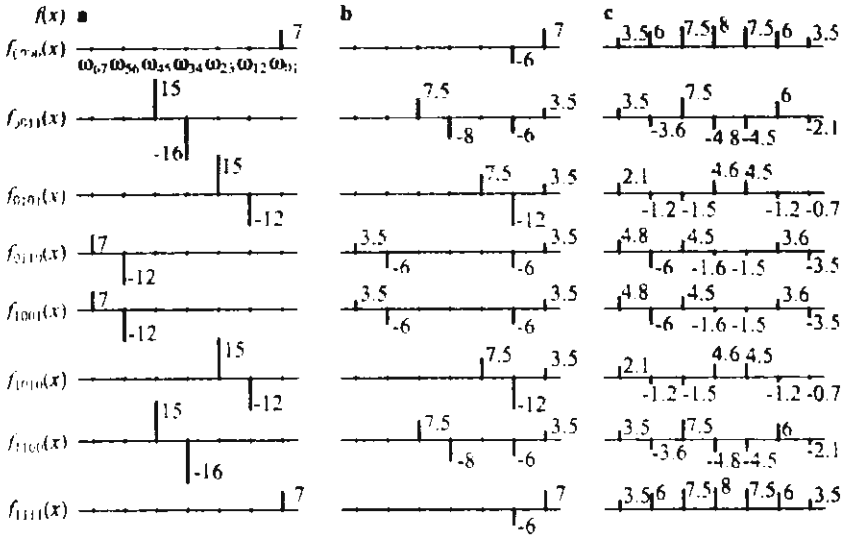


Рис. 4. Спектр ЯРМ после действия операторов трехкубитного алгоритма Дойча-Ложеса на начальные состояния ρ_0^{EP} (а), ρ_0^{PP} (б) и ρ^J (с).

Алгоритм Гровера. Трехкубитный квантовый алгоритм Гровера решает следующую задачу. Существует совокупность восьми неупорядоченных элементов x_1, \dots, x_8 . Необходимо найти элемент, который удовлетворяет некоторому заданному условию. В классическом случае необходимо проверить от одного до семи элементов, чтобы найти требуемый элемент. Квантовый алгоритм Гровера позволяет найти элемент за два шага. Трехкубитный алгоритм Гровера в случае, когда искомым является состояние x_1 , состоит из следующей последовательности квантовых гейтов

$$G_i = (DP_i)^2 W, \quad W = H_q H_r H_s.$$

Вместо операторов P_i могут быть использованы операторы P_i^* ($P_{2k}^* = Y_{2k,2k+1}(\pi, 0) X_{2k,2k+1}(\pi, 0)$, $P_{2k+1}^* = Y_{2k,2k+1}(-\pi, 0) X_{2k,2k+1}(\pi, 0)$, $k = 0, 1, 2, 3$), которые реализуются более простыми последовательностями импульсов. Операторы P_i^* отличаются от операторов P_i тем, что содержат часть мнимых матричных элементов. Оператор D может быть реализован как последовательности трех квантовых гейтов WP_0W . Операторы, составляющие импульсную последовательность, коммутируют друг с другом, что позволяет значительно упростить последовательность импульсов

$$D = Y_{12}(2\pi, 0) Y_{47}(2\pi, 0) Y_{04}(-\pi/2, 0) Y_{15}(-\pi/2, 0) Y_{26}(-\pi/2, 0) \times \\ \times Y_{37}(-\pi/2, 0) Y_{13}(-\pi/2, 0) Y_{02}(-\pi/2, 0) Y_{01}(-3\pi/2, 0) X_{01}(\pi, 0) \times \\ \times Y_{01}(\pi/2, 0) Y_{13}(-\pi/2, 0) Y_{02}(-\pi/2, 0) Y_{26}(-\pi/2, 0) Y_{37}(-\pi/2, 0) \times$$

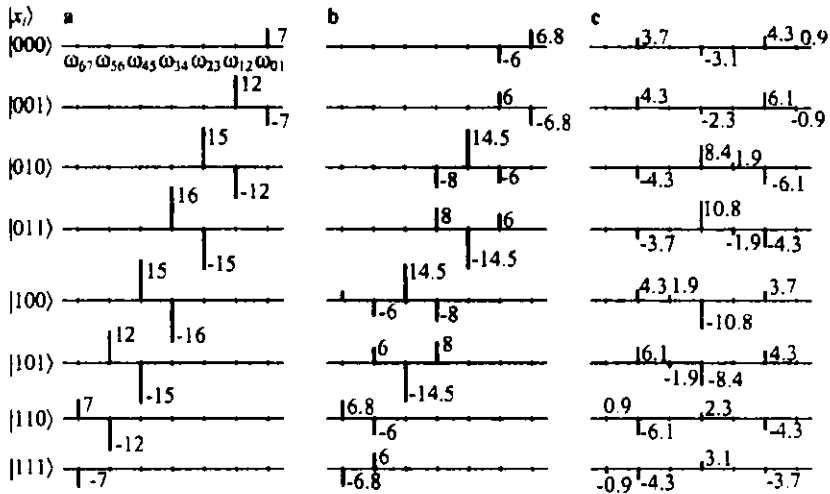


Рис. 5. Спектр ЯМР после действия операторов трехкубитного алгоритма Гровера на начальные состояния ρ_0^{pp} (а), ρ_{01}^{pp} (б) и ρ^T (с).

$$\times Y_{04}(-\pi/2, 0)Y_{15}(-\pi/2, 0)Y_{04}(-\pi/2, 0)Y_{15}(-\pi/2, 0).$$

На Рис. 5 представлен ожидаемый спектр ЯМР, который может быть получен после действия операторов G_i на различные начальные состояния. Спектры являются уникальными для каждого искомого состояния и позволяют однозначно идентифицировать его.

Предложенные схемы реализации в ЯМР квантовых гейтов на состояниях ядерных спинов $3/2$ и $7/2$ не являются единственными, скорее они наиболее простые (состоят из наименьшего числа импульсов). Без предьявления анизотропии в плоскости, перпендикулярной постоянному магнитному полю, x и y направления являются эквивалентными, и это порождает дополнительные возможности реализации квантовых гейтов посредством радиочастотного поля, ориентированного вдоль любой из этих осей.

Еще одна причина разнообразия схем реализации - возможность возбуждать радиочастотным полем резонансные переходы с различными правилами отбора: $\Delta = |m - n| = 1, 2, \dots$. Хотя в низкосимметричном кристаллическом поле все резонансные переходы, в принципе, разрешены, их вероятности с ростом Δ убывают как $(\omega_q/\omega_z)^{2\Delta-2}$ или $(\omega_q\eta/\omega_z)^{2\Delta-2}$. Можно также предложить следующие схемы реализации для операторов с $\Delta > 1$

$$\begin{aligned} X_{m,m+\Delta}(\varphi) &= X_{m,m+\Delta-1}(-\pi)Y_{m+\Delta-1,m+\Delta}(\varphi)X_{m,m+\Delta-1}(\pi), \\ Y_{m,m+\Delta}(\varphi) &= Y_{m,m+\Delta-1}(-\pi)Y_{m+\Delta-1,m+\Delta}(\varphi)Y_{m,m+\Delta-1}(\pi). \end{aligned}$$

Результаты, полученные для ядерных спинов $3/2$ и $7/2$, пригодны для

произвольно выбранных четырех и восьми уровней любой многоуровневой квантовой системы, соответственно. Необходимо лишь иметь возможность возбуждать требуемые для реализации квантовых гейтов резонансные переходы.

Представление виртуального спина для случая произвольной многоуровневой системы

Предложенный подход — представление виртуального спина, может быть использован для кодирования информации на произвольной многоуровневой квантовой системе. В этом случае предполагается, что известны собственные значения ε_M и соответствующие им собственные состояния $|\Psi_M\rangle$ ($0 \leq M \leq N - 1$) гамильтониана системы. Среди собственных состояний $|\Psi_M\rangle$ выберем 2^n ($2^n \leq N$) состояний. 2^n -мерное гильбертово пространство Γ , соответствующее выбранным состояниям, будем рассматривать как прямое произведение $\gamma_1 \otimes \gamma_2 \otimes \dots \otimes \gamma_n$ из n двумерных гильбертовых пространств γ_i виртуальных спинов $s_i = 1/2$. Каждому виртуальному спину поставим в соответствие кубит по принципу «один виртуальный спин — один кубит».

Определение. Виртуальным спином будем называть абстрактный объект, которому соответствует двумерное гильбертово пространство, полученное в результате представления 2^n -мерного гильбертова пространства состояний реальной физической системы в виде прямого произведения двумерных гильбертовых пространств.

Для воплощения квантовых гейтов необходимо возбуждать переходы между соответствующими состояниями физической системы. Однокубитный квантовый гейт, действующий на виртуальный спин с номером k , в пространстве Γ является последовательностью операторов

$$U_k = \prod_{j=0}^{2^{k-1}-1} \prod_{i=0}^{2^{n-k}-1} u_{i+j \cdot 2^{n-k+1}, i+2^{n-k}+j \cdot 2^{n-k+1}},$$

где $u_{e,f}$ — матрица размера $2^n \times 2^n$, все элементы которой равны 0, за исключением $u_{i,i} = 1$ ($i \neq e, f$) и элементы $u_{e,e}$, $u_{e,f}$, $u_{f,e}$, $u_{f,f}$ соответствуют элементам матрицы однокубитного квантового гейта.

Двухкубитные квантовые гейты $CNOT_{k \rightarrow l}$, действующий на виртуальные спины с номерами k (контролирующий) и l (контролируемый) ($k < l$), и $CNOT_{l \rightarrow k}$, действующий на виртуальные спины с номерами l (контролирующий) и k (контролируемый) ($k < l$), являются преобразованиями

$$V_{kl} = \prod_{g=0}^{2^{k-1}-1} \prod_{j=0}^{2^{l-k}-1} \prod_{i=0}^{2^{n-l}-1} v_{i+2^{n-k}+j \cdot 2^{n-l-1}+g \cdot 2^{n-k+1}, i+2^{n-k}+2^{n-l}+j \cdot 2^{n-l-1}+g \cdot 2^{n-k+1}},$$

$$V_{l,k} = \prod_{g=0}^{2^{k-1}-1} \prod_{j=0}^{2^{l-k-1}-1} \prod_{i=0}^{2^{n-l}-1} v_{i+2^{n-l}+j \cdot 2^{n-l+i}+g \cdot 2^{n-k+i}, i+2^{n-k}+2^{n-l}+j \cdot 2^{n-l+i}+g \cdot 2^{n-k+i}}.$$

где $v_{e,f}$ – матрица размера $2^n \times 2^n$, все элементы которой равны 0, за исключением $v_{i,i} = 1$ ($i \neq e, f$) и $v_{e,f} = v_{f,e} = 1$.

В частности, можно записать схемы реализации через пропагаторы импульсов (2) и (1) однокубитной операции поворота и квантового гейта *CNOT*, составляющих универсальный набор,

$$X_k(\varphi) = \prod_{j=0}^{2^{k-1}-1} \prod_{i=0}^{2^{n-k}-1} X_{i+j \cdot 2^{n-k+i}, i+2^{n-k}+j \cdot 2^{n-k+i}}(\varphi, 0),$$

$$Y_k(\varphi) = \prod_{j=0}^{2^{k-1}-1} \prod_{i=0}^{2^{n-k}-1} Y_{i+j \cdot 2^{n-k+i}, i+2^{n-k}+j \cdot 2^{n-k+i}}(\varphi, 0),$$

$$\text{CNOT}_{k \rightarrow l} = \prod_{g=0}^{2^{k-1}-1} \prod_{j=0}^{2^{l-k-1}-1} \prod_{i=0}^{2^{n-l}-1} X_{i+(1+2g)2^{n-k}+j \cdot 2^{n-l+i}, i+(1+2g)2^{n-k}+(1+2j)2^{n-l}}(\pi, 0),$$

$$\text{CNOT}_{l \rightarrow k} = \prod_{g=0}^{2^{k-1}-1} \prod_{j=0}^{2^{l-k-1}-1} \prod_{i=0}^{2^{n-l}-1} X_{i+(1+2j)2^{n-l}+g \cdot 2^{n-k+i}, i+(1+2g)2^{n-k}+(1+2j)2^{n-l}}(\pi, 0).$$

Таким образом многоуровневая квантовая система рассматривается как совокупность двухуровневых систем – кубитов, что позволяет без модификации использовать квантовые алгоритмы, разработанные ранее для кубитов.

Квантовые вычисления на состояниях модели равных спин-спиновых взаимодействий

При изучении ЯМР протонов в молекулах нематического жидкого кристалла был экспериментально продемонстрирован новый спектр ЯМР, состоящий из множества (до 1024) узких хорошо разрешенных резонансных линий на месте обычно наблюдаемой единой уширенной спин-спиновым взаимодействием резонансной линии [6]. Оказалось возможным по желанию возбуждать или не возбуждать ту или иную узкую линию и таким образом записывать информацию. Поиск возможностей использовать такой обширный спектр для квантовых вычислений представляется чрезвычайно интересной и настолько же трудной задачей. Одна из возможных интерпретаций физической природы узких линий состоит в предположении, что они создаются резонансными переходами между уровнями энергии ядерных спинов молекулы, расцепленных магнитным диполь-дипольным взаимодействием.

Гамильтониан парамагнетика (электронного и ядерного) имеет вид [7]

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_{dd}, \quad (3)$$

$$\mathcal{H}_z = \hbar\omega_0 \sum_i \mathbf{S}_i^z, \quad \mathcal{H}_d = \hbar \sum_{i < j} A_{ij} \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_j^z, \quad \mathcal{H}_{dd} = \hbar \sum_{i < j} B_{ij} (\mathbf{S}_i^+ \mathbf{S}_j^- + \mathbf{S}_i^- \mathbf{S}_j^+),$$

$$\mathbf{S}^z = S^z \pm i\mathbf{S}^y, \quad A_{ij} = \tilde{A}_{ij} + J_{ij}, \quad \tilde{A}_{ij} = (\hbar\gamma^2/2R_{ij}^3)(1 - 3\cos\theta_{ij}), \\ B_{ij} = (-1/4)\tilde{A}_{ij} + (1/2)J_{ij},$$

где \mathbf{S}_i^a - a -компонента спина \mathbf{S}_i ($a = x, y, z$), расположенного в точке i , $(R_{ij}, \theta_{ij}, \varphi_{ij})$ - сферические координаты вектора, соединяющего точки расположения спинов i и j в лабораторной системе координат с осью z , параллельной постоянному магнитному полю H_0 , γ - гиромагнитное отношение, $\omega_0 = -\gamma H_0$ - зееманова частота, J_{ij} - обменный интеграл. В выражении (3) приведена только секулярная часть спин-спинового и обменного взаимодействий, которая в силу коммутации с основным гамильтонианом \mathcal{H}_z вносит существенно больший вклад в динамику и кинетику спин-систем, чем остальные части спин-спинового взаимодействия.

Жидкий кристалл, в котором наблюдался мультиплетный спектр, состоит из частично ориентированных молекул, каждая из которых содержит $n = 19$ взаимодействующих протонов, а межмолекулярное спин-спиновое взаимодействие пренебрежимо мало. Речь идет, таким образом, об определении более подмиллиона квантовых состояний, то есть о совершенно бесперспективной задаче для точного решения. Кроме того, необходимо отметить, что при определенных значениях углов θ_{ij} взаимодействие между близлежащими спинами может оказаться меньше, чем между отдаленными спинами. К тому же сама ориентация спинов в пространстве зафиксирована не точно, и в качестве констант взаимодействия фигурируют не подлинные значения, а их не усредненная тепловым движением часть. Это усреднение спин-спинового взаимодействия для протонов, расположенных в разных частях молекулы, не одинаково: в более подвижных фрагментах эффект усреднения значительнее. Следовательно, продвижение возможно лишь с помощью теоретической модели, упрощающей задачу, но сохраняющей при этом ее основные черты. По нашему мнению, такой моделью может служить модель *равных спин-спиновых взаимодействий* (РССВ) с гамильтонианом

$$\mathcal{H}^* = \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_d^* + \mathcal{H}_{dd}^*, \quad (4)$$

$$\mathcal{H}_z = \hbar\omega_0 \sum_i \mathbf{S}_i^z, \quad \mathcal{H}_d^* = \hbar A \sum_{i < j} \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_j^z, \quad \mathcal{H}_{dd}^* = \hbar B \sum_{i < j} (\mathbf{S}_i^+ \mathbf{S}_j^- + \mathbf{S}_i^- \mathbf{S}_j^+),$$

где A и B есть средние значения параметров A_{ij} и B_{ij} для молекулы. Усредненные константы A и B описывают взаимодействие выбранного спина со

всеми остальными, сохраняя различия между продольными (A) и поперечными (B) спиновыми компонентами.

Для модели РССВ получены следующие результаты: число различных собственных значений $r(n, p)$, величины неэквивалентных собственных значений $E_k(n, p)$, кратности их вырождения $g_k(n, p)$ и соответствующие им собственные функции $|\Psi_\beta(n, p)\rangle$, относительные величины вероятностей перехода между состояниями модели под влиянием переменного магнитного поля $W_{(n,p,k) \rightarrow (n,p\pm 1,k\pm 1)}$

$$r(n, p) = r(n, n - p) = p + 1,$$

$$E_k(n, p) = E_k(n, n - p) = \hbar\omega_0(n - 2p)/2 + \hbar A(4p^2 - 4np + n^2 - n)/8 + \hbar B(k^2 + k(n - 2p + 1) - p),$$

$$g_k(n, p) = g_k(n, n - p) = C_{p-k}^m - C_{p-k-1}^m,$$

$$W_{(n,p,k) \rightarrow (n,p\pm 1,k\pm 1)} = W_{(n,n-p,k) \rightarrow (n,n-p\pm 1,k\pm 1)} \propto k^2 + k(n - 2p + 1) + n - 2p,$$

где n - полное число взаимодействующих спинов $1/2$, p - число спинов, ориентированных против магнитного поля, $0 \leq p \leq \lfloor n/2 \rfloor$, $0 \leq k \leq p$.

На Рис. 6 представлен спектр системы из $n = 7$ семи спинов $1/2$, связанных РССВ. Указаны положение зеемановских уровней (ω_0), их смещение, выраженное через A и B , в скобках приведены оставшиеся вырождения уровней, правый ряд содержит обозначения собственных функций этих состояний. стрелками показаны разрешенные резонансные переходы, цифрами около стрелок их относительная вероятность. Из Рис. 6 видно, что РССВ частично снимает вырождение восьми зеемановских уровней энергии системы, расщепляя их на двадцать

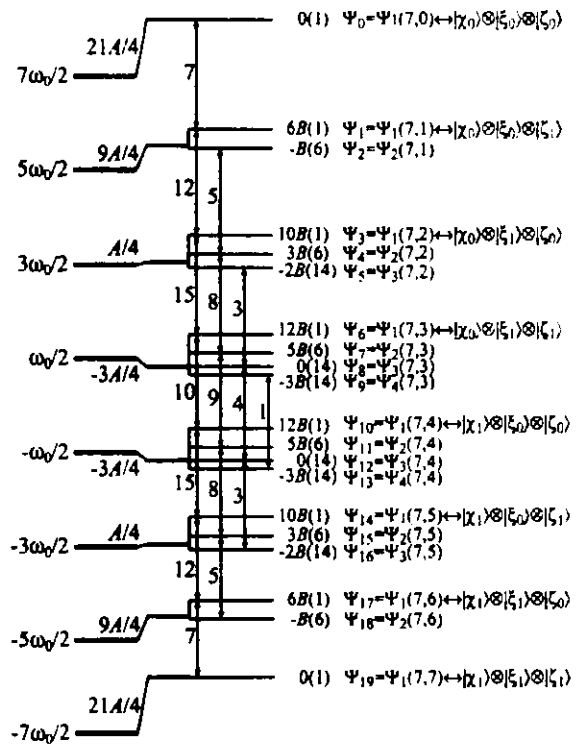


Рис. 6. Спектр системы из $n = 7$ спинов $1/2$, связанных РССВ.

частично вырожденных уровней. Крайние ланмановские уровни энергии являются изначально невырожденными, а по мере приближения к центру спектра они расщепляются на два, три и четыре подуровня, каждый со своим вырождением. С точки зрения резонансных переходов уровни энергии расщепленного спектра распадаются на группы: одна из которых содержит восемь связанных переходами уровней, вторая – шесть, третья – четыре и четвертая – два. Переходы между разными группами уровней запрещены. На группах состояний могут быть введены четыре независимые группы кубитов – одна группа из трех кубитов, две группы из двух кубитов и один кубит. Рассмотрим группу из восьми состояний, связанных резонансными переходами, сопоставим этим состояниям изоморфно прямые произведения $|\xi_k\rangle \otimes |\zeta_m\rangle \otimes |\chi_n\rangle$ состояний трех виртуальных спинов q , r и s (Рис. 6). Возбуждение резонансных переходов между состояниями $|\Psi_M\rangle$ спин-системы трансформирует состояния виртуальных спинов. Для воплощения квантовых гейтов необходимо подобрать такое физическое воздействие на состояния $|\Psi_M\rangle$, чтобы в базисе состояний виртуальных спинов оно соответствовало квантовым гейтам, например, могут быть использованы схемы реализации, предложенные выше.

Основные результаты и выводы

1. Показано, что двух- и трехкубитный квантовые компьютеры (в рамках математической модели квантового компьютера – модели квантовых схем) могут быть построены на квадрупольных ядрах со спином $3/2$ и $7/2$, соответственно. Предложены схемы реализации одно-, двух- и трехкубитных квантовых гейтов в представлении виртуального спина. Предложенные схемы реализуют квантовые гейты точно (с точностью до фазового множителя). Разработаны схемы реализации квантовых алгоритмов Дойча-Джозса и Гровера с псевдочистым, парой псевдочистых и термодинамически равновесным начальными состояниями.
2. Обобщено понятие виртуального спина на случай квантовой системы с произвольным числом уровней энергии и предложены схемы реализации универсального набора квантовых гейтов.
3. Исследована математическая модель равных спин-спиновых взаимодействий. Найдены энергетический спектр гамильтониана модели и относительные вероятности резонансных переходов между его уровнями под влиянием резонансного магнитного поля без ограничения числа спинов и значений параметров модели.
4. На состояниях модели равных спин-спиновых взаимодействий осуществлено кодирование кубитов в представлении виртуального спина.

Список цитированной литературы

- [1] *Валиев. К.А.* Квантовые компьютеры: надежды и реальность / К.А. Валиев, А.А. Кокин. — Ижевск: РХД, 2001. — 352 с.
- [2] *Nielsen. M.A.* Quantum computation and quantum information / M.A. Nielsen, I.L. Chuang. — Cambridge: Cambridge University Press, 2000. — 676 pp.
- [3] *Кессель. А.Р.* Виртуальные кубиты - многоуровневость вместо многочастичности / А.Р. Кессель, В.Л. Ермаков // *ЖЭТФ*. — 2000. — Т. 117. № 3. — С. 517-525.
- [4] *Khitrin. A.K.* Nuclear magnetic resonance quantum logic gates using quadrupolar nuclei / A.K. Khitrin, B.M. Fung // *Journal of Chemical Physics*. — 2000. — Vol. 112. — P. 6963.
- [5] *Fung. B.M.* Use of pairs of pseudopure states for NMR quantum computing / B.M. Fung // *Physical Review A*. — 2001. — Vol. 63. — P. 022304.
- [6] *Khitrin. A.K.* Information storage using a cluster of dipolar-coupled spins / A.K. Khitrin, V.L. Ermakov, B.M. Fung // *Chemical Physics Letters*. — 2002. — Vol. 360. — Pp. 161-166.
- [7] *Абрагам. А.* Ядерный магнетизм / А. Абрагам. — М.: ИИЛ, 1963. — 552 с.

Список работ, опубликованных по теме диссертации

1. *Kessel. A.R.* Implementation schemes in NMR of quantum processors and the Deutsch-Jozsa algorithm by using virtual spin representation / A.R. Kessel, N.M. Yakovleva // *Physical Review A*. — 2002. — Vol. 66, no. 6. — Pp. 062322-1-062322-7.
2. *Yakovleva, N.M.* Implementation schemes of quantum gates on the states of discrete quantum system / N.M. Yakovleva, E.A. Tereshin // *Proc. SPIE*. — 2004. — Vol. 5402. — Pp. 140-144.
3. *Kessel, A.R.* Elements of quantum informatics on the states of equal spin-spin interactions model / A.R. Kessel, N.M. Yakovleva // *Proc. SPIE*. — 2004. — Vol. 5402. — Pp. 145-149.
4. *Кессель, А.Р.* Схемы реализации в ЯМР квантовых процессоров в представлении виртуального спина / А.Р. Кессель, Н.М. Яковлева // *Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского* 2002. Ежегодник. — Казань: ФизтехПресс, 2003. — С. 76-81.
5. *Кессель, А.Р.* Энергетический спектр гамильтониана равных спин-спиновых взаимодействий / А.Р. Кессель, Р.Р. Нигматуллин, Н.М. Яковлева // *Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского* 2002. Ежегодник. — Казань: ФизтехПресс, 2003. — С. 82-85.

6. *Kessel, A.R.* Scheme of experimental implementation of two-qubit Deutsch problem algorithm on the individual nuclear spin $1/2$ [A.R. Kessel, N.M. Yakovleva] // V International Congress on Mathematical Modelling, Book of Abstracts. - Dubna, 2002. - Vol. 1. - P. 94.
7. *Кессель, А.Р.* Реализация алгоритма квантового поиска на ядерном спине $3/2$ [А.Р. Кессель, Н.М. Яковлева] // Всероссийская научно-техническая конференция «Нейроинформатика-2003». Сборник научных трудов. - Москва, 2003. - Т. 2. - С. 63-70.
8. *Яковлева, Н.М.* Схемы реализации в ЯМР алгоритма квантового поиска в представлении виртуального спина [Н.М. Яковлева] // Конференция молодых ученых КФТИ КазНЦ РАН. Сборник трудов. - Казань, 2003. - С. 52-57.
9. *Яковлева, Н.М.* Схемы реализации в ЯМР трехкубитного алгоритма Гровера [Н.М. Яковлева] // VII Российская молодежная научная школа «Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений». Сборник трудов. - Казань, 2003. - С. 206-209.
10. *Яковлева, Н.М.* Схемы реализации в ЯМР алгоритмов Дойча-Джозса и Гровера на ядерном спине $7/2$ в представлении виртуального спина [Н.М. Яковлева] // VII Всероссийская молодежная научная школа «Когерентная оптика и оптическая спектроскопия». Сборник статей. - Казань, 2003. - С. 115-120.
11. *Yakovleva, N.M.* Implementation schemes in NMR of universal set of quantum gates by using virtual spin representation [N.M. Yakovleva] // VIII International youth scientific school «Actual problems of magnetic resonance and its application». Proceedings. - Kazan, 2004. - Pp. 110-113.



Отпечатано с готового оригинал-макета
в типографии Издательского центра
Казанского государственного университета
им. В.И.Ульянова-Ленина

Тираж 100 экз. Заказ 11/63

420008, г. Казань, ул. Университетская, 17
тел. 292-65-60, 231-53-59

