Письма в ЖЭТФ, том 71, вып.7, стр.443 - 447

ФИЗИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ТРЕХКУБИТНЫХ ВЕНТИЛЕЙ НА ОТДЕЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЕ

А.Р.Кессель, В.Л.Ермаков[1)]

Казанский физико-технический институт Казанского национального центра РАН

420029 Казань, Россия

Поступила в редакцию 15 февраля 2000 г.

На основе предложенного формализма виртуальных спинов показано, как одна квантовая частица, обладающая восемью подходящими дискретными уровнями энергии, может быть использована для хранения трех кубитов информации и организации на них универсального набора логических операций, необходимых для построения произвольного квантового алгоритма. Предложена практическая реализация формализма на ядерном спине 7/2, подверженном воздействию резонансных РЧ импульсов и найдена возможность одноимпульсной реализации всех квантовых вентилей универсального набора, включая трехкубитный вентиль.

PACS: 03.65.-w, 76.60.-k

В теории вычислений было показано, что классический обратимый компьютер может быть построен на основе универсального трехкубитного вентиля CCNOT (controlled controlled NOT) или "дважды контролируемого отрицания" [1]. В квантовой информатике обобщением вентиля CCNOT служит вентиль CCUT (controlled controlled unitary transformation) – "дважды контролируемое унитарное преобразование" [2]. CCUT является трехкубитным вентилем, в котором к контролируемому кубиту применяется операция произвольного унитарного вращения тогда и только тогда, когда два контролирующих кубита находятся в состоянии $|1>$. При поворотах на определенный угол ($\varphi_{min} = \pi$, см. ниже (4)) вентиль CCUT переходит в CCNOT. Однако реализовать операцию CCUT оказалось сложным, поскольку в природе отсутствует трехчастичное взаимодействие. Был найден обходный путь [3]: оказалось возможным реализовать CCUT составным способом из пяти двухкубитных вентилей. Такой способ был реализован в ЯМР с использованием многоимпульсной последовательности в системе из трех спинов 1/2 (уравнения (38) и (39) в [4]).

В данной работе на основе предложенного ранее формализма виртуальных спинов [5] найдена возможность практической реализации вентиля CCUT простейшим способом – одним импульсом на одной квантовой частице. В случае реализации преимущества такого устройства очевидны.

Запись вентилей в представлении трех спинов 1/2 в терминах квантовой информатики. В квантовой информатике для построения трехкубитных вентилей используется гильбертово пространство Γ, организованное как прямое произведение $\Gamma = \Gamma_Q \otimes \Gamma_R \otimes \Gamma_S$ гильбертовых пространств трех реальных спинов Q, R, S, равных 1/2. Базисом пространства Γ можно выбрать восемь функций:

$$|0>=|000>, \quad |1>=|001>, \quad |2>=|010>, \quad |3>=|011>,$$

$$|4>=|100>, \quad |5>=|101>, \quad |6>=|110>, \quad |7>=|111>,$$

1) e-mail: ermakov@sci.kcn.ru

где $|M>=|m_Q, m_R, m_S>$, например, $|5>=|m_Q=+1/2, m_R=-1/2, m_S=+1/2>$ и т.д.

Сосредоточим внимание на всевозможных вентилях, основанных на операции NOT. В системе из трех спинов существуют три операции "отрицания" – NOT на отдельных спинах, оставляющие состояния двух других спинов неизменными:

$$\mathrm{NOT}_Q=|1m_Rm_S><0m_Rm_S|+|0m_Rm_S><1m_Rm_S|,$$

$$\mathrm{NOT}_R=|m_Q1m_S><m_Q0m_S|+|m_Q0m_S><m_Q1m_S|,$$

$$\mathrm{NOT}_S=|m_Qm_R1><m_Qm_R0|+|m_Qm_R0><m_Qm_R1|.$$

Далее можно ввести шесть операций "контролируемого отрицания" – CNOT. Например, когда состояние спина Q контролируется состоянием спина R:

$$\mathrm{CNOT}_{R\to Q}=|00m_S><00m_S|+$$

$$+|11m_S><01m_S|+|10m_S><10m_S|+|01m_S><11m_S|.$$

В обратной ситуации

$$\mathrm{CNOT}_{Q\to R}=|00m_S><00m_S|+|01m_S><01m_S|+$$

$$+|11m_S><10m_S|+|10m_S><11m_S|.$$

Аналогичным образом строятся операции CNOT для пар RS и QS.

Кроме того, могут использоваться три операции CCNOT. Например, когда состояние спина S контролируется состояниями Q и R:

$$\mathrm{CCNOT}_{Q,R\to S}=|000><000|+|001><001|+|010><010|+|011><011|+$$

$$+|100><100|+|101><101|+|111><110|+|110><111|.$$

Аналогичным образом строятся операции CCNOT для спинов Q и R.

Формализм виртуальных спинов. В существующих реализациях квантовых вентилей на ЯМР однокубитная операция NOT реализуется с помощью вращения спина резонансными РЧ импульсами. Условная спиновая динамика, необходимая для двухкубитной операции CNOT, требует наличия двухчастичного спин-спинового взаимодействия [4].

Условную квантовую динамику можно реализовать на отдельном спине 7/2 без привлечения спин-спиновых взаимодействий. Важно, кроме того, что операция CCNOT реализуется с помощью одного РЧ импульса. Это осуществляется благодаря специальному кодированию информации на состояниях спина 7/2 посредством применения введенного в [5] формализма виртуальных спинов.

Базисом гильбертова пространства $\Gamma_{7/2}$ спина 7/2 могут служить собственные функции χ_m оператора $\mathbf{I}_z$ $(m=\pm1/2,\pm3/2,\pm5/2,\pm7/2)$ или определенные ниже собственные функции $|\psi_m>$ оператора спиновой энергии. Если вместо индексов $m=-7/2,-5/2,-3/2,-1/2,+1/2,+3/2,+5/2,+7/2$ использовать обозначения $M=0,1,2,3,4,5,6,7$, то базису $|\psi_M>$ можно поставить в изоморфное соответствие функции $|M>=|m_Q, m_R, m_S>$ виртуальных спинов Q, R, S, равных 1/2. Отсюда вытекает, что для реализации вышеуказанных вентилей необходимо найти такое внешнее воздействие на реальный спин 7/2, для которого матрица оператора эволюции в базисе $|\psi_M >$ совпадает с приведенными выше выражениями для вентилей в базисе $|M >$.

Спин 7/2 и физическая реализация вентилей. Рассмотрим спектр магнитного резонанса ядерного спина $I = 7/2$, помещенного в постоянное магнитное поле H_0 и аксиально-симметричное электрическое кристаллическое поле:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_z + \mathbf{H}_Q, \quad \mathbf{H}_z = -\hbar\omega_0 \mathbf{I}_z, \quad \mathbf{H}_Q = (1/2)\hbar\omega_Q \Sigma_{\alpha=0,\pm1,\pm2} Q_\alpha q_{-\alpha},$$

$$\mathbf{Q}_0 = \mathbf{I}_z^2 - I(I+1)/3, \quad \mathbf{Q}_{\pm1} = \mathbf{I}_z\mathbf{I}_{\pm1} + \mathbf{I}_{\pm1}\mathbf{I}_z, \quad \mathbf{Q}_{\pm2} = \mathbf{I}_{\pm1}^2, \tag{1}$$

$$q_0 = 3\cos^2\theta - 1, \quad q_{\pm1} = \sin\theta\cos\theta\exp(\pm i\varphi), \quad q_{\pm2} = (1/2)\sin2\theta\exp(\pm i2\varphi),$$

$$\omega_Q = 3e2qQ/[4I(2I-1)\hbar], \quad \mathbf{I}_{\pm1} = \mathbf{I}_x \pm i\mathbf{I}_y,$$

где e – заряд электрона, Q – квадрупольный момент ядра, $\mathbf{I}_\beta$ $(\beta = x, y, z)$ – пространственные компоненты вектора спина, $2eq$ – абсолютная величина градиента электрического кристаллического поля, θ и φ – полярные углы, определяющие ориентацию его оси симметрии в лабораторной системе координат. Для конкретности рассмотрим случай, когда квадрупольное взаимодействие мало по сравнению с зеемановой энергией, и его вклад может быть рассмотрен по теории возмущений. Тем не менее, предполагается, что квадрупольное взаимодействие существенно превосходит ширины спиновых уровней энергии, так что стационарный спектр спинового резонансного поглощения состоит из семи хорошо разрешенных резонансных линий, разделенных частотным интервалом порядка квадрупольного взаимодействия ω_Q.

В первом приближении спиновые уровни энергии и собственные функции равны

$$E_m \equiv \hbar\epsilon_m = -\hbar\omega_0 m + \hbar\omega_Q q_0(m^2 - 21/4),$$

$$|\psi_m >= \chi_m + \Sigma_{m\neq k} < \chi_k|\mathbf{H}_Q|\chi_m > /\hbar\omega_0(k-m)\chi_k, \tag{2}$$

Отметим, что нормировочный множитель функции $|m >$ опущен.

Для простоты записи будем использовать представление спиновых операторов через проективные операторы $\mathbf{P}_{mn}$, которые являются матрицами размером 8×8 со всеми матричными элементами p_{kl}, равными нулю, кроме одного: $p_{mn} = 1$. Проективные операторы имеют предельно простые свойства:

$$\mathbf{P}_{kl}\mathbf{P}_{mn} = \delta_{lm}\mathbf{P}_{kn}, \quad \mathbf{P}_{mn} = \mathbf{P}_{nm}^+, \quad \mathbf{P}_{mn}|\Psi_k >= \delta_{nk}|\Psi_m > . \tag{3}$$

Оператор эволюции спиновых состояний под влиянием РЧ импульса, вызывающего резонансные переходы между уровнями энергии E_m и E_n $(E_m > E_n)$, дается выражением [5]

$$\mathbf{V}_X(\varphi_{mn}, f) = \mathbb{I} + (\mathbf{P}_{nn} + \mathbf{P}_{mm})[\cos(\varphi_{mn}/2) - 1] + i(\mathbf{P}_{mn}e^{if} + \mathbf{P}_{nm}e^{-if})\sin(\varphi_{mn}/2), \ \mathbb{I}$$

$$\varphi_{mn} = 2(t - t_0)\gamma H_{rf}| < n|\mathbf{I}_x|m > |, \quad \mathbb{I} = \Sigma_m \mathbf{P}_{mm}, \tag{4}$$

где предполагается, что переменное магнитное поле направлено вдоль оси X, а H_{rf}, f и Ω $(= \Omega_{mn} \equiv (E_m - E_n)/\hbar)$ – его амплитуда, фаза и частота, и $\mathbb{I}$ – операторная единица в пространстве $\Gamma_{7/2}$. После замены f на $f + \pi/2$ выражение (4) остается справедливым и в том случае, когда переменное поле направлено вдоль оси Y.

Рассмотрим реализацию на физических состояниях отдельного спина 7/2 введенных выше информационных вентилей в порядке возрастания их сложности.

Для операции CCNOT требуется воздействовать одним одночастотным импульсом. Например, операция $\mathrm{CCNOT}_{Q,R\to S}$ осуществляется импульсом на частоте Ω_{67}, выполняющим поворот на угол π. Оператор эволюции в этом случае имеет вид

$$\mathbf{V}_X(\pi_{67}, 0) = \mathbb{I} - (\mathbf{P}_{77} + \mathbf{P}_{66}) + i(\mathbf{P}_{67} + \mathbf{P}_{76}).$$

Используя указанный изоморфизм, можно видеть, что, например, выполняется равенство

$$\mathbf{P}_{67} + \mathbf{P}_{76} = |6 >< 7| + |7 >< 6| = |110 >< 111| + |111 >< 110|,$$

благодаря чему матрица оператора эволюции $\mathbf{V}_X(\pi_{67}, 0)$ совпадает с матрицей операции $\mathrm{CCNOT}_{Q,R\to S}$:

$$\mathbf{V}_X(\pi_{67}, 0) = \mathrm{CCNOT}_{Q,R\to S} \tag{5}$$

с точностью до фазового множителя i, стоящего перед недиагональными операторами. Аналогичным образом

$$\mathbf{V}_X(\pi_{75}, 0) = \mathrm{CCNOT}_{Q,S\to R}, \quad \mathbf{V}_X(\pi_{73}, 0) = \mathrm{CCNOT}_{R,S\to Q}. \tag{6}$$

Отметим, что в отличие от резонансного перехода на частоте Ω_{67}, переходы на частотах Ω_{57} и Ω_{47} между состояниями χ_M являются запрещенными и становятся отличными от нуля в первом приближении по параметру ω_Q/ω_0. Поэтому для осуществления поворота на угол π в этих случаях требуются большие длительность импульса или амплитуда переменного поля. Численный расчет показывает, что когда зеемана и квадрупольная энергии сравнимы по величине, все требуемые углы поворота содержат матричные элементы одного порядка.

Операция CNOT требует одного двухчастотного импульса, оператор эволюции для которого является произведением двух следующих операторов:

$$\begin{gathered}
\mathbf{V}_X(\pi_{23}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{67}, 0) = \mathrm{CNOT}_{R\to S}, \quad \mathbf{V}_X(\pi_{13}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{57}, 0) = \mathrm{CNOT}_{S\to R}, \\
\mathbf{V}_X(\pi_{45}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{67}, 0) = \mathrm{CNOT}_{Q\to S}, \quad \mathbf{V}_X(\pi_{13}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{57}, 0) = \mathrm{CNOT}_{S\to Q}, \\
\mathbf{V}_X(\pi_{46}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{57}, 0) = \mathrm{CNOT}_{Q\to R}, \quad \mathbf{V}_X(\pi_{26}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{37}, 0) = \mathrm{CNOT}_{R\to Q}.
\end{gathered} \tag{7}$$

Операция NOT требует одного четырехчастотного импульса, оператор эволюции для которого является произведением четырех следующих операторов:

$$\begin{gathered}
\mathbf{V}_X(\pi_{04}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{15}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{26}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{37}, 0) = \mathrm{NOT}_Q, \\
\mathbf{V}_X(\pi_{02}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{13}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{46}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{57}, 0) = \mathrm{NOT}_R, \\
\mathbf{V}_X(\pi_{01}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{23}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{45}, 0)\mathbf{V}_X(\pi_{67}, 0) = \mathrm{NOT}_S.
\end{gathered} \tag{8}$$

Найденная физическая реализация вентилей, задаваемая выражениями (5)–(8), отличается от принятой в квантовой информатике формы фазовыми множителями i перед недиагональными проективными операторами. Это обстоятельство необходимо будет учитывать при создании сложных алгоритмов.

Выше для упрощения записи были использованы конкретные значения параметров φ и f в операторах эволюции. Легко обобщить полученные выражения (5)–(8) для вентилей CCNOT, CNOT, NOT на выражения для CCUT, CUT, UT. Если, например, использовать оператор эволюции (4) с произвольными параметрами φ и f, то найденное выражение (5) для оператора CCNOT даст выражение для CCUT, и аналогичным образом для других логических операций.

---

1. T.Toffoli, in: *Automata, Languages and Programmig*, Eds. J.W.de Bakker and J.van Leeuwen, Springer-Verlag, 1980, p.632.
2. D.Deutsch, Proc. Roy. Soc. Lond. **A425**, 73 (1989).
3. A.Barenco, C.H.Bennett, R.Cleve et al., Phys. Rev. **A52**, 3457 (1995); quant-ph/9503016.
4. D.G.Cory, M.D.Price, and T.F.Havel, Physica **D120**, 82 (1998); quant-ph/9709001.
5. А.Р.Кессель, В. .Ермаков, Письма в ЖЭТФ **70**, 59 (1999); quant-ph/9912047.