Письма в ЖЭТФ, том 70, вып.1, стр.59 - 63

МНОГОКУБИТНЫЙ СПИН

А.Р.Кессель, В.Л.Ермаков[1)]

Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН

420029 Казань, Россия

Поступила в редакцию 29 апреля 1999 г.

После переработки 2 июня 1999 г.

На примере ядерного спина 3/2 предлагается использовать пространство состояний квантовых объектов со сложным дискретным спектром в качестве базы для многокубитной записи и обработки информации в квантовом компьютере. Демонстрируются возможности записи и считывания двух квантовых бит информации, приготовления исходного состояния, а также реализация операций "вращения" и "контролируемого отрицания", достаточных для построения сложных алгоритмов.

PACS: 03.65.-w, 03.67.-a, 76.60.-k

Рассмотрим ядро со спином $I = 3/2$ и электрическим квадрупольным моментом, находящееся в аксиально симметричном кристаллическом электрическом поле и постоянном магнитном поле, параллельном оси симметрии. Будем считать, что зееманова энергия превосходит квадрупольную, тогда ядро обладает четырьмя неэквидистантными спиновыми уровнями энергии E_m и собственными функциями χ_m $(m = \pm 3/2, \pm 1/2)$, которые являются собственными функциями z-компоненты $\mathbf{I}_z$ ядерного спина $\mathbf{I}$.

Пусть на спин действует поляризованное вдоль оси y радиочастотное (РЧ) поле $2H_a \cos \Omega_a t$, резонансное для некоторой пары уровней энергии: $\hbar\Omega_a = E_m - E_n$. Оператор взаимодействия с этим полем H_a в представлении взаимодействия содержит не зависящее от времени слагаемое $H_{a,eff} = \hbar\gamma H_a[\langle m|I_Y|n\rangle \mathbf{P}_{mn} + \langle n|I_Y|m\rangle \mathbf{P}_{nm}]$ и быстро осциллирующие (на частотах, кратных Ω_a и $(E_k - E_1)/\hbar$) слагаемые, роль которых в эволюции спиновых состояний пренебрежима. (Здесь и в дальнейшем для простоты записи будет использоваться представление проективных операторов $\mathbf{P}_{mn}$ матрицами размером 4×4 с матричными элементами p_{kl}, равными нулю, кроме одного $p_{mn} = 1$. Применение проективных операторов весьма удобно благодаря их предельно простым свойствам: $\mathbf{P}_{kl}\mathbf{P}_{mn} = \delta_{lm}\mathbf{P}_{kn}$, $\mathbf{P}_{mn}\chi_k = \delta_{nk}\chi_m$. Кроме того в качестве индексов –3/2, –1/2, +1/2, +3/2 будут использоваться 1, 2, 3, 4, соответственно.)

Оператор эволюции спиновых состояний под влиянием взаимодействия $H_{a,eff}$ дается выражением

$$\mathbf{U}(\varphi_a) = [\mathbf{P}_{mn} + \mathbf{P}_{nn}]\cos(\varphi_a/2) + [\mathbf{P}_{kk} + \mathbf{P}_{ll}] + [\mathbf{P}_{nm} - \mathbf{P}_{mn}]\sin(\varphi_a/2), \qquad (1)$$

где $\varphi_a = 2(\gamma H_a t)|\langle m|\mathbf{I}_Y|n\rangle|$, $E_m > E_n$ и индексы $k, l \neq m, n$. В том случае, когда РЧ поле $2H_f \cos \Omega_{mn} t$ поляризовано вдоль оси x, оператором эволюции является

$$U_f(\varphi_f) = [\mathbf{P}_{mm} + \mathbf{P}_{nn}]\cos(\varphi_f/2) + [\mathbf{P}_{kk} + \mathbf{P}_{ll}] + i[\mathbf{P}_{nm} + \mathbf{P}_{mn}]\sin(\varphi_f/2), \qquad (1a)$$

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

где $\varphi_f = 2(\gamma H_f t)|\langle m|\mathbf{I}_X|n\rangle|$.

В качестве базиса для конструирования квантовых логических элементов в принятой сейчас ЯМР модели квантового компьютера [1 – 4] рассматриваются два *реальных* спина $R = 1/2$ и $S = 1/2$, связанных обменным взаимодействием. В формализме квантовой механики состояния такой системы и операции над ними записываются в *абстрактном* четырехмерном пространстве, являющемся прямым произведением $\Gamma_R \otimes \Gamma_S$ двухмерных пространств собственных состояний *реальных* спинов $\mathbf{R}$ и $\mathbf{S}$. В нашем случае для пояснения информационного аспекта предлагаемых логических операций удобно осуществить обратную процедуру: представить четырехмерное пространство Γ_I, соответствующее *реальному* спину 3/2, как прямое произведение $\Gamma_R \otimes \Gamma_S$ двух *абстрактных* двухмерных пространств состояний *фиктивных* спинов $\mathbf{R}$ и $\mathbf{S}$. Тогда любой оператор $\mathbf{P}$ в четырехмерном базисе может быть выражен в виде линейной комбинации прямых произведений $\mathbf{R} \otimes \mathbf{S}$ операторов, заданных в подпространствах Γ_R и Γ_S. Между базисом $|m\rangle$ пространства Γ_I и базисом $|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$ прямого произведения $\Gamma_R \otimes \Gamma_S$ имеет место следующее изоморфное соответствие:

$$|\chi_1\rangle \propto |-1/2\rangle|-1/2\rangle \equiv |11\rangle, \quad |\chi_3\rangle \propto |+1/2\rangle|-1/2\rangle \equiv |01\rangle,$$

$$|\chi_2\rangle \propto |-1/2\rangle|+1/2\rangle \equiv |10\rangle, \quad |\chi_4\rangle \propto |+1/2\rangle|+1/2\rangle \equiv |00\rangle,$$

где $|10\rangle$ и так далее есть обозначения, принятые в теории информации для представления состояния двух квантовых бит (Q-бит). Энергии, соответствующие этим состояниям, удовлетворяют неравенствам $E_1 > E_2 > E_3 > E_4$.

Как известно, исходным состоянием для квантовых алгоритмов, создаваемых на абстрактном квантовом компьютере, является состояние $|00\rangle \propto |\chi_4\rangle$. Эквивалентом состояния $|00\rangle$ с точки зрения последующих квантовых вычислений является [2, 3] спиновая матрица плотности

$$\rho_{init} = \mathrm{const}[\mathbf{1} + \mathrm{const} \cdot \mathbf{P}_{44}], \tag{2}$$

где $\mathbf{1}$ – единичная матрица в пространстве Γ_I. Она не меняется под влиянием унитарных вычислительных преобразований и не дает вклада в наблюдаемый сигнал при считывании результата.

В образце макроскопических размеров совокупность подобных ядер образует ансамбль, спиновые уровни которого в равновесии заселены согласно больцмановскому распределению:

$$\rho_{eq} = Z \exp(-\beta\mathbf{H}), \quad Z^{-1} = \mathrm{Sp}[\exp(-\beta\mathbf{H})], \quad \beta = 1/kT, \tag{3}$$

причем относительная разница заселенностей спиновых уровней обычно не превышает при комнатной температуре величины порядка $10^{-5} \div 10^{-6}$. Поэтому прямое получение состояния $\rho_{init} = \mathrm{const} \cdot \mathbf{P}_{44}$ посредством охлаждения требует очень низких температур, что, помимо существенных технологических трудностей, скажется на скорости всего цикла вычислений.

Предлагается процедура, идейно восходящая к работе [3]. Пусть необходимое вычисление состоит в проведении преобразования $\mathbf{U}_{comp}$ состояния ρ_{init}, тогда как спиновая система находится в состоянии, задаваемом матрицей плотности (3), которая в высокотемпературном приближении равна

$$\rho_{eq} = Z[\mathbf{1} + \Sigma\lambda_m \mathbf{P}_{mm}], \quad \mathbf{1} = \Sigma\mathbf{P}_{mm}, \tag{4}$$

где $\lambda_m = E_m/kT$ и $m = 1,2,3,4$. Покажем, что сумма результатов трех специальным образом заданных преобразований состояния ρ_{eq} эквивалентна преобразованию состояния ρ_{init}. Действительно, пусть требуется провести некоторое вычисление, являющееся унитарным преобразованием $\mathbf{U}_{comp}$ состояний спина **I**. Определим унитарные преобразования

$$\mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_a(\pi)\mathbf{U}_b(\pi) = \mathbf{P}_{13} + \mathbf{P}_{21} + \mathbf{P}_{32} + \mathbf{P}_{44},$$

$$\mathbf{U}_2 = \mathbf{U}_b(\pi)\mathbf{U}_a(\pi) = -\mathbf{P}_{12} - \mathbf{P}_{23} + \mathbf{P}_{31} + \mathbf{P}_{44},$$

где $\mathbf{U}_a(\pi)$ есть пропагатор (1), взятый для импульсного РЧ поля на частоте $\Omega_a = (E_1 - E_2)/\hbar$, осуществляющего поворот на угол $\varphi = \pi$, а $\mathbf{U}_b(\pi)$ – то же для резонансного РЧ импульса на частоте $\Omega_b = (E_2 - E_3)/\hbar$. Можно проверить, что среднее от трех преобразований $\mathbf{U}_{comp}$, $\mathbf{U}_{comp}\mathbf{U}_1$ и $\mathbf{U}_{comp}\mathbf{U}_2$,

$$(1/3)[\mathbf{U}_{comp}\rho_{eq}\mathbf{U}^\dagger_{comp} + \mathbf{U}_{comp}\mathbf{U}_1\rho_{eq}\mathbf{U}^\dagger_1\mathbf{U}^\dagger_{comp} + \mathbf{U}_{comp}\mathbf{U}_2\rho_{eq}\mathbf{U}^\dagger_2\mathbf{U}^\dagger_{comp}] =$$

$$(1/3)\mathbf{U}_{comp}(\rho_{eq} + \mathbf{U}_1\rho_{eq}\mathbf{U}^\dagger_1 + \mathbf{U}_2\rho_{eq}\mathbf{U}^\dagger_2)\mathbf{U}^\dagger_{comp} = \mathbf{U}_{comp}\rho_{init}\mathbf{U}^\dagger_{comp},$$

есть вычисление $\mathbf{U}_{comp}$ над матрицей плотности

$$\rho_{init} = Z[\alpha\mathbf{1} + \beta\mathbf{P}_{44}], \tag{5}$$

где $\alpha = 1 + 1/3[\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3]$, $\beta = \lambda_4 - 1/3[\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3]$.

Определим вращение на некоторый угол в пространстве Γ_S при условии инвариантности пространства Γ_R. Это может быть осуществлено воздействием на спин I двухчастотным РЧ импульсом, содержащим резонансные частоты $\Omega_a = (E_1 - E_2)/\hbar$ и $\Omega_c = (E_3 - E_4)/\hbar$. Пропагатор такого преобразования в пространстве Γ_1 будет равен сумме пропагаторов вида (1), которые осуществляют поворот на одинаковый угол $\varphi_a = \varphi_c = \varphi$ на каждом переходе:

$$\mathbf{U}_{a+c}(\varphi,\varphi) = \mathbf{1}\cos(\varphi/2) + [\mathbf{P}_{21} - \mathbf{P}_{12} + \mathbf{P}_{43} - \mathbf{P}_{34}]\sin(\varphi/2).$$

Он следующим образом выражается через операторы пространств Γ_R и Γ_S:

$$\mathbf{U}_{a+c}(\varphi,\varphi) = (\mathbf{R}_{11} + \mathbf{R}_{22}) \otimes [(\mathbf{S}_{11} + \mathbf{S}_{22})\cos(\varphi/2) + (\mathbf{S}_{21} - \mathbf{S}_{12})\sin(\varphi/2)] =$$

$$= \exp\{i(\varphi/2)\mathbf{1}_R \otimes \mathbf{S}_Y\}, \tag{6}$$

что доказывает высказанное утверждение (для фиктивных спинов 1/2 в индексах вместо −1/2 и +1/2 используются 1 и 2, соответственно; единичные матрицы определяются как $\mathbf{1}_R = \Sigma\mathbf{R}_{mm}$, $\mathbf{1}_S = \Sigma\mathbf{S}_{mm}$, $m = 1,2$). Аналогичным образом пропагатор для двухчастотного РЧ импульса с частотами заполнения, равными $\Omega_d = (E_1 - E_3)/\hbar$ и $\Omega_e = (E_2 - E_4)/\hbar$, и углами $\varphi_d = \varphi_c = \varphi$, будет равен

$$\mathbf{U}_{d+e}(\varphi,\varphi) = [P_{22} + P_{44}]\cos(\varphi/2) + [P_{42} - P_{24}]\sin(\varphi/2) +$$

$$+ [P_{33} + P_{11}]\cos(\varphi/2) + [P_{31} - P_{13}]\sin(\varphi/2)$$

и выражается через спиновые операторы пространств Γ_R и Γ_S:

$$\mathbf{U}_{d+e}(\varphi,\varphi) = [(\mathbf{R}_{11} + \mathbf{R}_{22})\cos(\varphi/2) + (\mathbf{R}_{21} - \mathbf{R}_{12})\sin(\varphi/2)] \otimes (\mathbf{S}_{11} + \mathbf{S}_{22}) =$$

$$= \exp\{i(\varphi/2)\mathbf{R}_X \otimes \mathbf{1}_S\}, \tag{7}$$

что является вращением на угол φ в пространстве Γ_R при неизменном Γ_S. Вообще говоря, переходы на частотах Ω_d и Ω_e являются запрещенными в принятой изначально конфигурации магнитного и кристаллического электрического полей. Будем считать в данном случае, что небольшое перепутывание волновых функций за счет отклонения η от нуля (или других причин) разрешает эти переходы, а необходимая величина угла поворота обеспечивается большей амплитудой переменного поля. Все результаты этой работы могут быть получены и при произвольной конфигурации полей, однако это неоправданно усложнило бы изложение.

Далее, преобразование $\mathbf{U}_f(\varphi_f)$ при $\varphi_f = \pi$, определяемое как

$$\mathbf{U}_f(\pi) = [\mathbf{P}_{33} + \mathbf{P}_{44}] + i[\mathbf{P}_{21} + \mathbf{P}_{12}],$$

осуществляет двухбитную операцию "контролируемое отрицание" CNOT – операцию NOT на спине S, если спин R находится в состоянии $|1\rangle$, и оставляет спин S неизменным, если спин R находится в состоянии $|0\rangle$. Действительно, легко проверить, что

$$\mathbf{U}_f(\pi)|\chi_1\rangle \equiv \mathbf{U}_f(\pi)|11\rangle = |10\rangle, \quad \mathbf{U}_f(\pi)|\chi_2\rangle \equiv \mathbf{U}_f(\pi)|10\rangle = |11\rangle,$$

$$\mathbf{U}_f(\pi)|\chi_3\rangle \equiv \mathbf{U}_f(\pi)|01\rangle = |01\rangle, \quad \mathbf{U}_f(\pi)|\chi_4\rangle \equiv \mathbf{U}_f(\pi)|00\rangle = |00\rangle.$$

Отсюда видно, что оператор эволюции $\mathbf{U}_f(\pi)$ в базисе $\Gamma_R \otimes \Gamma_S$ может быть представлен следующим образом:

$$\mathbf{U}_f(\pi) = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbf{1}_S + |1\rangle\langle 1| \otimes \mathbf{S}_x \equiv \mathbf{R}_{22} \otimes \mathbf{1}_S + \mathbf{R}_{11} \otimes \mathbf{S}_x, \tag{8}$$

что и доказывает высказанное утверждение.

Для нахождения результата вычислений необходимо иметь возможность считывать состояние конечной матрицы плотности $\rho_{out} = \mathbf{U}_{comp}\rho_{init}\mathbf{U}^{\dagger}_{comp}$. Методы ЯМР позволяют измерять все элементы матрицы плотности методом томографии состояний [4]. Для иллюстрации рассмотрим вариант считывания в частном случае диагональной матрицы плотности

$$\rho_{out} = \mu_0 \mathbf{1} + \Sigma\mu_m \mathbf{P}_{mm}, \quad m = 1,2,3,4 \tag{9}$$

в важной ситуации, когда результатом вычисления является одно из состояний $|\chi_m\rangle$, то есть когда отличной от нуля может быть только одна из величин μ_m. Следует подействовать на рассматриваемый спин 3/2 импульсным двухчастотным РЧ полем, порождающим сигнал свободной прецессии на резонансных частотах Ω_{12} и Ω_{34} посредством поворота элементов матрицы плотности на углы $\varphi_a = \varphi_c = \pi/2$. Такому импульсу соответствует оператор эволюции

$$\mathbf{U}_3 = \mathbf{U}_a(\pi/2)\mathbf{U}_c(\pi/2) = (1/\sqrt{2})[\mathbf{1} + \mathbf{P}_{21} - \mathbf{P}_{12} + \mathbf{P}_{43} - \mathbf{P}_{34}]. \tag{10}$$

Под влиянием оператора эволюции (10) матрица плотности (9) в представлении Шредингера приобретает форму

$$\rho(\mathbf{t}) = 1/2\{(\mu_1 + \mu_2)(\mathbf{P}_{11} + \mathbf{P}_{22}) + (\mu_4 + \mu_3)(\mathbf{P}_{33} + \mathbf{P}_{44}) +$$

$$
+(\mu_1 - \mu_2)[\mathbf{P}_{21}\exp(-it\Omega_{12}) + \mathbf{P}_{12}\exp(it\Omega_{12})]+
$$
$$
+(\mu_3 - \mu_4)[\mathbf{P}_{43}\exp(-it\Omega_{34}) + \mathbf{P}_{34}\exp(it\Omega_{34})]\}, \tag{11}
$$

где время отсчитывается от конца вычислительного цикла. В состоянии, описываемом матрицей плотности (11), становятся отличными от нуля квантовомеханические средние от поперечных компонент спина

$$
\langle I_+(t)\rangle \equiv \langle I_x + iI_y\rangle = \langle\sqrt{3}(P_{43} + P_{21}) + 2P_{32}\rangle = \mathrm{Sp}[\rho(t)(I_x + iI_y)] =
$$
$$
= \sqrt{3}(\mu_3 - \mu_4)\exp(-it\Omega_{34}) + \sqrt{3}(\mu_1 - \mu_2)\exp(-it\Omega_{12}), \tag{12}
$$

и в перпендикулярной постоянному магнитному полю плоскости возникнет прецессия ядерного спина, индуцирующая в приемной катушке периодическое напряжение на двух резонансных частотах Ω_{12} и Ω_{34} с компонентами Фурье $\sqrt{3}(\mu_3 - \mu_4)$ и $\sqrt{3}(\mu_1 - \mu_2)$. Отметим, что воздействие того же импульса на равновесную матрицу плотности (4) привело бы к аналогичной прецессии, но с компонентами Фурье, равными $\sqrt{3}Z(\lambda_3 - \lambda_4)$ и $\sqrt{3}Z(\lambda_1 - \lambda_2)$. Измерение знака отношений

$$
b_{34} \equiv (\mu_3 - \mu_4)/(\lambda_3 - \lambda_4) \quad \text{и} \quad b_{12} \equiv (\mu_1 - \mu_2)/(\lambda_1 - \lambda_2)
$$

соответствующих компонент Фурье, следующих после и до процедуры вычисления, позволяет определить конечное состояние двух фиктивных спинов:

если $b_{34} < 0$ и $b_{12} = 0$, то результатом вычисления является $|00\rangle$,
если $b_{34} > 0$ и $b_{12} = 0$, то результатом вычисления является $|01\rangle$,
если $b_{34} = 0$ и $b_{12} < 0$, то результатом вычисления является $|10\rangle$,
если $b_{34} = 0$ и $b_{12} > 0$, то результатом вычисления является $|11\rangle$.

Ядерный спин 3/2 не является редкостью, ядра с таким спином входят в самые разнообразные и легкодоступные вещества. Запись двух Q-бит на дискретных уровнях одной квантовой частицы снимает необходимость в существовании обменного взаимодействия между носителями Q-бит, для подавления которого в существующих схемах реализации квантовых вентилей необходимо применять специальные методы, усложняющие реализацию алгоритмов. Изложенная схема относится к квантовым системам любой физической природы. В принципе, для этой же цели можно использовать ядерные спины большей величины, выбрав подходящие четыре уровня энергии, спектры ЭПР с эффективным спином $S^* \geq 3/2$, оптические уровни энергии. При этом изменятся только выражения для резонансных частот и матричных элементов операторов. В частности, вполне подходит энергетический спектр ядерного квадрупольного резонанса, расщепленный (или не расщепленный) взаимодействием с постоянным магнитным полем. Использование эффективных спинов $S^* \geq 3/2$ и, следовательно, большего количества дискретных уровней энергии предоставляет,вообще говоря дополнительные возможности, которые в данной работе не обсуждаются.

---

1. N.A.Gershenfeld and I.L.Chuang, Science **275**, 350 (1997).
2. D.G.Cory, M.D.Price, and T.F.Havel, Physica **D120**, 82 (1998).
3. E.Knill, I.L.Chuang, and R.Laflamme, Phys. Rev. **A57**, 3348 (1998).
4. R.Laflamme, E.Knill, W.H.Zurek et al., Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. **A356**, 1941 (1998).