

*Разработка квантовых компьютеров -
самый важный вид научной деятельности.*

В.И. Ленин

Реализация квантовых алгоритмов с помощью магнитного резонанса

Михаил Волков
лаборатория СФСХ
научный руководитель
член-корреспондент РАН Салихов К.М.

Казанский физико-технический институт

Реализация квантовых алгоритмов с помощью магнитного резонанса

Михаил Волков
лаборатория СФСХ
научный руководитель
член-корреспондент РАН Салихов К.М.

Повышение быстродействия компьютера

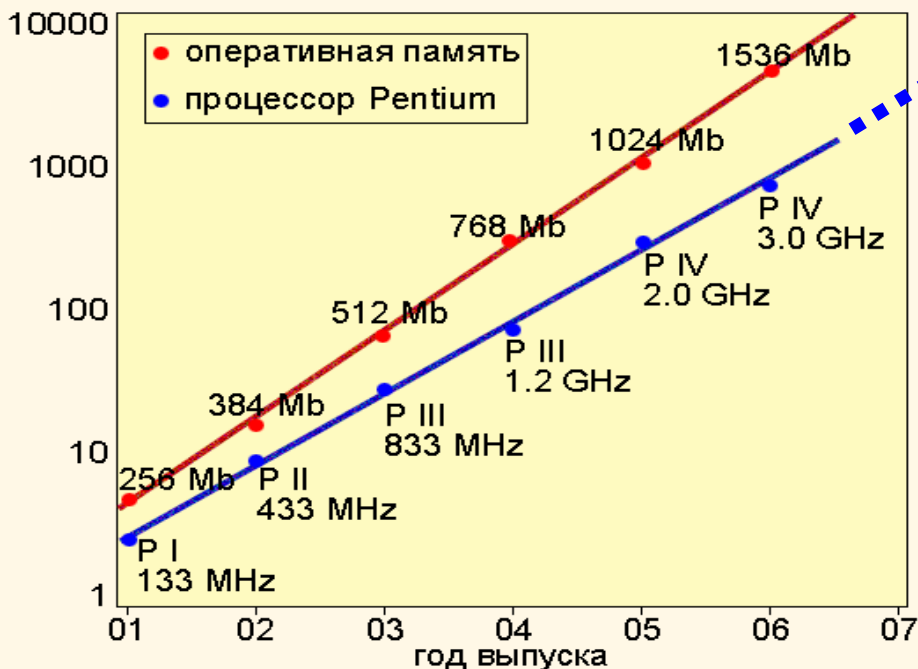
Поисковая база данных

- 1) несортированный список
N элементов
- 2) сколько запросов необходимо сделать для его сортировки?

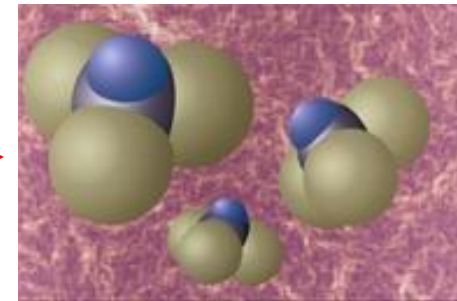
Разложение чисел на множители

- 1) $N = p * q$
- 2) число N имеет L цифр
- 3) чему равны p и q?

Количество миллионов транзисторов в кристалле



1 бит = 1 атом



Вместо классических законов вступают в действие квантовые законы и алгоритмы

Сравнение классических и квантовых битов

Классические биты

- 1) Транзисторы
- 2) 0 или 1

Квантовые биты

- 1) Квантовые системы
- 2) суперпозиция 0 и 1

Один кубит:

$$|\psi_1\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

Множество кубитов:

$$|\psi_n\rangle = a_0|00\dots 0\rangle + a_1|00\dots 1\rangle + a_{2^n}|11\dots 1\rangle \quad \sum_i |a_i|^2 = 1$$

Классический компьютер обрабатывает одновременно N чисел,
а квантовый компьютер 2^N .

Разложение на множители числа N , состоящего из 400 цифр

$\tau \approx \left(\frac{1}{2} e^{L^{1/3}} \right)$ 10 миллиардов лет

$\left(\frac{1}{2} L^3 \right)$ 3 года

Построение квантового компьютера

- 1) Квантовые биты.
- 2) Логические операции.
- 3) Теоретический расчет работы квантового компьютера.
- 4) Входные состояния.
- 5) Выходные состояния.
- 6) Сравнение теоретических и экспериментальных результатов.

Поиск элементной базы для квантового компьютера

В качестве элементной базы можно использовать:

1) Ионные ловушки.

В качестве кубита используются атомные состояния сверхтонкой структуры и низколежащие колебательные моды (фононы) удерживаемых в ловушке атомов.

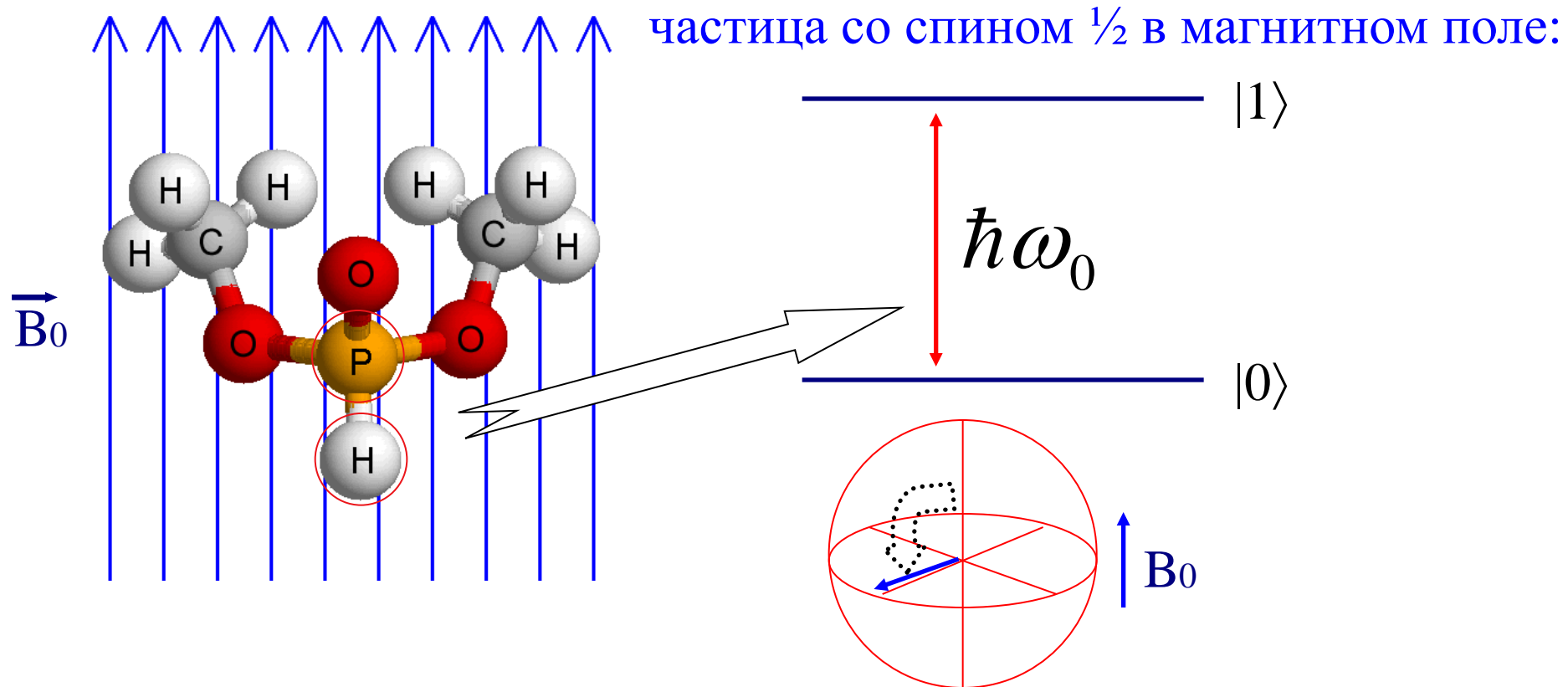
2) Оптические фотоны.

В качестве кубита используется одиночный фотон с поляризацией в двух различных плоскостях.

3) Ядерные или электронные спины.

В качестве кубита используется одиночный ядерный или электронный спин I или $S = \frac{1}{2}$.

Реализация квантового компьютера на ядерных спинах



$|\psi_{out}\rangle = e^{-iHt}|\psi_{in}\rangle = U|\psi_{in}\rangle \rightarrow$ Операторы осуществляют поворот спинов

$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{1} \rightarrow$ Операторы должны быть унитарными

Квантовые логические операции

Любой квантовый алгоритм можно представить в виде комбинации логических операций NOT и CNOT. Мы выполняли эксперименты по реализации логической операции CNOT на двух спинах.

$$NOT \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Для реализации логической операции NOT требуется наличие одного спина.

$$CNOT \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Для реализации CNOT необходимо наличие двух спинов, при этом между ними должно существовать взаимодействие.

Логическая операция CNOT имеет следующую таблицу истинности:

Входные биты	0 0	Выходные биты	0 0
	0 1		0 1
	1 0		1 1
	1 1		1 0

Взаимодействия между спинами

- Диполь-дипольное взаимодействие (в жидкостях усредняется до нуля)
- J-взаимодействие (возникает при наличии химической связи между атомами, в которых ядра взаимодействуют с электронными оболочками)

$$H_J = J(I_{1x}I_{2x} + I_{1y}I_{2y} + I_{1z}I_{2z})$$

$$H_{Zeeman} = -\frac{\hbar\omega_1 I_{1z}}{2} - \frac{\hbar\omega_2 I_{2z}}{2}$$

$$H = -\frac{\hbar\omega_1 I_{1z}}{2} - \frac{\hbar\omega_2 I_{2z}}{2} + J(I_{1x}I_{2x} + I_{1y}I_{2y} + I_{1z}I_{2z})$$

Взаимодействия между спинами

- Диполь-дипольное взаимодействие (в жидкостях усредняется до нуля)
- J-взаимодействие (возникает при наличии химической связи между атомами, в которых ядра взаимодействуют с электронными оболочками)

$$H = -\frac{\hbar\omega_1 I_{1z}}{2} - \frac{\hbar\omega_2 I_{2z}}{2} + J(I_{1x}I_{2x} + I_{1y}I_{2y} + I_{1z}I_{2z})$$

Если выполняется условие $J \ll |\hbar(\omega_1 - \omega_2)|$, тогда мы можем использовать только секулярную часть гамильтониана J-взаимодействия:

$$H = -\frac{\hbar\omega_1 I_{1z}}{2} - \frac{\hbar\omega_2 I_{2z}}{2} + J I_{1z} I_{2z}$$

Способы описания квантовых систем

Существует два способа описания квантовых систем:

1) С помощью векторов в гильбертовом пространстве:

$$|++\rangle \quad |+-\rangle \quad |-+\rangle \quad |--\rangle \quad \mathbf{I}_1^z |++\rangle = \frac{1}{2} |++\rangle \quad \mathbf{I}_1^z |--\rangle = -\frac{1}{2} |--\rangle \quad \mathbf{I}_2^z |++\rangle = \frac{1}{2} |++\rangle \quad \mathbf{I}_2^z |--\rangle = -\frac{1}{2} |--\rangle$$

$$\mathbf{I}_x = \frac{\mathbf{I}^+ + \mathbf{I}^-}{2} \quad \mathbf{I}_y = \frac{\mathbf{I}^+ - \mathbf{I}^-}{2i} \quad \mathbf{I}_1^+ |--\rangle = |+-\rangle \quad \mathbf{I}_2^+ |--\rangle = |-+\rangle \quad \mathbf{I}_1^- |++\rangle = |-+\rangle \quad \mathbf{I}_2^- |++\rangle = |+-\rangle$$

2) С помощью матриц плотности: $\rho \rightarrow 2^n \times 2^n$ Для двух спинов $1/2$: 4×4

Базисный набор: \mathbf{E} ,
 дипольные моменты $\mathbf{I}_{1x}, \mathbf{I}_{1y}, \mathbf{I}_{1z}$,
 дипольные моменты $\mathbf{I}_{2x}, \mathbf{I}_{2y}, \mathbf{I}_{2z}$,
 квадрупольные моменты
 $\mathbf{I}_{1x}\mathbf{I}_{2x}, \mathbf{I}_{1x}\mathbf{I}_{2y}, \mathbf{I}_{1x}\mathbf{I}_{2z}$,
 $\mathbf{I}_{1y}\mathbf{I}_{2x}, \mathbf{I}_{1y}\mathbf{I}_{2y}, \mathbf{I}_{1y}\mathbf{I}_{2z}$,
 $\mathbf{I}_{1z}\mathbf{I}_{2x}, \mathbf{I}_{1z}\mathbf{I}_{2y}, \mathbf{I}_{1z}\mathbf{I}_{2z}$.

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & 2^n & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{1x} = \begin{matrix} \langle ++ | \\ \langle +- | \\ \langle -+ | \\ \langle -- | \end{matrix} \begin{pmatrix} |++\rangle & |+-\rangle & |-+\rangle & |--\rangle \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \end{pmatrix}$$

матрица оператора \mathbf{I}_{1x}

Базисный набор для двух спинов

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i/2 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1z} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I2x} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I2y} = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 & 0 & 0 \\ i/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i/2 \\ 0 & 0 & i/2 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I2z} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1xI2x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1/4 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1/4 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1xI2y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i/4 \\ 0 & 0 & i/4 & 0 \\ 0 & -i/4 & 0 & 0 \\ i/4 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1xI2z} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/4 \\ 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1yI2x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i/4 \\ 0 & 0 & -i/4 & 0 \\ 0 & i/4 & 0 & 0 \\ i/4 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1yI2y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1/4 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ -1/4 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1yI2z} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i/4 \\ i/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i/4 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I2zI2x} = \begin{pmatrix} 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/4 \\ 0 & 0 & -1/4 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1zI2y} = \begin{pmatrix} 0 & -i/4 & 0 & 0 \\ i/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i/4 \\ 0 & 0 & -i/4 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{I1zI2z} = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix};$$

Для любой матрицы:

$$\hat{F} = \sum_{k=1}^{16} C_k \hat{Q}_k, C_k = \frac{Sp(\hat{F} \hat{Q}_k)}{Sp(\hat{Q}_k \hat{Q}_k)}$$

$$\hat{\rho} = \sum_{k=1}^{16} C_k \hat{Q}_k \quad \hat{H} = \sum_{k=1}^{16} B_k \hat{Q}_k$$

Теоретический расчет работы импульсной последовательности

Уравнение Шредингера:
$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

Решение для гамильтониана, независящего от времени:

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{i\hat{H}t/\hbar}$$

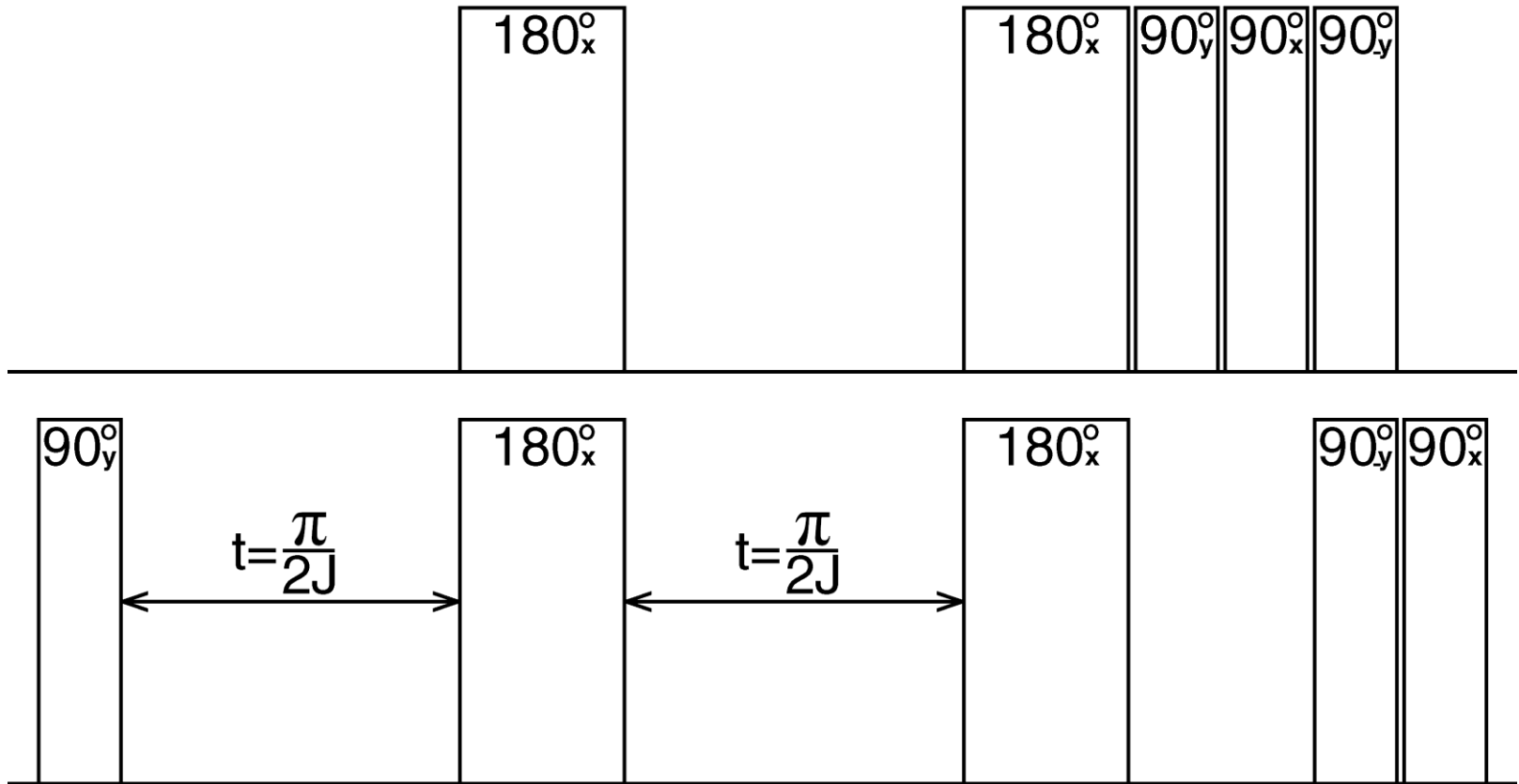
Поворот спина на угол $\varphi = \omega t$ относительно оси $k=x, y, z$ осуществляется под действием гамильтониана $\hat{H} = \hbar\omega \hat{I}_k$ в течение времени t .

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{-i\hbar\omega \hat{I}_k t/\hbar} = e^{-i\varphi \hat{I}_k} = \hat{E} - i\varphi \hat{I}_k + \dots = \left(\hat{E} \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) - 2i \hat{I}_k \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \right)$$

$$e^{-i\omega t \hat{I}_z} = \left(\hat{E} \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) - 2i \hat{I}_z \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \right);$$

$$e^{-iJ \hat{I}_{1z} \hat{I}_{2z} t/\hbar} = \left(\hat{E} \cos\left(\frac{Jt}{4\hbar}\right) - 4i \hat{I}_{1z} \hat{I}_{2z} \sin\left(\frac{Jt}{4\hbar}\right) \right)$$

Теоретический расчет работы импульсной последовательности



$$\hat{\rho}(t_1) = (e^{-i\hat{H}_1 t/\hbar}) \hat{\rho}(0) (e^{i\hat{H}_1 t/\hbar}), \hat{\rho}(t_2) = (e^{-i\hat{H}_2 t/\hbar}) \hat{\rho}(t_1) (e^{i\hat{H}_2 t/\hbar})$$

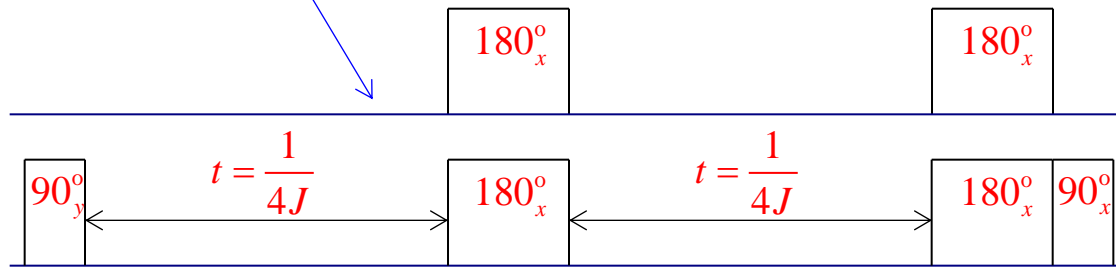
$$\hat{\rho}(t) = (\dots) (e^{-i\hat{H}_3 t/\hbar}) (e^{-i\hat{H}_2 t/\hbar}) (e^{-i\hat{H}_1 t/\hbar}) \hat{\rho}(0) (e^{i\hat{H}_1 t/\hbar}) (e^{i\hat{H}_2 t/\hbar}) (e^{i\hat{H}_3 t/\hbar}) (\dots)$$

Импульсная последовательность CNOT

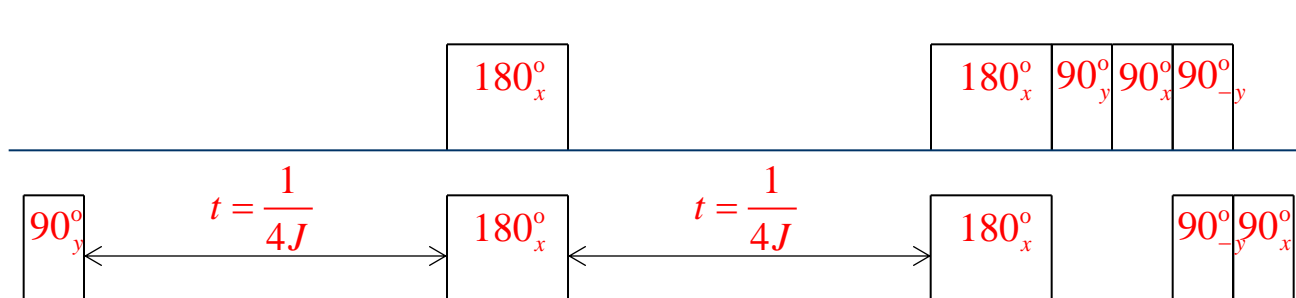
$$CNOT \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\hat{E} - 2i\hat{I}_{2x}) \cdot (\hat{E} - 4i\hat{I}_{1z}\hat{I}_{2z}) \cdot (\hat{E} - 2i\hat{I}_{2y}) = \begin{pmatrix} k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m \\ 0 & 0 & n & 0 \end{pmatrix}$$

$$H = 2\pi\hbar J I_{1z} I_{2z}$$

$$H = -\frac{\hbar\omega_1 I_{1z}}{2} - \frac{\hbar\omega_2 I_{2z}}{2} + 2\pi\hbar J I_{1z} I_{2z}$$



$$\begin{pmatrix} e^{-i\pi/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i3\pi/4} \\ 0 & 0 & -e^{i3\pi/4} & 0 \end{pmatrix}$$

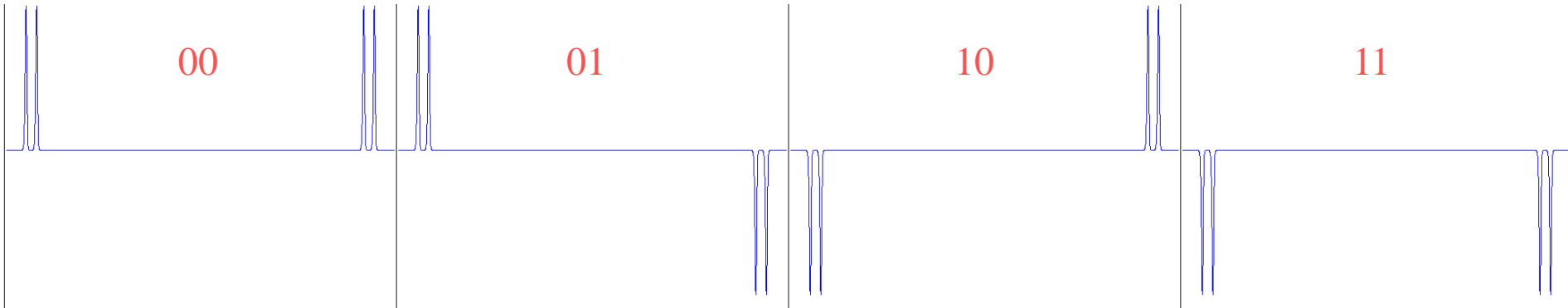


$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

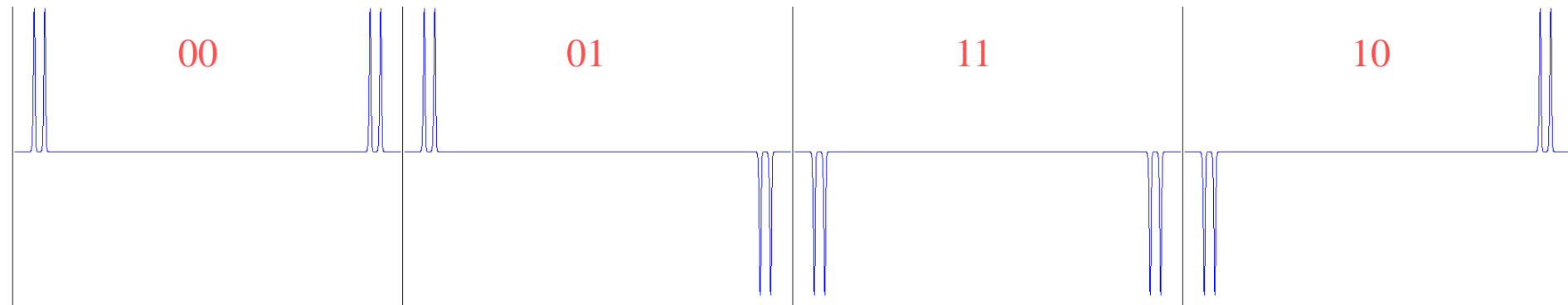
Спектры чистых состояний

Теоретический расчет действия логической операции CNOT на чистые состояния:

Спектры состояний $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ до применения CNOT :



Спектры состояний $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ после применения CNOT :



Приготовление входных состояний

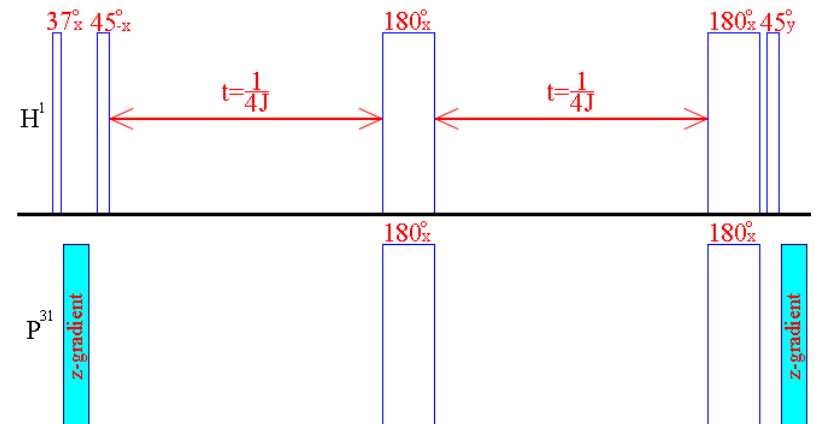
Квантовая логическая операция CNOT работает правильно, если в качестве входных состояний использовать чистые состояния:

$$\begin{array}{cccc}
 |++\rangle & |+-\rangle & |-+\rangle & |--\rangle \\
 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{array}$$

Для создания таких состояний необходимо понизить температуру до 10^{-2}K

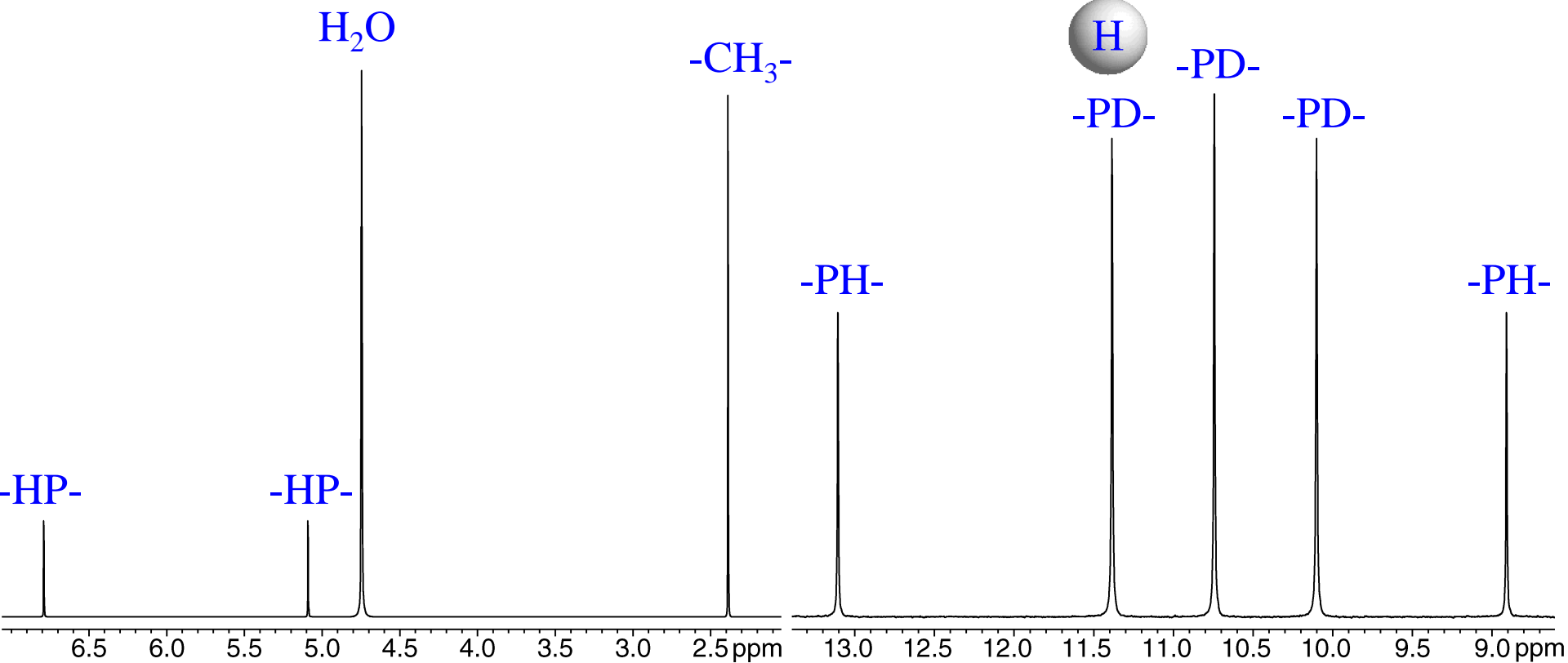
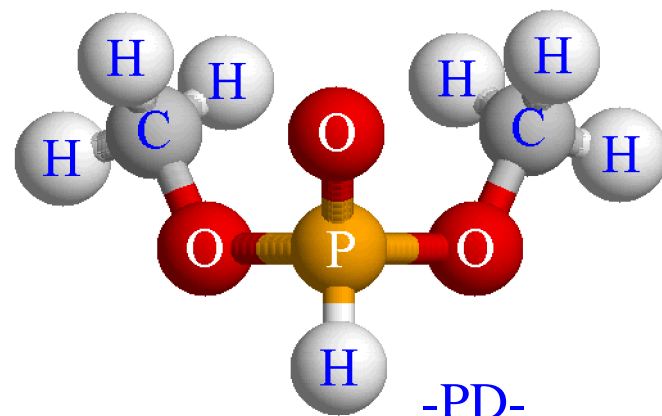
Вместо чистых состояний можно использовать псевдо чистые состояния вида $(\alpha \hat{E} + \beta |++\rangle)$, которые ведут себя аналогично чистым состояниям:

Такие состояния можно приготовить из состояния теплового равновесия с помощью последовательностей РЧ импульсов и градиентов магнитного поля:



Реализация логической операции CNOT на ядерных спинах

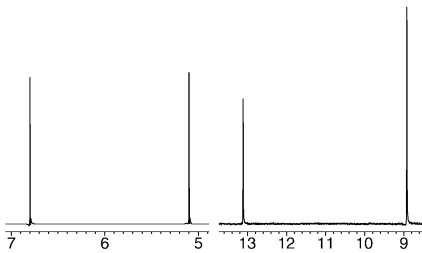
В нашей реализации мы использовали жидкое вещество, имеющее следующую химическую формулу:



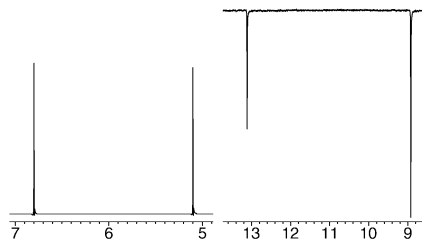
Экспериментально полученные результаты

Экспериментальные спектры псевдо чистых состояний, полученные до и после применения к ним логической операции CNOT:

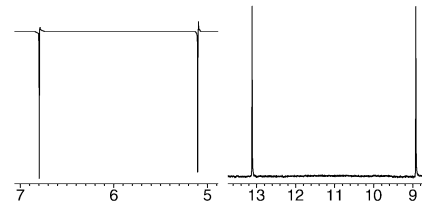
$|00\rangle$



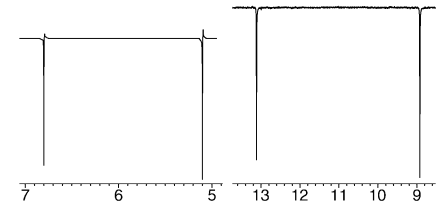
$|01\rangle$



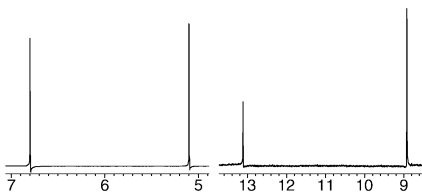
$|10\rangle$



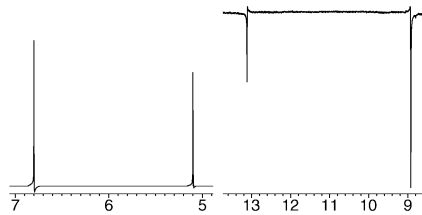
$|11\rangle$



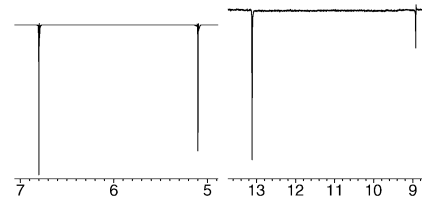
$|00\rangle$



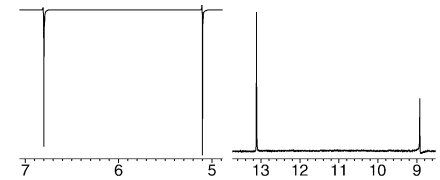
$|01\rangle$



$|11\rangle$



$|10\rangle$



Длительность выполнения логической операции

Длительность выполнения одиночной логической операции определяется длительностями 90° -импульсов и константами взаимодействия ядер

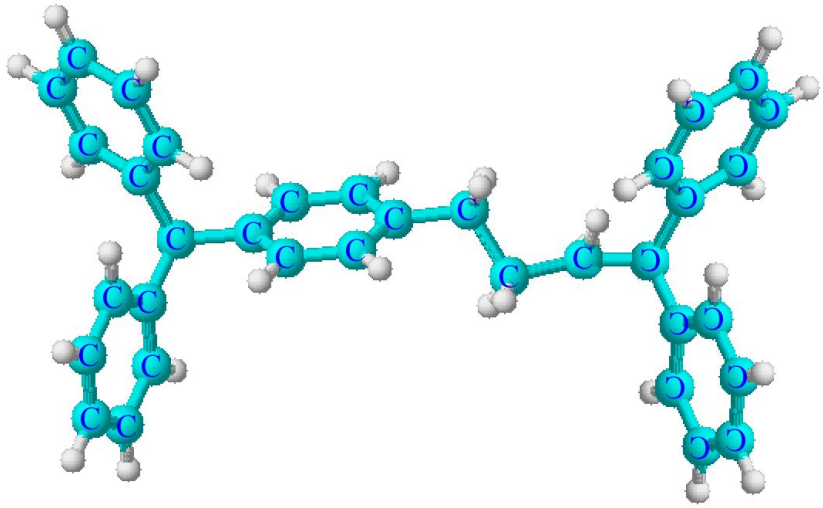
Ядерный магнитный резонанс

- 1) Длительности 90° -импульсов в современных спектрометрах $1 \div 10$ мкс.
ЯМР спектрометр Bruker Avance 400 \rightarrow H^1 : $\tau_{90^\circ} = 9,5$ мкс, P^{31} : $\tau_{90^\circ} = 5,5$ мкс.
- 2) Константы косвенного взаимодействия: для непосредственно связанных атомов $100 \div 1000$ Гц, через одну связь $10 \div 100$ Гц, через несколько связей < 10 Гц. $J_{PH} = 680$ Гц.

Электронный парамагнитный резонанс

- 1) Длительности 90° -импульсов в современных спектрометрах $10 \div 100$ нс.
ЭПР спектрометр Elexsys \rightarrow H^1 : $\tau_{90^\circ} = 16$ нс.
- 2) Константы электронно-ядерного взаимодействия: $10 \div 100$ МГц.

Реализация логической операции CNOT на электронных спинах



$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{CNOT} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H = -\frac{\hbar\omega_1 I_{1z}}{2} - \frac{\hbar\omega_2 I_{2z}}{2} + J I_{1z} I_{2z}$$



$$H = -\frac{\hbar\omega_1 I_{1z}}{2} - \frac{\hbar\omega_2 I_{2z}}{2} + J(I_{1x} I_{2x} + I_{1y} I_{2y} + I_{1z} I_{2z})$$

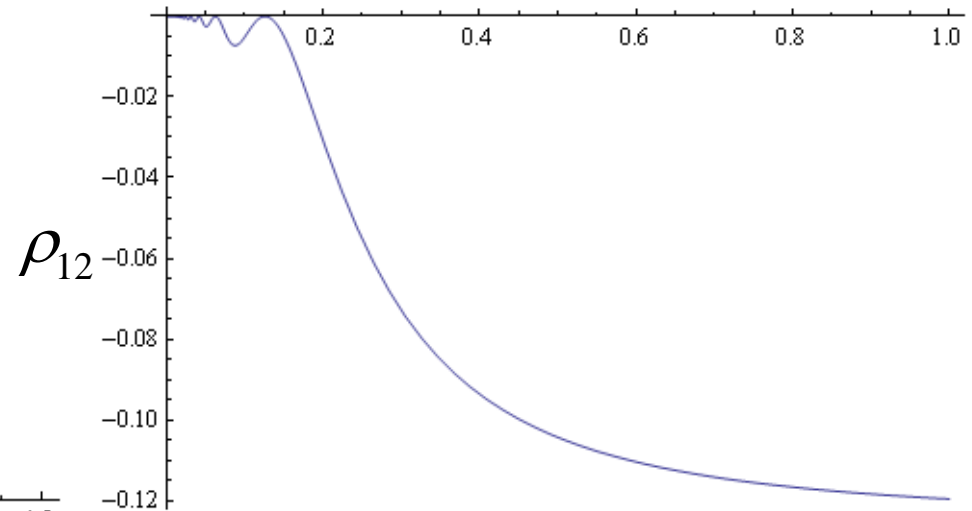
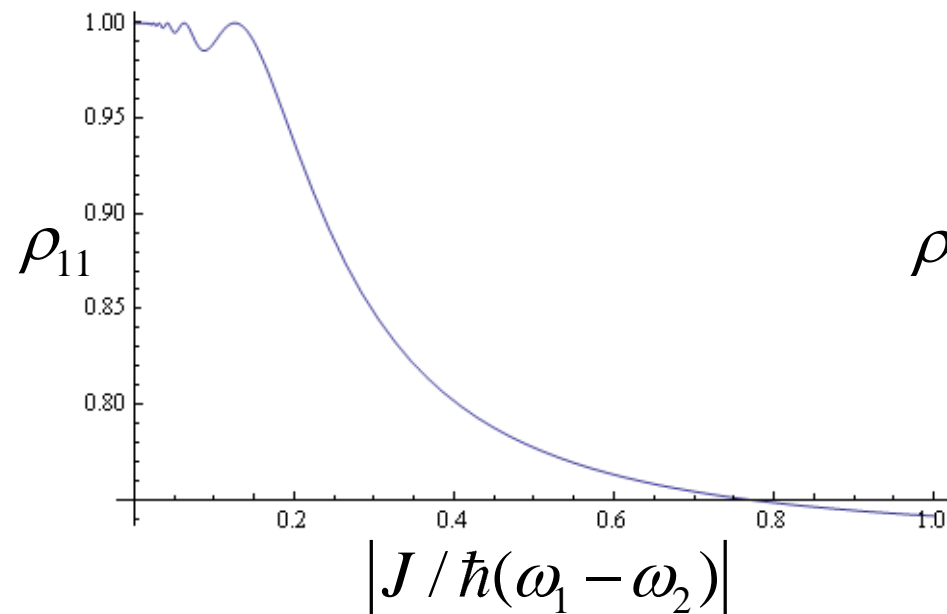


$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{CNOT} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} \end{pmatrix}$$

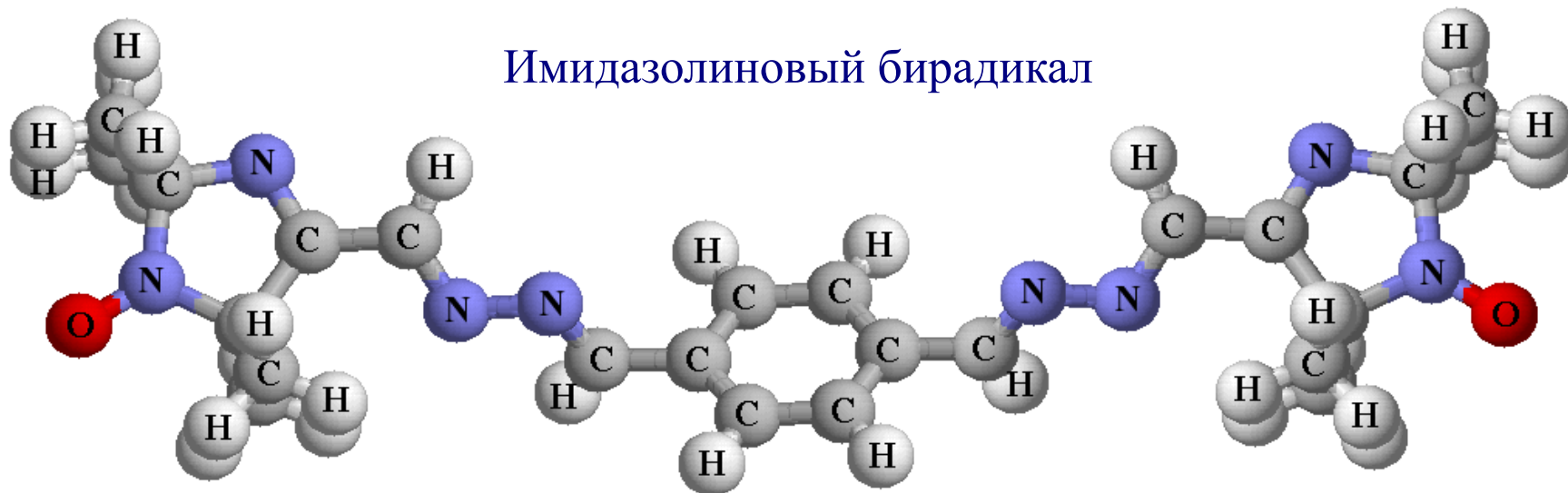
Реализация логической операции CNOT на электронных спинах

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{CNOT} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} \end{pmatrix}$$

$$|J / \hbar(\omega_1 - \omega_2)|$$

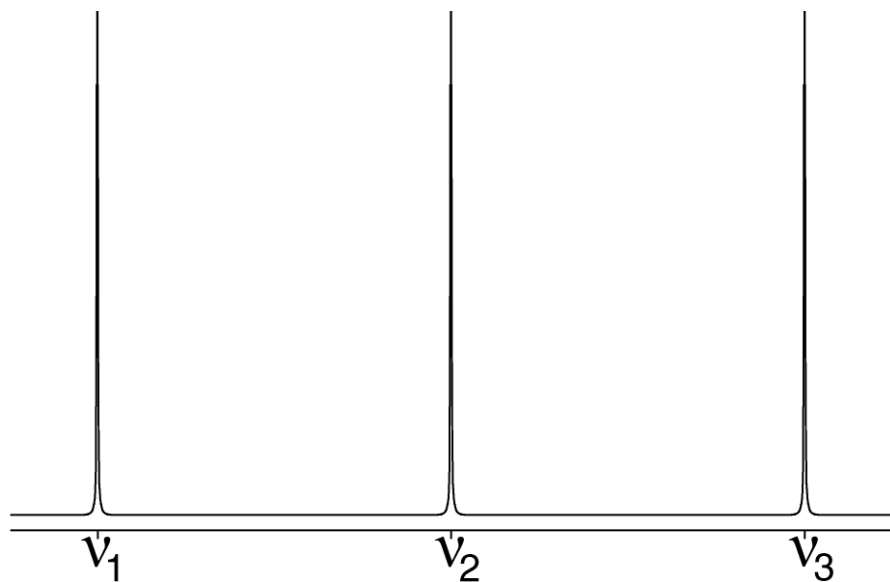


Реализация логической операции CNOT на электронных спинах



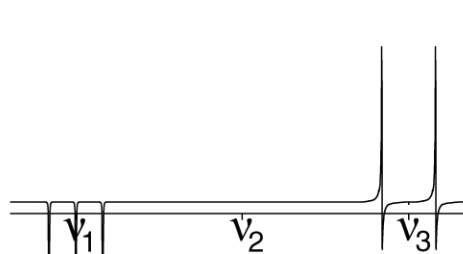
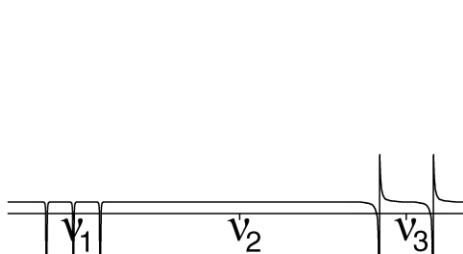
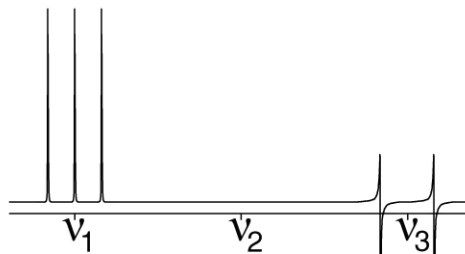
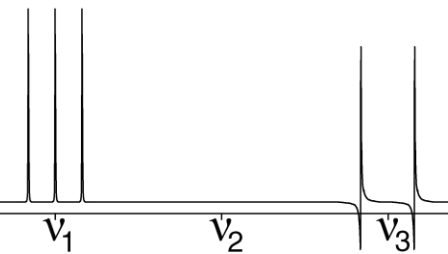
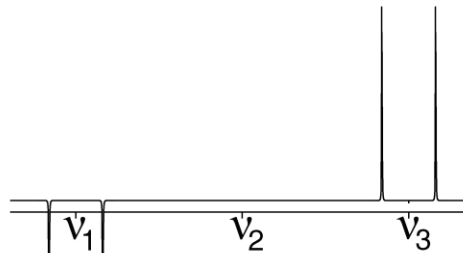
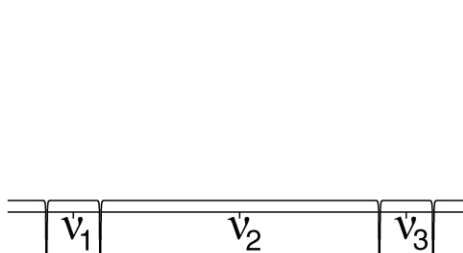
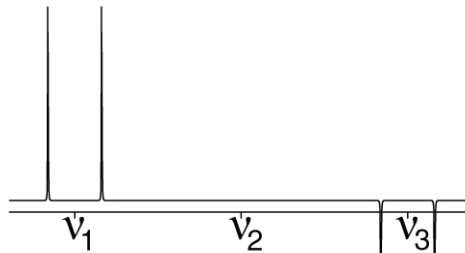
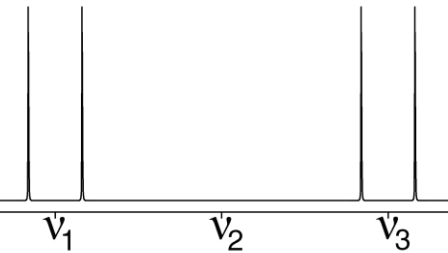
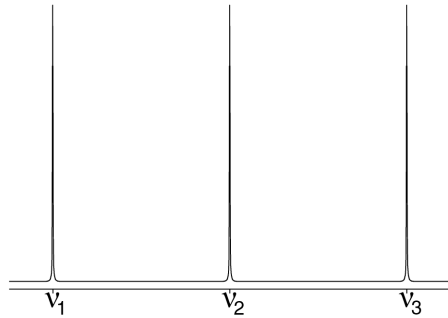
Ансамбль спинов разделяется на 9 подансамблей:

- | | | |
|-------------|-------------|-------------|
| 1) v_1v_1 | 2) v_1v_2 | 3) v_1v_3 |
| 4) v_2v_1 | 5) v_2v_2 | 6) v_2v_3 |
| 7) v_3v_1 | 8) v_3v_2 | 9) v_3v_3 |



Реализация логической операции CNOT на электронных спинах

- 1) v1v1 2) v1v2 3) v1v3 4) v2v1 5) ~~v2v2~~
6) v2v3 7) v3v1 8) v3v2 9) v3v3



Спасибо за внимание
