

А. А. Кокин

**ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ
КВАНТОВЫЕ
КОМПЬЮТЕРЫ
НА ЯДЕРНЫХ
СПИНАХ**



А. А. Кокин

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ НА ЯДЕРНЫХ СПИНАХ



Москва ♦ Ижевск

2004



Кокин А.А.

Твердотельные квантовые компьютеры на ядерных спинах. — Москва – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004, 204 стр.

Предлагаемая читателю книга посвящена рассмотрению перспективных с точки зрения возможной реализации полномасштабного квантового компьютера твердотельных вариантов ядерных магнито-резонансных (ЯМР) квантовых компьютеров.

Детально рассматриваются физические основы ЯМР квантового компьютера, общие требования, предъявляемые к полномасштабному квантовому компьютеру, к многоспиновой системе, представляющей элементную базу квантового компьютера. Описываются принципы построения ЯМР квантового компьютера и способы организации квантовых логических операций. Дается обзор предложенных твердотельных вариантов ЯМР квантовых компьютеров, анализируются преимущества и недостатки отдельных вариантов и оценивается их перспективность. Основное внимание уделяется полупроводниковому ансамблевому варианту с полосковыми затворами на ядерных спинах донорных атомов фосфора и варианту ансамблевого ЯМР квантового компьютера на основе антиферромагнитной структуры с использованием принципов клеточного автомата.

Книга рассчитана на широкий круг читателей, интересующихся физическими принципами квантовых вычислений, новыми возможностями в квантовой информатике. Она будет полезна студентам старших курсов физических специальностей и аспирантам, специализирующимся в области квантовой информатики.

ISBN 5-93972-319-5

© А. А. Кокин, 2004

© Институт компьютерных исследований, 2004

<http://ics.org.ru>

<http://rcd.ru>

Предисловие

Идея квантовых вычислений в настоящее время охватывает все более и более широкий круг исследователей из самых разных областей науки. Несмотря на то, что удалось создать и исследовать экспериментально только отдельные элементы квантовых компьютеров, число публикаций, в которых предлагаются все новые и новые варианты полномасштабных квантовых компьютеров, то есть таких, которые способны превзойти по своим возможностям любой классический квантовый компьютер, продолжает расти.

Отдельные направления исследований по созданию будущих квантовых компьютеров различаются по типу физических систем, используемых в них в качестве квантовых двухуровневых элементов — кубитов.

В настоящее время обсуждаются, в основном, следующие варианты таких элементов:

1. *Ионы* или *нейтральные атомы* с двумя низколежащими колебательными или сверхтонкими уровнями, удерживаемые *в силовых ловушках* в вакууме при микрокельвиновых температурах, получаемых путем лазерного охлаждения.

2. Определенные состояния *квантованного электромагнитного поля* в электродинамических резонаторах и фотонных кристаллах.

3. *Сверхпроводниковые структуры* с двумя макроскопическими квантовыми состояниями.

4. Одними из *наиболее естественных* кандидатов в качестве квантовых двухуровневых элементов являются отдельные *электронные и ядерные спины* со спиновым числом $I = 1/2$.

Наиболее важные ближайшие перспективы открываются, на наш взгляд, перед направлением *твердотельных* квантовых компьютеров на ядерных спинах.

В 1998 г. австралийским физиком Б. Кейном было предложено использовать в качестве кубитов состояния ядерных спинов с $I = 1/2$ донорных атомов фосфора (изотоп ^{31}P), которые имплантируются в приповерхностный слой кремниевой структуры. Это предложение содержит потенциальную возможность создания квантовых полномасштабных вычислительных устройств с *практически неограниченным числом кубитов*. Активные работы по реализации твердотельных квантовых компьютеров ведутся в настоящее время в Австралийском центре квантовых технологий, начиная с 2000 года.

Обзор этих и других направлений по материалам, опубликованным на начало 2001 года, а также анализ трудностей, связанных с реализацией полномасштабных квантовых компьютеров был выполнен ранее в нашей монографии — *Валиев К. А., Кокин А. А.* Квантовые компьютеры: надежды и реальность. 2-е изд. — Москва–Ижевск: НИЦ РХД, 2002, 320 с. Твердотельным ядерным магнито-резонансным (ЯМР) квантовым компьютерам в ней посвящена глава 5.

В предлагаемой книге автор поставил целью дать по возможности более полный анализ состояния проводимых в мире исследований по созданию элементной базы полномасштабного твердотельного квантового компьютера на ядерных спинах с учетом основных результатов, опубликованных в мире к началу 2003 года.

Изложение начинается с рассмотрения физических основ ЯМР квантового компьютера, принципов его построения и организации вычислительных операций. Рассматриваются основные требования, предъявляемые к полномасштабным квантовым компьютерам и способы их реализации в различных вариантах ЯМР квантовых компьютеров.

Предполагается, что читатели знакомы с основами квантовой механики, физики полупроводников и квантовой теории магнетизма в рамках обычных программ для физических и физико-технических специальностей. Для облегчения пользования книгой звездочкой * отмечены те параграфы, которые при первом чтении можно пропустить.

Книга рассчитана на широкий круг читателей, интересующихся физическими принципами квантовых вычислений, новыми возможностями в квантовой информатике. Она будет полезна студентам старших курсов физических специальностей и аспирантам, специализирующимся в области квантовой информатики.

Автор выражает искреннюю благодарность академику К. А. Валиеву за стимулирующие обсуждения многих рассматриваемых вопросов и общую поддержку, оказанную при написании этой книги; сотрудникам лаборатории Физики квантовых компьютеров Физико-технологического института РАН Ю. И. Ожигову, Л. Е. Федичкину, А. В. Цуканову, А. А. Ларионову, а также многим участникам семинара по квантовой информатике, руководимому К. А. Валиевым, за обсуждение затронутых в книге проблем. Автор признателен своим сыновьям В. А. Кокину и С. А. Кокину, познакомивших меня с многими замечательными возможностями классического персонального компьютера, и оказавшими большую техническую помощь в подготовке электронного варианта рукописи. Особую благодарность выражаю моей жене Ю. С. Кокиной, чья неоценимая забота, теплота и терпение обеспечили продуктивную работу над книгой.

Оглавление

Предисловие	3
Введение	9
Литература к введению	12
Часть 1. Физические основы ЯМР квантовых компьютеров	15
1. Ядерный спин – естественная двухуровневая квантовая информационная ячейка	15
1.1. Вектор состояния и матрица плотности кубита	15
1.2. Динамические процессы в однокубитовом ансамбле. Уравнение Блоха и его обобщение	20
1.3. Обобщенное уравнение Блоха для немарковского случайного процесса*	24
2. Квантовый регистр в структуре квантового компьютера	27
2.1. Основные принципы работы квантового компьютера	27
2.2. Основные одно- и двухкубитовые квантовые операции	30
2.3. Квантовое дискретное фурье-преобразование и трудности его реализации на ЯМР квантовых компьютерах*	34
2.4. Общие требования к полномасштабным квантовым компьютерам	39
2.5. Чистые состояния двухкубитового квантового регистра	41
2.6. Парные запутанные состояния в цепочках спинов с антиферромагнитным взаимодействием	45
2.7. Парная запутанность основного квантового состояния антиферромагнитного кольца*	52
3. Динамические процессы в ансамбле спиновых систем	59
3.1. Динамические уравнения для ансамбля двухкубитовых систем*	59
3.2. Декогерентизация состояний кубитов и способы ее описания	63
3.3. Полуклассическая модель адиабатической декогерентизации	68
3.3.1. Адиабатическая декогерентизация в однокубитовом ансамбле	68
3.3.2. Адиабатическая декогерентизация в многокубитовом ансамбле	72

3.3.3. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, взаимодействующих с магнитными моментами примесных атомов.....	77
3.4. Квантовые модели адиабатической декогерентизации*	80
3.4.1. Точно решаемая квантовая модель адиабатической декогерентизации однокубитового состояния	80
3.4.2. Адекватность точно решаемой квантовой модели адиабатической декогерентизации	86
3.4.3. Модель адиабатической декогерентизации состояния ядерного спина-кубита на основе двухбозонных процессов рассеяния	88
Приложение П.1 Алгоритм факторизации Шора на основе квантового фурье-преобразования*	93
Литература к части 1	97

Часть 2. Перспективные варианты твердотельных ЯМР квантовых компьютеров **102**

4. Общие проблемы реализации полномасштабного квантового компьютера	102
4.1 Жидкостные прототипы ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров и их ограниченность	102
4.2. Проблемы приготовления базисных состояний многокубитового квантового регистра.....	106
4.2.1. Влияние однокубитовых случайных воздействий на состояния квантового регистра.....	106
4.2.2. Проблемы, связанные со случайными фазовыми множителями в базисных состояниях квантового регистра	110
4.3. Проблема уменьшения вычислительной ошибки для состояний квантового регистра, представляющих высшие разряды*	113
4.4. Некоторые проблемы, связанные с вычислительными операциями и измерениями состояний кубитов*	115
5. Многокубитовые твердотельные ЯМР квантовые компьютеры.....	119
5.1. Кремниевый многокубитовый ЯМР квантовый компьютер по схеме Кейна и проблемы его реализации.....	119
5.2. Дальнейшее развитие схемы Кейна кремниевых ЯМР квантовых компьютеров.....	124
5.2.1. Эффект усиления сигнала ЯМР.....	124

5.2.2. Энергетический спектр электронно-ядерной спиновой системы двух доноров	127
5.2.3. Электрический контроль состояний кубитов	132
5.3. Некоторые варианты многокубитовых ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров	136
5.3.1. Ансамблевый твердотельный ЯМР квантовый компьютер с двухмерным электронным газом	136
5.3.2. Ансамблевый ЯМР квантовый компьютер на естественных кристаллах.....	138
5.4. Многокубитовый ансамблевый кремниевый ЯМР квантовый компьютер	140
5.4.1. Кремниевый ансамблевый ЯМР квантовый компьютер с полосковыми затворами.....	140
5.4.2. Отношение сигнал-шум ансамблевого ЯМР квантового компьютера	142
5.4.3. Охлаждение ядерных спиновых систем и инициализация ядерных спиновых состояний путем динамической поляризации	145
5.4.4. Отношение сигнал-шум для ансамблевого кремниевого квантового компьютера	148
5.4.5. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, обусловленная модуляцией секулярной части сверхтонкого взаимодействия.....	150
5.4.6. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, обусловленная взаимодействием с ядерными спинами примесных атомов	153
6. Многокубитовые ЯМР квантовые клеточные автоматы.....	156
6.1. Основные принципы работы ЯМР квантовых клеточных автоматов	156
6.2. ЯМР квантовый клеточный автомат на основе одномерного изинговского антиферромагнетика.....	160
6.3. Организация логических операций в квантовом ЯМР клеточном автомате	164
6.4. ЯМР квантовый клеточный автомат с несимметричным взаимодействием ядерного спина с соседними спинами	167
6.5. ЯМР квантовый клеточный автомат на периодической структуре из эндодраально легированных фуллеренов.....	170
6.6. ЯМР квантовые клеточные автоматы на антиферромагнитных кристаллах*	173
6.6.1. Гамильтониан электрон-ядерной системы спинов для одноосного антиферромагнетика.....	174

6.6.2. Косвенное взаимодействие между ядерными спинами в антиферромагнетике.....	178
6.6.3. Декогерентизация состояний ядерных спинов в легкоосных антиферромагнетиках	184
6.6.4 Основные требования к антиферромагнитным кристаллам	185
Заключение	187
Приложение П2. Сигнал ЯМР от ансамбля ядерных спинов	189
Приложение П3. Двухкубитовая операция CNOT в одномерном ЯМР квантовом клеточном автомате*	191
Приложение П4. Спин-волновое приближение для подсистемы электронных спинов в антиферромагнетике и приближение Тябликова.....	194
Литература к части 2.....	196
Предметный указатель.....	202

Введение

Начало прошлого века совпало с рождением квантовой теории излучения, что привело вскоре и к появлению ряда новых, основанных на квантовых представлениях, областей физики, таких как атомная и ядерная физика, квантовая физика твердого тела и физика полупроводников, квантовая физика электронного и ядерного магнетизма и ряда других. Уже в середине века физика полупроводников стала научной базой быстроразвивающихся микро- и наноэлектроники, которая обеспечила бурный рост информационных технологий. Однако развитие электронной вычислительной техники, несмотря на то, что в качестве элементной базы использовались полупроводниковые приборы с определенными квантовыми свойствами, шло в основном по пути организации вычислительных операций на основе *классической булевой логики* [1–3].

Идея *квантовых вычислений*, по-видимому, впервые высказанная Ю. И. Маниным в 1980 году [4], активно стала обсуждаться в мире с 1982 года, после опубликования статьи американского физика-теоретика, нобелевского лауреата Р. Фейнмана [5]. Эти авторы обратили внимание на то, что каждое состояние квантовой системы из L двухуровневых квантовых элементов (позднее они получили наименование *квантовых битов – кубитов* (qubits) [6]), в отличие от классической системы с тем же числом классических битов, может представлять собой произвольную *когерентную суперпозицию* из 2^L базисных состояний. Иначе говоря, состояние квантовой системы характеризуется вектором состояния в 2^L -мерном *гильбертовом пространстве*. Для описания такой квантовой суперпозиции в классическом вычислительном устройстве потребовалось бы задать 2^L комплексных чисел. Уже для $L = 100$ их число исключительно велико — порядка 10^{30} ! Отсюда следовал и обратный вывод о том, что эффективное моделирование квантовых систем, содержащих до сотни двухуровневых квантовых элементов, практически не доступно классическим компьютерам. Но оно может эффективно осуществляться на основе использования квантовых операций, действующих в 2^L -мерном гильбертовом пространстве состояний. Элементарной унитарной квантовой операцией является поворот вектора состояния всей L -кубитовой системы в гильбертовом пространстве. Для выполнения этой операции на классическом компьютере потребовалось бы выполнить 2^L элементарных шагов по вычислению всех коэффициентов суперпозиции. При любой мыслимой скорости элементарных операций это потребует нереально большого времени классических вычислений.

Существенное значение в процессе выполнения квантовых вычислительных операций, кроме того, имеют состояния, представляющие собой когерентную интерференцию между множеством суперпозиций. Эта особенность квантовых вычислений называется *квантовым параллелизмом*. Этим они принципиально отличаются от операций над классическими булевыми состояниями [7, 8]. Квантовый параллелизм — *главное преимущество квантовых вычислений* по сравнению с цифровыми классическими вычислениями.

Квантовый компьютер является открытой физической системой. Благодаря взаимодействию квантовой системы с окружением, а также при случайно неоднородной структуре ансамбля кубитов имеет место процесс разрушения или *декогерентизации* (decoherence) когерентных квантовых состояний, приводящий к нарушению унитарности квантовых процессов, механизма квантовой интерференции, искажению обрабатываемой квантовой информации и уменьшению «объема» квантовых состояний в результате их перехода в классические состояния. Подавление декогерентизации до необходимого уровня является одной из основных проблем, стоящих на пути реализации квантовых компьютеров.

Перспективы квантовых вычислений обычно связывают с ожидаемым экспоненциальным ускорением решения так называемой *NP-полной* (Nondeterministic polynomial-time complete) *проблемы*, связанной с решением таких задач, для которых это решение очень трудно найти, но очень просто его проверить. Такие задачи относят к классу *невывчисляемых* в том смысле, что они не могут быть решены на классических компьютерах за время, полиномиально зависящее от числа битов L , представляющих задачу.

Среди важных задач, решения которых можно было бы ожидать от квантового компьютера, отметим задачу моделирования многочастичных квантовых систем, к которым можно отнести как сложные молекулы, биологические объекты, так и элементы современной нанoeлектроники. Это могут быть и сами многокубитовые квантовые системы, где существенную роль играют такие квантовые эффекты, как суперпозиция, запутанность состояний, особенности квантовой динамики.

Следовательно, уже сейчас потребность в квантовых компьютерах существует и с появлением новых задач она, несомненно, будет возрастать. Ограничением, однако, здесь может стать экономическая сторона вопроса.

Кроме того, развитие квантовых вычислений и квантовой информатики в целом имеет неосценимое общенаучное значение. Оно способствует более *глубокому познанию фундаментальных законов* как физики,

так и других естественных наук. А это рано или поздно неизбежно приводит к новым самым неожиданным открытиям и практическим приложениям.

В настоящее время *полномасштабные многокубитовые* квантовые компьютеры, превосходящие по своим возможностям любой работающий на булевой логике классический компьютер, являются пока умозрительной конструкцией. Они должны иметь квантовые регистры, включающие не менее 1000 кубитов, а также удовлетворять ряду других требований, в частности, вытекающих из условия помехозащищенности квантовых вычислений [9, 10]. Такого большого числа кубитов в квантовом регистре можно достигнуть, вероятнее всего, лишь при твердотельном исполнении квантовых компьютеров, работающих в условиях низких температур. Это могут быть, в частности, твердотельные ядерные магнитно-резонансные (ЯМР) квантовые компьютеры, использующие в качестве кубитов *ядерные спины* со спиновым квантовым числом $I = 1/2$.

Однако пока созданы лишь простейшие прототипы жидкостных ЯМР квантовых компьютеров на органических молекулах с числом ядерных спинов-кубитов $L \leq 7$, молекулы в которых представляют собой большой ансамбль независимо работающих компьютеров. На них были экспериментально продемонстрированы некоторые квантовые алгоритмы решения трудно разрешимых на классических компьютерах задач (*алгоритмы Гровера, Дойча-Джозса, Шора*) и уникальные свойства квантовых систем связи, таких как *телепортация*, новые возможности в *криптографии*, опробованы эффективные методы коррекции квантовых ошибок [11]. Однако создание на этом пути полномасштабного ЯМР квантового компьютера оказывается невозможным из-за быстро уменьшающегося с числом кубитов выходного сигнала ЯМР.

Разработка *квантовых кодов коррекции ошибки* для многокубитовых систем предоставила возможность выполнять коррекцию ошибок в процессе квантовых операций с *произвольной точностью* [12, 13], что может позволить реализовать надежную работу полномасштабных многокубитовых квантовых компьютеров и такие действия, которые до сих пор считались вообще несуществующими.

Количество публикаций по квантовым вычислениям и квантовой теории передачи информации в настоящее время приобрело «лавиннообразный» характер. Это в свою очередь способствовало, с одной стороны, более глубокому осмысливанию физических основ самой квантовой теории, ее связи с квантовой теорией информации, а с другой стороны, стимулировало усилия по реализации квантовых компьютеров — нового направления в вычислительной технике, а также других совершенно

новых квантовых технологий [14]. Детальный анализ состояния исследований в области квантовых компьютеров и квантовых вычислений на начало 2001 года был дан в монографиях [13, 15].

Постоянно растущее число предложенных вариантов многокубитовых квантовых компьютеров и предпринимаемые уже в этом направлении первые успешные экспериментальные шаги, использующие достижения современной нанотехнологии, внушают определенный оптимизм относительно возможности осуществления полномасштабного квантового компьютера. К этим шагам следует отнести работы по созданию кремниевых многокубитовых ЯМР квантового компьютера, основанные как на схеме Б. Кейна [16], так и с использованием других твердотельных вариантов, в Австралийском Центре технологии квантовых компьютеров [17–19].

Однако на пути к реализации полномасштабных квантовых компьютеров необходимо решить целый ряд проблем как общезначимых, так технических и технологического характера, благодаря чему ни один из предложенных вариантов многокубитовых квантовых компьютеров пока не удалось осуществить.

Рассмотрение путей решения основных проблем полномасштабного ЯМР квантового компьютера составляет основное содержание предлагаемой книги. Она состоит из двух частей. В первой части излагаются физические основы ЯМР квантовых компьютеров, общие принципы построения квантовых компьютеров и организации квантовых вычислительных операций. Во второй части рассмотрены варианты твердотельных ЯМР квантовых компьютеров различной архитектуры, проанализированы преимущества и недостатки отдельных вариантов и дана оценка их перспективности.

Литература к введению

1. Валиев К. А., Кокин А. А. Из итогов XX века: от квантов к квантовым компьютерам. I. Физические основы и принципы построения квантового компьютера // Изв. ВУЗ, Электроника, 2000, № 4/5, с. 46–53.
2. Валиев К. А., Кокин А. А. Из итогов XX века: от квантов к квантовым компьютерам. II. Квантовая элементная база // Изв. ВУЗ, Электроника, 2000, № 6, с. 3–9.
3. Валиев К. А., Кокин А. А. От квантов к квантовым компьютерам // Природа, 2002, № 12, с. 28–36.

4. *Манин Ю. И.* Вычислимое и невычислимое. — М.: Сов. Радио, 1980, с. 128.
5. *Feynman R.* Simulating Physics with Computers // *Inter. Jour. Theor. Phys.* 1982, v. 21, № 6/7, pp. 467–488. / *Фейнман Р.* Моделирование физики на компьютерах. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко : Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» т. II. — Ижевск: НИЦ РХД, 1999, с. 96–124.
6. *Schumacher B.* Quantum Coding // *Phys. Rev.*, 1995, v. A51, № 4, pp. 2738–2747.
7. *Benioff P.* Quantum-Mechanical Hamiltonian Models of Turing Machines // *Jour. Stat. Phys.*, 1982, v. 29, № 3, pp. 515–546. / *Бенёв П.* Квантово-механические гамильтоновы модели машин Тьюринга. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко : Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» т. II. — Ижевск: НИЦ РХД, 1999, с. 53–95.
8. *Deutsch D.* Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer // *Proc. Roy. Soc., Lond.* 1985, v. A400, № 1818, pp. 97–117. / *Дойч Д.* Квантовая теория принципа Чёрча–Тьюринга и универсальный квантовый компьютер. Перевод с англ. под ред. В.А.Садовниченко : Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» т. II. — Ижевск: НИЦ РХД, 1999, с. 157–189.
9. *DiVincenzo D. P.* The Physical Implementation of Quantum Computation // *Fortschr. der Phys.*, 2000, v. 48, № 9–11, pp.771–783.
10. *Steane A. M.* Overhead and Noise Threshold of Fault-Tolerant Quantum Error Correction // 2002, LANL E-print arXiv:quant-ph/0207119.
11. *Vandersypen L. M. K.* Experimental Quantum Computation with Nuclear Spins in Liquid Solution. Dissertation. Stanford University // 2002, LANL E-print arXiv:quant-ph/0205193.
12. *Кутмаев А. Ю.* Квантовые вычисления: алгоритмы и исправление ошибок // УМН, 1997, т. 52, вып. 6(318), с. 53–112.
13. *Nielsen M. A., Chuang I. I.* Quantum Computation and Quantum Information. — Cambridge: Univ. Press, 2000, 676 p.
14. *Dowling J. P., Milburn G. J.* Quantum Technology: The Second Quantum Revolution // 2002, LANL E-print arXiv:quant-ph/0206092.

15. *Валиев К. А., Кокин А. А.* Квантовые компьютеры: надежды и реальность. 2-е изд. — Москва–Ижевск: НИЦ РХД, 2002, 320 с.
16. *Kane B. E.* A silicon-based nuclear spin quantum computer // *Nature*, 1998, v. 393, N. 5, pp. 133–137.
17. *O'Brien J. L., Schofield S. R., Simmons M. Y., Clark R. G., Dzurak A. S., Curson N. J., Kane B. E., McAlpine N. S., Hawley M. E., Brown G. W.* Towards the Fabrication of Phosphorus Qubits for a Silicon Quantum Computer // *Phys. Rev.* 2001, v. B64, pp. 161401-1–5.
18. *Buehler T. M., McKinnon R. P., Lumpkin N. T., Brenner R., Reilly D. J., Macks L. D., Hamilton A. R., Dzurak A. S., Clark R. G.* Self-Aligned Fabrication Process for Quantum Computer Devices // 2002, LANL E-print, arXiv:cond-mat/0208374.
19. *Dzurak A. S., Hollenberg L. C. L., Jamieson D. N., Stanley F. E., Yang C., Bühler T. M., Chan V., Reily D. J., Wellard C., Hamilton A. R., Pakes C. I., Ferguson A. G., Gauja E., Prawer S., Milburn G. J., Clark R. G.* Charge-Based Silicon Quantum Computer Architectures Using Controlled Single-Ion Implantation // 2003, LANL E-print, arXiv:cond-mat/0306265.

Часть 1.

Физические основы ЯМР квантовых компьютеров

1. Ядерный спин – естественная двухуровневая квантовая информационная ячейка.

1.1. Вектор состояния и матрица плотности кубита

К естественным двухуровневым квантовым ячейкам – кубитам, которые могут служить основными элементами квантового компьютера, относятся как отдельные *электронные*, так и *ядерные спины* со спиновым числом $1/2$. В дальнейшем нас будут интересовать в основном кубиты на ядерных спинах.

Уровни энергии, соответствующие гамильтониану отдельного ядерного спинового момента с гиромагнитным отношением γ в постоянном магнитном поле \mathbf{B} , имеющему в единицах $\hbar=1$ вид $\mathbf{H} = -\gamma \mathbf{I} \mathbf{B}$ ($\mathbf{I} = (1/2)\boldsymbol{\sigma}$ — оператор спина, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — трехмерный вектор с *матрицами Паули* в качестве компонент), изображены на рис. 1.1.

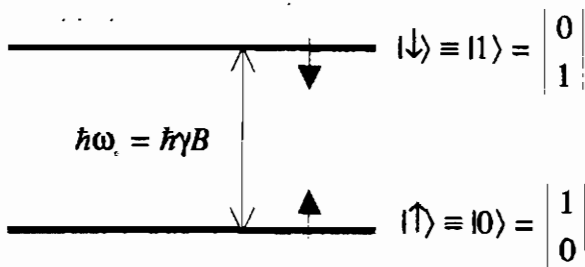


Рис. 1.1. Уровни энергии ядерного спина с $I = 1/2$ с $\gamma > 0$ в магнитном поле \mathbf{B}

Собственные состояния z -компоненты спинового момента (магнитное поле направлено по оси z) являются стандартным **ортогональным базисом** для описания спиновых квантовых состояний двухуровневой системы. Обозначение этих однокубитовых базисных состояний приведено на рис. 1.1.

Главным отличием квантового двухуровневого элемента от **классического бита** с двумя **булевыми состояниями** «0» или «1», занимаемыми с вероятностями либо $p(0) = 1$, либо $p(1) = 1$, является его способность при определенных воздействиях образовывать **когерентную суперпозицию** базисных квантовых состояний. Такая суперпозиция в случае **чистого** (когерентного) квантового состояния описывается одним из двух эквивалентных способов, а именно:

а) **Вектором состояния (спинором** первого ранга) в **двухмерном гильбертовом пространстве состояний**, в котором базисные вектора состояний играют роль единичных ортогональных векторов — ортов, представляемых двухрядными матрицами-столбцами:

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}, \quad |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1, \quad (1.1)$$

где c_0, c_1 — комплексные амплитуды, $|c_0|^2, |c_1|^2$ — вероятности, с которыми спин находится в базисных состояниях $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Вектор состояния спина характеризуется **тремя** ($2^2 - 1$) независимыми вещественными параметрами.

Вектор произвольного чистого однокубитового состояния $|\psi\rangle$ представляется также положением его конца на окружности единичного радиуса в **двухмерном** гильбертовом пространстве H_2 . Измерение такого квантового состояния состоит в определении коэффициентов разложения или, другими словами, проекций измеряемого вектора состояния на направление базисных состояний: $c_0 = \langle 0|\psi\rangle, c_1 = \langle 1|\psi\rangle$ (рис. 1.2).

б) Эрмитовой **матрицей плотности** 2×2 с определителем, равным нулю:

$$\begin{aligned} \rho = \rho^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| &= \begin{vmatrix} |c_0|^2 & c_0 c_1^* \\ c_0^* c_1 & |c_1|^2 \end{vmatrix} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 + P_z & P_- \\ P_+ & 1 - P_z \end{vmatrix} = \\ &= 1/2 (\mathbf{1} + \mathbf{P} \boldsymbol{\sigma}) = 1/2 (\mathbf{1} + P_z \boldsymbol{\sigma}_z + P_+ \boldsymbol{\sigma}_+ + P_- \boldsymbol{\sigma}_-), \end{aligned} \quad (1.2)$$

где $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$ — эрмитово-сопряженный вектор состояния, $\boldsymbol{\sigma}_\pm = 1/2(\boldsymbol{\sigma}_x \pm i\boldsymbol{\sigma}_y)$, $\mathbf{1}$ — единичная матрица 2×2 , $\mathbf{P} = \text{Sp } \rho \boldsymbol{\sigma} = 2 \text{ Sp } \rho \mathbf{I}$ — классический

трехмерный *единичный вектор Блоха* ($P_{\pm} = 2\text{Sp}(\rho\sigma_{\pm})$), $P_x \pm iP_y \equiv P_{\pm}$ – круговые составляющие вектора Блоха.

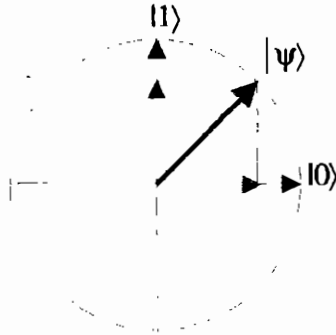


Рис. 1.2. Вектор состояния суперпозиции

$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ ($c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$) и его проекции на направление базисных состояний в двухмерном гильбертовом пространстве.

В выражении (1.2) общий фазовый множитель амплитуд отсутствует, и, следовательно, комплексные амплитуды можно считать зависящими только от *двух* ($2^2 - 2$) независимых вещественных параметров. Такими параметрами могут быть, в частности, «полярный» угол $0 \leq \theta \leq \pi$ и «азимутальный» угол (разность фаз амплитуд) $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, определяющие направление вектора Блоха в трехмерном пространстве:

$$c_0 = \cos(\theta/2), \quad c_1 = \sin(\theta/2)\exp(i\varphi). \quad (1.3)$$

Таким образом, состояние двухуровневого квантового элемента (или квантового ансамбля, состоящего из таких одинаковых не взаимодействующих элементов) определяется не только значениями вероятностей занять базисные (булевы) состояния $p(0) = |c_0|^2 = 1/2(1 + P_z)$ и $p(1) = |c_1|^2 = 1/2(1 - P_z)$, где $P_z = \cos\theta$, но и значением комплексно сопряженных *недиагональных элементов* матрицы плотности $c_0c_1^*$ или, иначе говоря, поперечными составляющими вектора Блоха P_x и P_y , называемых *когерентностями*:

$$c_0^*c_1 = 1/2(P_x + iP_y) \equiv 1/2P_+ = 1/2\sin\theta\exp(i\varphi), \quad (1.4)$$

Двухуровневый квантовый элемент, способный находиться в таком состоянии, был назван Б. Шумахером *кубитом* (quantum bit \equiv qubit) [1.1].

Кубитом, аналогично классическому биту, стала называться также и единица количества квантовой информации.

Из условия нормировки $\text{Sp} \rho = |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$ следует, что в чистом квантовом состоянии матрица плотности имеет только *одно равное единице* собственное значение. Так, матрицы плотности двух базисных состояний имеют вид:

$$\begin{aligned} |0\rangle\langle 0| \equiv |\uparrow\rangle\langle \uparrow| &= \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (P_z = p(0) = +1), \\ |1\rangle\langle 1| \equiv |\downarrow\rangle\langle \downarrow| &= \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad (P_z = -p(1) = -1). \end{aligned} \quad (1.5)$$

В этом случае вектор Блоха ориентирован, соответственно, по полю и против поля и не имеет поперечных составляющих. Заметим, что матрица плотности *базисных состояний не имеет недиагональных элементов*.

Произвольное *чистое (когерентное)* состояние кубита может быть наглядно представлено положением конца вектора Блоха на *сфере Блоха* (называемой также сферой *Пуанкаре*) с радиусом $|P| \equiv P = 1$ (рис. 1.3).

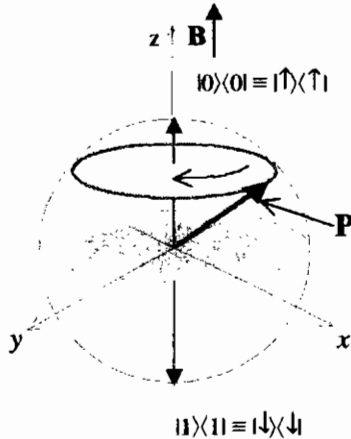


Рис. 1.3. Сфера Блоха и прецессия вектора Блоха в постоянном магнитном поле \mathbf{B} , $\gamma > 0$.

Используя уравнение движения для матрицы плотности кубита $i\partial\rho/\partial t = [\mathbf{H}, \rho]$, выражение (1.2) и гамильтониан $\mathbf{H} = -\gamma\mathbf{B}$, для вектора

Блоха получим уравнение движения:

$$d\mathbf{P}/dt = \gamma [\mathbf{P} \times \mathbf{B}] . \quad (1.6)$$

Эволюция матрицы плотности квантового двухуровневого элемента, в процессе которой возможно появление недиагональных элементов — когерентностей, полностью выражается через эволюцию составляющих вектора Блоха. Заметим, что уравнение (1.6) аналогично уравнению движения классического магнитного момента, описывающего его прецессию в постоянном магнитном поле.

Различие же классического магнитного момента и вектора Блоха связано с их энергией. В классическом случае энергия магнитного момента в магнитном поле изменяется непрерывно, а в случае кубита расстояние между уровнями имеет конечную величину $\hbar\omega_0 = \hbar\gamma B$. Заметим, что в базисных состояниях максимальная проекция вектора Блоха на ось z равна длине вектора Блоха, и в отличие от векторной модели спинового момента, согласно которой его длина в чистом состоянии в $\sqrt{3}$ раз больше максимальной проекции. Базисные квантовые состояния, обозначаемые $|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle$ и $|1\rangle \equiv |\downarrow\rangle$, соответствуют двум вертикальным положениям вектора Блоха, в которых, в отличие от спинового момента, его прецессия вокруг оси z отсутствует.

Вместо угловых координат θ и φ иногда удобно перейти к комплексной переменной $Z = \exp(i\varphi) \operatorname{tg}(\theta/2)$, что соответствует *стереографической проекции* единичной сферы на комплексную плоскость Z :

$$|\psi(Z)\rangle = (1 + |Z|^2)^{-1/2} (|\uparrow\rangle + Z|\downarrow\rangle) . \quad (1.7)$$

Базисным состояниям в этом случае соответствуют значения $Z=0, \infty$.

Унитарный оператор $U = (U^+)^{-1}$, осуществляющий *поворот* вектора состояния $|\psi\rangle$ в двумерном гильбертовом пространстве, представляется унитарной матрицей второго порядка с детерминантом равным единице (такая матрица называется **унимодулярной**).

Такой поворот эквивалентен определенному повороту вектора Блоха в трехмерном пространстве. На языке теории групп это выражается следующим образом: совокупность унитарных унимодулярных преобразований в *двухмерном гильбертовом пространстве* образует комплексную *специальную группу унимодулярных унитарных матриц SU_2* , гомоморфную (эквивалентную) группе вращения в *трехмерном евклидовом пространстве*, преобразующую состояния кубита по двумерному *неприводимому представлению D_{12}* .

Отметим здесь также, что на совокупности матриц 2×2 , состоящей из антикоммутирующих матриц Паули, единичной вещественной

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

и мнимой $i \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$ матриц, может быть построен базис некоторого

8-мерного линейного пространства так называемой *геометрической алгебры* или *алгебры Клиффорда*, нашедшей применение для описания динамики спиновых систем [1.2, 1.3].

Заключение: Матрица плотности произвольного чистого квантового состояния отдельного кубита однозначно определяется значениями составляющих классического трехмерного единичного *вектора Блоха* (два независимых вещественных параметра) или его *стереографической проекцией* на комплексную плоскость z .

Существенным преимуществом такого представления является *исключение неопределенного общего фазового множителя*, характерного для вектора состояния отдельного кубита.

1.2. Динамические процессы в однокубитовом ансамбле. Уравнение Блоха и его обобщение

Квантовое состояние замкнутой системы, включающей взаимодействующие между собой кубиты и их окружение, является чистым и описывается многомерным вектором состояния $|\Psi\rangle$. Ему соответствует полная матрица плотности $|\Psi\rangle\langle\Psi|$.

Система из одинаковых кубитов, не взаимодействующих между собой и с окружением, соответствует чистому однокубитовому ансамблю, и ее матрица плотности имеет тот же вид, что и для отдельного кубита $\rho = 1/2 (\mathbf{1} + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ с длиной вектора Блоха $P = 1$ (1.2).

В общем случае *однокубитовым ансамблем* назовем систему из *одинаковых кубитов*, описываемую *приведенной* к одному кубиту матрицей плотности, которая определяется, как след от полной матрицы плотности по всем состояниям f , кроме состояния одного кубита, $\rho = \text{Sp}_f |\Psi\rangle\langle\Psi|$.

В отличие от чистого состояния, такое состояние является *смешанным* и описывается *только матрицей плотности*, но не вектором состояния. Приведенная однокубитовая матрица плотности имеет ту же структуру, что и матрица плотности отдельного кубита, но с длиной вектора Блоха $P < 1$ и, следовательно, характеризуется уже не двумя, а *тремя* $(2^2 - 1)$ независимыми вещественными параметрами P_z, P_x, P_y .

Равновесная приведенная матрица плотности, соответствующая равновесному значению вектора Блоха $P_z = P_0$, $P_{\pm} = 0$ имеет вид $\rho_0 = \begin{vmatrix} P_0 & 0 \\ 0 & P_1 \end{vmatrix}$, то есть имеет не *одно*, а *два* собственных значения, а ее определитель не равен нулю.

В случае, когда окружение характеризуется температурой T , а взаимодействие между кубитами пренебрежимо мало, диагональные элементы матрицы плотности или населенности равны

$$p_0 = (1 + P_0)/2 = \frac{\exp(\hbar\omega_0/2kT)}{\exp(\hbar\omega_0/2kT) + \exp(-\hbar\omega_0/2kT)},$$

$$p_1 = (1 - P_0)/2 = 1 - p_0, \quad P_0 = \text{th}(\hbar\omega_0/2kT). \quad (1.8)$$

Матрицу ρ_0 можно записать также в форме матрицы так называемого *квазичистого* (pseudo-pure) *квантового состояния*, то есть в виде двух слагаемых: одного, пропорционального единичной матрице, а другого, пропорционального матрице плотности чистого основного состояния и равновесному значению вектора Блоха P_0 , который при комнатных температурах является малым множителем порядка $\hbar\omega_0/2kT \ll 1$:

$$\rho_0 = p_1 \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} + (p_0 - p_1) \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = (1 - P_0)/2 \mathbf{1} + P_0 |\uparrow\rangle\langle\uparrow|. \quad (1.9)$$

Процесс *линейной* релаксации неравновесного смешанного состояния однокубитового ансамбля к равновесному смешанному состоянию $\mathbf{P}(t) \rightarrow \mathbf{P}_0$ обычно описывается с помощью независящей от времени *эрмитовой релаксационной матрицей* 3×3 , которая в общем случае содержит три вещественных и три комплексных независимых параметра. Макроскопический ансамбль не взаимодействующих между собой ядерных спинов во внешнем поле благодаря линейности уравнений движения ведет себя одинаковым образом, независимо от того используется классическое или квантовое описание полного спина. Однако при включении взаимодействия между спинами уравнения движения для операторов спина, вообще говоря, становятся нелинейными, и квантовое описание ансамбля становится отличным от классического описания.

При *одноосной симметрии* ансамбля, задаваемой внешним полем \mathbf{B} (ось z), число независимых элементов релаксационной матрицы сводится к *одному комплексному* и *одному вещественному*, им соответствуют *два релаксационных процесса*.

Декогерентизация — процесс потери когерентности квантового состояния. Впервые была рассмотрена Л. Д. Ландау в 1927 году [1.4]. В случае однокубитового ансамбля вещественная часть недиагонального элемента релаксационной матрицы определяет обратное время декогерентизации T_D или характерное «поперечное» время релаксации T_{\perp} поперечных составляющих вектора Блоха $P_{\pm}(t) \rightarrow 0$, а его мнимая часть определяет сдвиг резонансной частоты, сопровождающий этот процесс.

Диссипация — процесс рассеяния энергии, соответствующий переходу продольной составляющей вектора Блоха в равновесное состояние $P_z(t) \rightarrow P_0 < 1$, характеризуется «продольным» временем релаксации T_{\parallel} .

Для описания динамики однокубитового ансамбля из ядерных спинов при наличии однородного переменного магнитного поля $\mathbf{V}(t) = \mathbf{V}\mathbf{k} + \mathbf{b}(t)$ широко используется сформулированное **Р. Ф. Блохом** еще в 1946 году [1.5] феноменологическое уравнение, которое при $\mathbf{b}(t) \perp \mathbf{k}$ применительно к вектору Блоха $\mathbf{P}(t)$ может быть записано в виде:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} + \frac{P_x \mathbf{i} + P_y \mathbf{j}}{T_{\perp}} + \frac{(P_z - P_0(B))\mathbf{k}}{T_{\parallel}} = \gamma[\mathbf{P} \times \mathbf{V}(t)], \quad (1.10)$$

где \mathbf{i} , \mathbf{j} и \mathbf{k} — орты трехмерного пространства, а сдвиг резонансной частоты не учитывается.

Позднее ему было дано квантово-статистическое обоснование и сформулированы основные условия его применимости [1.6, 1.7]. К ним, наряду с условиями малости параметра, характеризующего взаимодействие спиновой системы с окружением, позволяющим ограничиться борновским приближением, и марковского характера процессов случайных воздействий, обеспечиваемого быстро флуктуирующими случайными полями, создаваемыми окружением, относятся условия однородности постоянного магнитного поля и малости переменных магнитных полей $V \gg b(t)$. Со случаем быстро флуктуирующих случайных полей мы, в частности, встречаемся при рассмотрении ядерного резонанса в жидкости с интенсивным вращательным и поступательным броуновским движением молекулы.

Феноменологическое уравнение (1.10) было обобщено на случай неоднородных постоянных полей путем добавления в уравнение Блоха диффузионного слагаемого вида $D\Delta\mathbf{P}(r)$ [1.8].

Ф. Блохом было также показано, что в случае сильных переменных полей ($V \sim b(t)$) при тех же условиях, когда применимо уравнение (1.10),

и при $T_{\perp} = T_{\parallel}$ его можно представить в виде [1.9, 1.10]:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} + \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{P}_0(\mathbf{B}(t)))}{T_{\parallel}} = \gamma[\mathbf{P} \times \mathbf{B}(t)], \quad (1.11)$$

где $\mathbf{P}_0(\mathbf{B}(t))$ — равновесное значение вектора Блоха, соответствующее мгновенному значению поля $\mathbf{B}(t)$.

Для описания динамики спиновых систем в твердых телах при низких температурах, когда отсутствует быстрофлуктуирующая случайная поля, уравнения Блоха (1.10) и (1.11) не могут быть использованы в полной мере. Главным образом, это относится к описанию затухания поперечных составляющих вектора Блоха, то есть процессов декогерентизации.

Если из уравнения (1.10) при постоянном внешнем поле $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ для круговой поперечной составляющей вектора Блоха $P_{\perp}(t)$ следует выражение

$$\frac{dP_{\perp}(t)}{dt} - i\omega_0 P_{\perp}(t) + \frac{P_{\perp}(t)}{T_{\perp}} = 0, \quad (1.12)$$

то соответствующее обобщенное выражение для случая немарковского характера флуктуирующих случайных полей может быть представлено (см. следующий раздел 1.3) в виде

$$\frac{dP_{\perp}(t)}{dt} - i\omega_0 P_{\perp}(t) + \int_0^t f(\tau) \exp(i\omega_0 \tau) P_{\perp}(t - \tau) d\tau = 0, \quad (1.13)$$

где функция $f(\tau)$ отражает эффекты последствия для случайных воздействий на $P_{\perp}(t)$ и, следовательно, имеет смысл **функции памяти**. Для определения функции $f(t)$ можно использовать феноменологический подход, выбирая ее вид из модельных соображений с небольшим числом постоянных параметров, например, в виде экспоненциально затухающей зависимости. Марковским процессам и уравнениям типа (1.12) будет очевидно соответствовать функция памяти вида $f(\tau) \approx T_{\perp}^{-1} \delta(\tau)$.

Заключение: Лежащее в основе приведенных выше уравнений предположение о марковском характере случайных воздействий на спин со стороны окружения *не является адекватным в случае твердого тела* при рассмотрении процессов релаксации (декогерентизации) поперечных составляющих вектора Блоха. Требуется более общее уравнение, учитывающее немарковский характер случайных полей, воздействующих на ядерные спины со стороны окружения в твердом теле.

1.3. Обобщенное уравнение Блоха для немарковского случайного процесса*

Здесь мы приведем вывод уравнения (1.13), используя ряд упрощающих предположений (полный вывод обобщенного уравнения Блоха был приведен в [1.11]).

Предположим, что спиновая система (или однокубитовый ансамбль) описывается гамильтонианом $\mathbf{H}_S = -(\omega/2) \sigma_z$, окружающая среда — гамильтонианом \mathbf{H}_B , взаимодействие с окружением — оператором \mathbf{H}_{SB} . В целом, это замкнутая система, описываемая полным гамильтонианом:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB}, \quad (1.14)$$

при этом $[\mathbf{H}_S, \mathbf{H}_B] = 0$, но $[\mathbf{H}_B, \mathbf{H}_{SB}] \neq 0$.

Состояние такой замкнутой системы, включающей кубиты и окружение, определяется матрицей плотности $\rho(t)$, удовлетворяющей уравнению фон Неймана

$$i\partial\rho(t)/\partial t = [\mathbf{H}, \rho(t)] \quad (1.15)$$

с начальным условием $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B(0)$, $\rho_S(0) = 1/2 P_-(0) \sigma_z$, при этом динамика однокубитового ансамбля описывается *приведенной матрицей плотности* $\rho_S(t)$, определяемой как след от матрицы $\rho(t)$ по степеням свободы окружения (знак \otimes — прямое (тензорное) произведение матриц-столбцов):

$$\rho_S(t) = \text{Sp}_B \rho(t) = 1/2 (1 + P_z \sigma_z + P_+ \sigma_- + P_- \sigma_+). \quad (1.16)$$

При этом, зависимость от времени поперечной составляющей вектора Блоха $P_-(t)$ определяется выражением:

$$P_-(t) = 2\text{Sp}(\rho(t)\sigma_-) = 2\text{Sp}(\rho_B(t)\sigma_-). \quad (1.17)$$

Перейдем теперь к представлению взаимодействия:

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \exp(-i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t) \rho_{\text{int}}(t) \exp(i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t), \\ \mathbf{H}_{SB} &= \exp(i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t) \mathbf{H}_{SB}(t) \exp(-i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t), \end{aligned} \quad (1.18)$$

$$i\partial\rho_{\text{int}}/\partial t = [\mathbf{H}_{SB}(t), \rho_{\text{int}}(t)] \quad (1.19)$$

и запишем выражение (1.17) в виде

$$P_-(t) = 2\text{Sp}(\rho(t)\sigma_-) = \exp(i\omega_0 t) 2\text{Sp}(\rho_{\text{int}}(t)\sigma_-), \quad (1.20)$$

Представим далее уравнение (1.19) в интегральной форме

$$\rho_{\text{int}}(t) = \rho(0) - i \int_0^t dt' [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t'), \rho_{\text{int}}(t')] \quad (1.21)$$

или иначе в виде

$$\rho_{\text{int}}(t) = \rho(0) - i \int_0^t dt' [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t'), \rho(0)] - \int_0^t dt' [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t'), \int_0^{t'} dt'' [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t''), \rho_{\text{int}}(t'')]]. \quad (1.22)$$

Используя теперь (1.20) и (1.22), запишем

$$\begin{aligned} \frac{dP_-(t)}{dt} = & i\omega_0 P_-(t) - 2 \exp(i\omega_0 t) \{ i \text{Sp} \sigma_- [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t), \rho(0)] + \\ & + \text{Sp} \sigma_- [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t), \int_0^t dt' [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t'), \rho_{\text{int}}(t')]] \}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Совершая затем циклическую перестановку операторов под знаком следа в (1.23), найдем

$$\begin{aligned} \frac{dP_-(t)}{dt} = & i\omega_0 P_-(t) - 2 \text{Sp} \{ i [\sigma_-, \mathbf{H}_{\text{SB}}(0)] \rho(0) + \\ & + \int_0^t \exp(i\omega_0(t-t')) dt' [[\sigma_-, \mathbf{H}_{\text{SB}}(t-t')], \mathbf{H}_{\text{SB}}] \rho(t') \}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Полученное выражение является точным.

Примем далее, что $\text{Sp} \mathbf{H}_{\text{SB}}(0) \rho_{\text{B}}(0) = 0$ и ограничимся вторым порядком малости, относительно взаимодействия с окружением, что как раз соответствует использованию борновского приближения для матрицы плотности $\rho(t)$. Это позволяет в правой части уравнения (1.24) записать

$$\rho(t) \approx \rho_{\text{S}}(t) \otimes \rho_{\text{B}}(0). \quad (1.25)$$

Кроме того, предположим здесь, что гамильтониан взаимодействия спиновой системы с окружением \mathbf{H}_{SB} коммутирует с \mathbf{H}_{S} , то есть имеет только диагональные матричные элементы в базисных состояниях (так называемое адиабатическое приближение, см. раздел 3.3). В результате получим

$$\frac{dP_-(t)}{dt} - i\omega_0 P_- + \int_0^t f(\tau) \exp(i\omega_0 \tau) P_-(t-\tau) d\tau = 0, \quad (1.13)$$

где

$$f(\tau) = \text{Sp}\{[\sigma_-, \mathbf{H}_{\text{SB}}(\tau)], \mathbf{H}_{\text{SB}} \sigma_+ \otimes \rho_{\text{B}}(0)\} \quad (1.26)$$

функция памяти, являющаяся одной из компонент общего тензора памяти, возникающего в случае произвольного вида гамильтониала \mathbf{H}_{SB} . Таким образом, для описания процессов релаксации и декогерентизации квантовых состояний в односпиновом твердотельном ансамбле с учетом сделанных выше упрощающих предположений, теперь может быть сформулировано *обобщенное уравнение Блоха* следующего вида

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} + \int_0^t f(\tau) [(\cos(\omega_0\tau)P_x(t-\tau) + \sin(\omega_0\tau)P_y(t-\tau))\mathbf{i} + \\ + (-\sin(\omega_0\tau)P_x(t-\tau) + \cos(\omega_0\tau)P_y(t-\tau))\mathbf{j}]d\tau + \frac{(P_z(t) - P_0)\mathbf{k}}{T_{\parallel}} = \gamma(\mathbf{P}(t) \times \mathbf{B}). \end{aligned} \quad (1.27)$$

Вклад неадиабатических процессов, определяемых процессами, сопровождающимися переворотом спина, за счет воздействия быстофлуктуирующей части случайных полей может быть грубо учтен путем включения в функцию памяти дополнительного δ -образного слагаемого:

$$f(\tau) \rightarrow f(\tau) + 1/T_{\perp}' \cdot \delta(\tau). \quad (1.28)$$

Соответствующее обобщение уравнения (1.13) на случай немарковского характера случайных воздействий рассматривалось ранее нами в [1.12]. Для этого была развита теория возмущений не для переменных $P_-(t)$, а для их изображений по Лапласу.

Так, полагая $P_-(t < 0) = 0$, для изображения по Лапласу будем иметь

$$P_-(p) = \int_0^{\infty} P_-(t) \exp(-pt) dt. \quad (1.29)$$

В [1.12] было показано, что в лапласовском представлении при соответствующих упрощающих предположениях, уравнение для поперечной круговой составляющей вектора Блоха принимает вид

$$(p - i\omega_0 + F(p))P_-(p) = P_-(t=0), \quad (1.30)$$

где $F(p) = \int_0^{\infty} f(t) \exp(-(p - i\omega_0)t) dt$ — преобразование Лапласа функции

памяти $f(t)$. В рамках теории возмущений для $F(p)$ может быть сформулировано уравнение, аналогичное (1.30), содержащее вместо изображения

$P(p)$ функцию $F(p)$, а вместо функции $F(p)$ некоторую функцию $G(p)$, для которой, в свою очередь, можно получить соответствующее уравнение и т.д. При условии малости параметра, характеризующего взаимодействие спиновой системы с окружением, получающаяся цепочка алгебраических уравнений может быть оборвана на некотором звене, что приводит к замкнутому уравнению.

Переход от (1.30) обратно к временному представлению производится с помощью теоремы умножения Бореля для изображений по Лапласу. В результате последнее слагаемое в (1.30) заменится на свертку исходных функций, и мы снова получим уравнение (1.13).

Заключение: Для описания процессов декогерентизации в твердотельных структурах при низких температурах следует использовать соответствующее обобщение уравнения Блоха, учитывающее *немарковский характер* случайных процессов (эффекты последействия). В общем случае, процесс релаксации характеризуется не временами релаксации, а зависящим от времени тензором памяти, учитывающим эффекты последействия.

2. Квантовый регистр в структуре квантового компьютера

2.1. Основные принципы работы квантового компьютера

При выборе конкретной схемы квантового компьютера, необходимо, *во-первых*, выбрать физическую систему — элементную базу, которая обеспечит возможность создания в компьютере достаточного числа управляемых кубитов; *во-вторых*, определить физический механизм, отвечающий за взаимодействие кубитов между собой и с окружением; *в-третьих*, определить способы селективного управления кубитами и измерения их состояний на выходе. Все это вместе взятое и определяет так называемое «*аппаратное обеспечение*» (hardware) квантового компьютера.

Принципиальная схема работы любого квантового компьютера представлена на рис. 1.4 [1.13]. Основной его частью является *квантовый регистр*, являющийся некоторой совокупностью из L , вообще говоря, взаимодействующих между собой *кубитов*. В частности, это может быть одномерная цепочка электронных или ядерных спинов, рассматриваемых в качестве кубитов. 2^L -мерное гильбертово пространство, в котором могут быть представлены все возможные квантовые состояния кван-

тового регистра, соответственно, будет иметь 2^L *ортогональных базисных векторов состояния*.

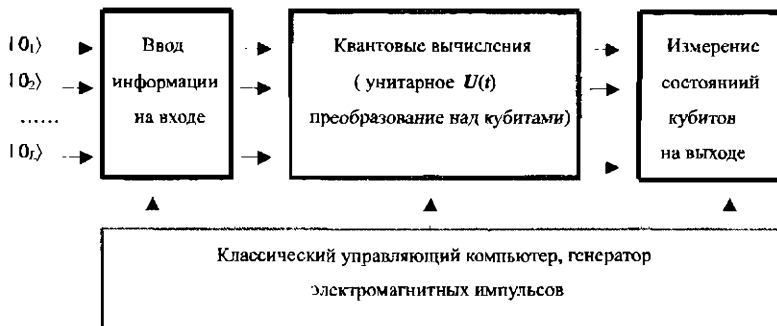


Рис. 1.4. Схематическая структура квантового компьютера.

Перед тем, как вводить информацию в компьютер все кубиты регистра должны быть приведены в *исходные основные* базисные (булевы) чистые состояния, то есть в квантовые состояния вида

$$\begin{aligned}
 |0\rangle &\equiv |\uparrow_{L-1}\rangle \otimes |\uparrow_{L-2}\rangle \otimes |\uparrow_{L-3}\rangle \otimes \dots \otimes |\uparrow_0\rangle \equiv |0_{L-1}\rangle, |0_{L-2}\rangle, |0_{L-3}\rangle, \dots |0_0\rangle \equiv \\
 &\equiv |0_{L-1}, 0_{L-2}, 0_{L-3}, \dots 0_0\rangle.
 \end{aligned}
 \quad (2.1)$$

Эту операцию называли подготовкой начального состояния или *инициализацией* (initializing) квантового регистра. Некоторые проблемы, связанные с приготовлением инициализированного состояния в многокубитовом квантовом регистре на ядерных спинах, мы обсудим ниже в разделе 4.2.

Далее, с помощью селективных электромагнитных импульсов, управляемых классическим компьютером, основные состояния определенных кубитов $|0\rangle$ переводятся в неосновные (метастабильные) базисные состояния $|1\rangle$. Базисные состояния отдельных спинов-кубитов $|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle$ и $|1\rangle \equiv |\downarrow\rangle$ будем далее называть *вычислительными*. У соответствующих векторов Блоха отличны от нуля только продольные составляющие $P_z = \pm 1$.

Начальное основное состояние всего регистра

$$|0\rangle \equiv |0_{L-1}, 0_{L-2}, 0_{L-3}, \dots, 0_0\rangle$$

затем переводится в базисные состояния вида

$$|x\rangle \doteq |x_{L-1}, x_{L-2}, x_{L-3}, \dots, x_0\rangle \quad (x_i = 0, 1),$$

задающие *бинарное представление всех L -разрядных чисел*

$$x = x_{L-1} 2^{(L-1)} + x_{L-2} 2^{(L-2)} + x_{L-3} 2^{(L-3)} + \dots + x_0 2^0. \quad (2.1)$$

Эти состояния и представляют собой систему ортогональных базисных векторов состояний для квантового регистра. При этом все неосновные базисные состояния в квантовом регистре должны иметь достаточно большое время жизни, определяющее их релаксацию в основное состояние. Важно заметить, что в идеальном случае они не образуют никакой суперпозиции, то есть ортогональные *базисные состояния $|x\rangle$ не содержат когерентностей*, и их релаксация к основному состоянию $|0\rangle$ в твердых телах при низких температурах происходит только за счет очень *медленных диссипативных процессов*.

Однако реальной ситуации состояния отдельных кубитов как в исходном, так и в других базисных состояниях квантового регистра могут образовывать некоторую суперпозицию четных базисных состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ с непрерывными комплексными коэффициентами. Значения этих коэффициентов определяются неидеальностью управляющих импульсов и внешними помехами. Возникновение такой когерентной суперпозиции приводит к нарушению ортогональности базисных состояний и может стать одним из существенных препятствий на пути реализации квантового компьютера. Эти вопросы обсуждаются подробно в разделе 4.2.

При вводе информации в квантовый компьютер состояние регистра с помощью соответствующих электромагнитных импульсов преобразуется теперь в *когерентную суперпозицию* базисных состояний, описываемую либо 2^L -мерным вектором состояния $|\psi_{1,2,\dots,L}(0)\rangle = \sum_x c_x |x\rangle$ с 2^L комплексными числами c_x , либо эрмитовой матрицей плотности $2^L \times 2^L$ с $2^{2L} - 1$ независимыми вещественными параметрами:

$$\rho_{1,2,\dots,L} = \rho_{1,2,\dots,L}^\dagger = |\psi_{1,2,\dots,L}\rangle\langle\psi_{1,2,\dots,L}|, \text{Sp } \rho_{1,2,\dots,L} = 1. \quad (2.2)$$

В таком виде информация подвергается воздействию квантового процессора, выполняющего последовательность квантовых операций.

В идеальном случае логические квантовые операции в квантовом компьютере являются *логически и термодинамически обратимыми* и осуществляются с помощью *унитарных преобразований $\hat{U}(t)$* над состоянием регистра. Следовательно, на этом этапе важно, чтобы было

обеспечено *подавление декогерентизации* когерентных квантовых состояний до необходимого для выполнения квантовых операций уровня и исправление случайных ошибок, вызываемых неидеальностью используемых импульсов и различными внешними помехами.

К моменту времени t в результате выполнения квантовых операций исходное квантовое состояние становится новой суперпозицией вида

$$|\Psi_{1,2,\dots,L}(t)\rangle = \sum_{y,x} U_{yx}(t) c_x |x\rangle, \quad (2.3)$$

где матричные элементы $U_{yx}(t)$ унитарного оператора $U(t)$ определены на базисных состояниях $|x\rangle$ и $|y\rangle$. Эта суперпозиция и представляет собой результат проведения вычислительных операций на выходе компьютера, который определяется путем измерения состояния квантового регистра.

Заключение: В любом квантовом компьютере должны быть обеспечены условия, при которых, независимо от имеющегося взаимодействия между кубитами, его основное начальное (*инициализированное*) и другие квантовые *базисные состояния* квантового регистра с достаточной точностью *не образовывали бы когерентных суперпозиций базисных состояний* отдельных кубитов. При этом необходимо обеспечить достаточную степень метастабильности всех базисных состояний квантового регистра. *Декогерентизация* когерентных квантовых состояний, образующихся в квантовом регистре в результате процессов записи, выполнения логических унитарных преобразований и считывания, должна быть *подавлена* до необходимого уровня.

2.2. Основные одно- и двухкубитовые квантовые операции

В квантовом компьютере, как известно, логические операции разбиваются на дискретную совокупность последовательных во времени базисных квантовых логических операций — квантовых вентилях (quantum gates). Каждый квантовый вентиль за фиксированный промежуток времени выполняет унитарное преобразование над определенным числом кубитов. Одним из основных условий, выполнение которого необходимо для построения квантового компьютера, является наличие *универсального* набора однокубитовых и двухкубитовых квантовых вентилях [1.14], с помощью которого может быть выполнено *произвольное* унитарное преобразование $U(t)$ над L кубитовым регистром в 2^L -мерном гильбертовом пространстве.

К однокубитовым квантовым операторам, действующим только на один кубит, относятся различные операторы поворота вектора состояния кубита в двухмерном гильбертовом пространстве. Одной из таких операций является *однокубитовая операция инверсии НЕ (NOT)*, которая

осуществляет инверсию базисных состояний, то есть перевод состояния $|0\rangle$ в $|1\rangle$ или наоборот:

$$\text{NOT} = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \equiv \sigma_x = -i \exp(i\pi I_x), \quad (2.4)$$

которую можно рассматривать как умноженную на мнимую единицу операцию поворота вектора Блоха вокруг оси x на угол π . Такие операции легко осуществляются методами импульсной ЯМР спектроскопии (с помощью так называемых π -импульсов).

Другой однокубитовой операцией является *операция Адамара Н₁* (M.Hadamard)

$$H_1 = \sqrt{1/2} \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} \equiv \sqrt{1/2} (\sigma_x + \sigma_z) = -i \exp(i\pi(I_x + I_z)/2^{1/2}). \quad (2.5)$$

В ЯМР квантовых компьютерах она определяет поворот вектора Блоха на угол π вокруг оси, проходящей под углом 45° к оси x в плоскости xz . При использовании ЯМР методов такие операции производятся во вращающейся с резонансной частотой вокруг оси z системе координат.

Заметим, что указанные матрицы NOT и H_1 имеют определитель, равный -1 и, следовательно, не являются унитарными; они становятся такими при умножении на мнимую единицу и тогда описывают операции поворота вектора состояния в гильбертовом пространстве.

Характерным свойством операции Адамара является то, что, действуя на любое из базисных состояний, она создает *равновероятную суперпозицию обоих базисных состояний*, то есть суперпозицию с одинаковыми амплитудами, но с отличающимися на π в случае действия на состояние $|1\rangle$ фазами:

$$H_1 \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \sqrt{1/2} \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix}, \quad H_1 \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} = \sqrt{1/2} \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \end{vmatrix}. \quad (2.6)$$

В случае двухкубитовой системы (квантовый регистр из двух кубитов) имеется *четыре* вычислительных *базисных состояний* в четырехмерном гильбертовом пространстве, построенных на однокубитовых состояниях:

$$|00\rangle = |0_1\rangle \otimes |0_2\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix}. \quad (2.7)$$

Вектор произвольного *чистого двухкубитового состояния* представляется суперпозицией базисных состояний:

$$|\psi_{12}\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle = \begin{pmatrix} c_{00} \\ c_{01} \\ c_{10} \\ c_{11} \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

где $|c_{00}|^2 + |c_{01}|^2 + |c_{10}|^2 + |c_{11}|^2 = 1$ с *шестью* (кроме общей фазы) независимыми *вещественными* параметрами.

Свойство чистого двухкубитового состояния образовывать суперпозицию, описываемую вектором состояния, не представляемым *ни в каком базисе* в виде прямого произведения $|\psi_{12}\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$, называют *запутанностью* (немецкий термин, введенный впервые Шредингером — *Verschränkung* [1.15] или английский — *entanglement*). Оно означает наличие *особых нелокальных квантовых корреляций* между двумя спинами, не имеющих аналога в классических системах. Свойство запутанности квантовых состояний играет *существенную* роль в квантовых вычислениях. Запутанные состояния представляют собой особый *физический ресурс*, позволяющий решать наиболее важные квантовые задачи.

Интенсивность квантовых корреляций или *степень запутанности* удобно характеризовать *инвариантным* параметром — *согласованностью* (concurrence) C .

Для чистого состояния он определяется выражением:

$$0 \leq C = 2 |c_{00}c_{11} - c_{01}c_{10}| \leq 1. \quad (2.9)$$

Для незапутанных (сепарабельных) состояний $C = 0$

$$|\psi_{12}\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle, \quad \rho_{12} = \rho_1 \otimes \rho_2. \quad (2.10)$$

Двухкубитовые операции соответствуют поворотам в четырехмерном гильбертовом пространстве состояний двух кубитов, для которых необходимо, чтобы, по крайней мере, на время их выполнения имело место взаимодействие между кубитами, обеспечивающее образование определенных корреляций между состояниями кубитов. Основным базовым двухкубитовым вентилем является обратимый контролируемый инвертор или оператор *контролируемое НЕ* (Controlled NOT \equiv CNOT).

Этот вентиль описывается квантовой матрицей 4×4 (в базе $|0_1 0_2\rangle, |0_1 1_2\rangle, |1_1 0_2\rangle, |1_1 1_2\rangle$), которую можно представить в следующих формах:

$$\mathbf{CNOT} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \otimes \mathbf{1} + \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \otimes \sigma_x \equiv$$

$$\equiv |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbf{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x = 1/2 (\hat{\mathbf{1}} + 2\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes 2\mathbf{I}_x - 4\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{I}_x), \quad (2.11)$$

где $\hat{\mathbf{1}} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ – единичная матрица 4×4 .

Действие оператора **CNOT** состоит в следующем: если первый кубит, называемый *контролирующим* (control), находится в состоянии $|0\rangle\langle 0|$, то оператор **CNOT** не изменяет состояние второго, *контролируемого* (target) кубита, но если первый кубит находится в состоянии $|1\rangle\langle 1|$, то оператор **CNOT** инвертирует состояние второго кубита.

В сравнении с аналогичным классическим вентилем исключаящее ИЛИ (XOR) квантовый вентиль **CNOT** обладает более богатыми возможностями, поскольку он может действовать на суперпозицию состояний, а также создавать эту суперпозицию, создавать и разрушать запутанные двухкубитовые состояния.

Например, так называемое запутанное (entangled) синглетное ЭПР – состояние (состояние Эйнштейна-Подольского-Розена) $\sqrt{1/2} (|01\rangle - |10\rangle)$ можно создать из незапутанного состояния $|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \equiv |1\rangle \otimes |1\rangle$ с помощью преобразования, построенного из операций **H**₁ и **CNOT**:

$$\mathbf{NOT} \cdot (\mathbf{H}_1 |1\rangle \otimes |1\rangle) = \mathbf{CNOT} \cdot (\sqrt{1/2} (|0\rangle - |1\rangle) \otimes |1\rangle) = (|01\rangle - |10\rangle). \quad (2.12)$$

Среди других двухкубитовых операций укажем на операцию обмена **SWAP**, определяемую матрицей, которую можно выразить через матрицы Паули или три операции типа **CNOT**:

$$\mathbf{SWAP} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1/2 (\hat{\mathbf{1}} + \sigma_1 \otimes \sigma_2) = \mathbf{CNOT} \cdot \overline{\mathbf{CNOT}} \cdot \mathbf{CNOT}, \quad (2.13)$$

где

$$\overline{\text{CNOT}} = 1 \otimes |0\rangle\langle 0| + \sigma_x \otimes |1\rangle\langle 1| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (2.14)$$

Под действием операции **SWAP** происходит обмен состояниями двух кубитов.

Другим важным двухкубитовым оператором, с которым мы встретимся позднее, является оператор *контролируемого изменения фазы* состояния второго кубита $|1\rangle\langle 1|$:

$$\mathbf{V}_{j,k} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(i\theta_{j,k}) \end{vmatrix}, \quad (2.15)$$

где $\theta_{j,k} = \pi 2^{k-j}$ — относительная фаза двух кубитов, а $k-j$ — «расстояние» между ними в регистре $1 \leq k-j \leq L$.

Импульсные методы ЯМР спектроскопии позволяют осуществлять различные двухкубитовые операции (см. [1.13]).

Совокупность всех операций, формирующих исходное состояние квантового регистра и осуществляющих унитарные преобразования, соответствующие алгоритму вычисления, подавление декогерентизации квантовых состояний и исправление случайных ошибок, считывание результатов вычислений (измерение состояний кубитов регистра на выходе компьютера) играет здесь ту же роль, что и *«программное обеспечение»* (software) в классических цифровых компьютерах.

Заключение: Все основные элементарные однокубитовые и двухкубитовые операции в квантовом регистре на ядерных спинах соответствуют определенным поворотам векторов состояния в гильбертовом пространстве, они могут осуществляться с помощью хорошо известных методов импульсной ЯМР спектроскопии.

2.3. Квантовое дискретное фурье-преобразование и трудности его реализации на ЯМР квантовых компьютерах*

Рассмотрим здесь в качестве примера применения рассмотренных выше одно- и двухкубитовых операций, реализуемых на ЯМР квантовом

компьютере, выполнение многокубитового N -мерного *квантового дискретного фурье-преобразования* (quantum Fourier transform QFT_N). Оно представляет собой унитарное преобразование состояния L -кубитового квантового регистра $|x\rangle = |x_{L-1}, x_{L-2}, \dots, x_0\rangle$, описываемого $N = 2^L$ -мерным

вектором состояния вида $\sum_{x=0}^{N-1} f(x) |x\rangle$ в состояние $\sum_{k=0}^{N-1} \varphi(k) |k\rangle$. Здесь

x — двоичное представление целых чисел, нумерующих базисные состояния регистра на шкале «пространственных координат» $0 \leq x \leq N-1$ (см. раздел 2.1), а k пробегает те же значения, но на шкале «пространственных частот»:

$$\text{QFT}_N: \sum_{x=0}^{N-1} f(x) |x\rangle \rightarrow \sum_{k=0}^{N-1} \varphi(k) |k\rangle, \quad (2.16)$$

где *амплитуда фурье-преобразования* $\varphi(k)$ определяется выражением

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} \exp(2\pi i k x / N) f(x). \quad (2.17)$$

Минимальный шаг, с которым дискретные значения x располагаются на x -шкале, соответствует элементарной *информационной ячейке* и равен единице. В двухмерной x - k - плоскости минимальной информационной ячейке соответствует прямоугольник площадью N (рис. 1.5). Состояние квантового регистра в каждой информационной ячейке этой шкалы максимально локализовано и не зависит от значений по шкале k .

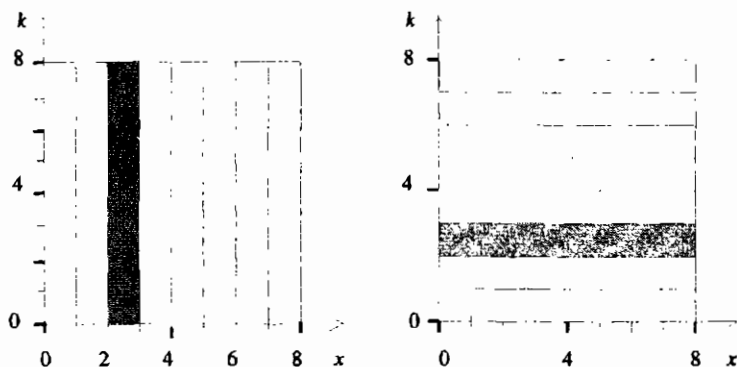


Рис. 1.5. Информационные ячейки для состояний 3-кубитового квантового регистра, локализованные на x - и k - шкалах.

В x - k -плоскости фурье-преобразование соответствует повороту осей координат на 90° , приводящим к преобразованию шкалы x в шкалу k . Квантовое фурье-преобразование в этой плоскости представляется **унитарной матрицей** $N \times N = 2^L \times 2^L$. Важно заметить, что амплитуды фурье-преобразования базисных функций $\exp(2\pi i x k / N)$ одинаковы при всех значениях x , а их фазы пробегают растущие значения $0, 2\pi k / N, 2i\pi 2k / N, \dots, 2i\pi(N-1)k / N$.

Минимальная площадь информационной ячейки в соответствии с принципом неопределенности равна в рассматриваемом случае площади квадрата с единичными размерами сторон, то есть единице (рис. 1.5).

Квантовое фурье-преобразование может быть построено с помощью двух основных операторов. Это однокубитовый оператор Адамара H_j , действующий на j -ый кубит и двухкубитовый оператор контролируемого изменения фазы V_{jk} , зависящий только от относительной фазы состояний $|1\rangle$ j -го и k -го кубитов, независимо от состояния других кубитов [1.13, 1.16].

Произведем над состоянием регистра $|x\rangle$ определенную последовательность операций, каждый шаг которой обозначим номером кубита j , на который действует однокубитовая операция H_j . В качестве **первого шага** положим $j = L - 1$ и подействуем оператором H_{L-1} на первый кубит регистра x_{L-1} , что эквивалентно действию оператора $H_{L-1} \otimes \mathbf{1}_{L-2} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_0$ на состояние всего регистра $|x\rangle$.

Далее, на **втором шаге**, положим $j = L - 2$ и подействуем произведением операторов $V_{L-2,L-1}(\mathbf{1}_{L-1} \otimes H_{L-2}) | \dots$, на состояния двух кубитов x_{L-1} и x_{L-2} (здесь операторы действуют по направлению оси времени в порядке слева направо, что отмечено знаком $| \dots$). Продолжая далее таким образом, на очередном j -ом шаге получим операцию $V_{j+1} V_{j+2} \dots V_{j,L-1} H_j | \dots$. Когда будет достигнуто значение $j = 0$, этот шаг заканчивается операцией H_0 . В результате полное унитарное преобразование представляется как последовательность элементарных одно- и двухкубитовых операций для всех значений j .

Например, в случае простейшего регистра из $L=2$ кубитов ($j=0, 1$) унитарное фурье-преобразование QFT_4 формируется из последовательности всего трех элементарных операций, описываемых матрицами в четырехмерном вычислительном базисе $|x\rangle = x_1, x_0\rangle: |0_0 0_0\rangle, |0_0 1_0\rangle, |1_0 0_0\rangle, |1_0 1_0\rangle$ следующего вида $U_4 = (H_1 \otimes \mathbf{1}_0) V_{0,1} (\mathbf{1}_1 \otimes H_0) | \dots$.

Переходя к обычной последовательности для умножаемых операторов-матриц, действующих справа налево (отмечено знаком $| \dots$), получим:

$$U_4 = (H_1 \otimes \mathbf{1}_0) V_{0,1} (\mathbf{1}_1 \otimes H_0) | \dots = (\mathbf{1}_1 \otimes H_0) V_{0,1} (H_1 \otimes \mathbf{1}_0) | \dots =$$

$$\begin{aligned}
 &= 1/2 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & i & -i \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -i & i \end{pmatrix}. \tag{2.18}
 \end{aligned}$$

В результате действия унитарной операции (2.18) четырехмерное состояние $|x\rangle$ 2-х кубитового регистра преобразуется в четырехмерную линейную суперпозицию $|c\rangle$ состояний следующим образом

$$\begin{aligned}
 U_4|x\rangle = |c\rangle = U_4 \begin{pmatrix} |00\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle \\ |00\rangle - |01\rangle + i|10\rangle - i|11\rangle \\ |00\rangle + |01\rangle - |10\rangle - |11\rangle \\ |00\rangle - |01\rangle - i|10\rangle + i|11\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |0\rangle + |1\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \\ |0\rangle + i|1\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \\ |0\rangle - |1\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \\ |0\rangle - i|1\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \end{pmatrix}, \tag{2.19}
 \end{aligned}$$

то есть для $N = 2^L = 4$ (учитывая, что четыре вычислительных базисных состояния 00, 01, 10, 11 соответствуют в двоичном представлении числам $x, k = 0, 1, 2, 3$) можно записать:

$$|x\rangle \rightarrow 1/2 (|1|0\rangle + \exp(i\pi x/2) |1\rangle + \exp(i\pi x) |2\rangle + \exp(i\pi x 3/2) |3\rangle). \tag{2.20}$$

Подчеркнем существенное свойство квантового фурье-преобразования. Как следует из (2.19), оно *не создает запутанных состояний*.

Из сравнения (2.18) и (2.19) теперь видно, что для получения квантового фурье-преобразования следует дополнительно перейти от состояния $|c\rangle$ в (2.19) к состоянию $|k\rangle$, отличающемуся от $|c\rangle$ обратным порядком расположения состояний кубитов в регистре: 00→00, 01→10, 10→01, 11→11. Такое преобразование производится с помощью еще одной унитарной операции обмена (SWAP) состояний двух кубитов: $|k\rangle = \text{SWAP}|c\rangle$ (раздел 2.2). При этом квантовое состояние остается незапутанным. В результате будем иметь $\text{QFT}_4 = \text{SWAP} \cdot U_4$. Заметим, что эта процедура аналогична операции «инверсии порядка двоичных знаков» в классическом алгоритме быстрого дискретного фурье-преобразования Кули-Тьюки.

При $L = 4$ размерность гильбертова пространства $N=2^4=16$, и для выполнения фурие-преобразования необходимо произвести последовательность уже не трех, а $L(L + 1)/2 = 10$ элементарных унитарных операций, с L операциями Адамара с каждым кубитом и $L(L - 1)/2$ двухкубитовыми операциями контролируемого изменения фазы.

Если предполагать, что на каждую элементарную операцию затрачивается *одно и то же время*, то есть все операции имеют одинаковое разрешение по времени, то временная цена полного преобразования пропорциональна числу операций и растет как *квадратичная* функция от числа L .

Однако отдельные реальные квантовые логические операции имеют определенную *временную цену*. В ЯМР квантовых компьютерах это длительность радиочастотных импульсов заданной интенсивности, осуществляющих необходимый поворот спинов. Так, для выполнения операции $V_{j,k}$ в случае квантового фурие-преобразования необходимо осуществить поворот фазы на угол $\theta_{j,k} = \pi 2^{k-j}$, что требует длительности $t_{k,j}$, пропорциональной $2^{-(k-j)}$, где $2^{-1} \leq 2^{-(k-j)} \leq 2^{-(L-1)}$. Число двухкубитовых операций контролируемого изменения фазы при выполнении квантового фурие-преобразования равно $(L - 1)/2$. Диапазон необходимых длительностей элементарных операций при сохранении точности преобразования увеличивается с числом L экспоненциально и соответственно влияет на временную цену всего преобразования. Однако следует заметить, что минимальное значение длительности элементарной операции определяется *временным разрешением* регистрирующей системы, которое при больших значениях L может существенно ограничить этот диапазон и в результате привести к тому, что зависимость от L временной цены фурие-преобразования будет слабее экспоненциальной [1.17].

Использование приближенного квантового фурие-преобразования, в котором уменьшается число операций контролируемого фазового сдвига до величины, определяемой требованием точности [1.18], также может частично решить проблему временной цены квантового фурие-преобразования.

Квантовое фурие-преобразование является основой важного квантового алгоритма факторизации Шора (приложение П.1.).

Заключение: Квантовое фурие-преобразование на многокубитовом регистре требует *полиномиальное число квантовых операций* ($\sim L^2$), в отличие от быстрого классического преобразования Кули-Гьюки, требующего $2^L L$ операций. Таким образом, квантовые компьютеры имеют значительный (экспоненциальный) выигрыш по сравнению с классическими компьютерами при решении задач, характеризующихся большой

размерностью. Однако, при этом *не учитывается влияния паразитного взаимодействия* между кубитами, которое приводит к некоторой дополнительной деградации квантовых вычислительных процессов с ростом L [1.19].

Отметим также, что при реализации фурье-преобразования на ЯМР квантовых компьютерах, если не ограничивать длительность элементарной квантовой операции, с ростом числа кубитов *растет временная цена* преобразования, что при отсутствии соответствующих мер подавления этого роста может существенно снизить возможности ЯМР квантовых компьютеров.

2.4. Общие требования к полномасштабным квантовым компьютерам

Под *полномасштабными квантовыми компьютерами* понимают такие, пока еще не созданные многокубитовые компьютеры, которые смогут превосходить по производительности любой классический компьютер, на каких бы физических принципах он не работал. Общие требования, которые необходимо выполнить для реализации полномасштабного квантового компьютера, неоднократно обсуждались в литературе. Наиболее четко они были сформулированы ДиВинченцо [1.20]. Здесь мы не будем останавливаться на их обосновании.

Обсудим их с точки зрения полномасштабных ЯМР квантовых компьютеров:

1. Физическая система, представляющая полномасштабный квантовый регистр, должна содержать *достаточно большое число* ($L > 10^3$) *кубитов* с изначально хорошо различающимися или настраиваемыми в нужный момент резонансными частотами, на которые можно было бы воздействовать поодиночке или попарно в процессе выполнения соответствующих квантовых операций над многоуровневыми числами.

Наиболее перспективной кандидатурой для многокубитового ЯМР квантового регистра является *твердотельный гомоядерный вариант*, в котором ядерные спины, образующие квантовый регистр, принадлежат идентичным атомам, регулярно размещенным в некоторой твердотельной структуре. Существенным в этом случае является также и то, что такой вариант допускает также создание *достаточно больших ансамблей многокубитовых квантовых регистров*.

2. Должны быть обеспечены условия для приготовления состояния входного регистра с необходимой точностью в исходном основном ба-

зисном состоянии $|0_{L-1}, 0_{L-2}, 0_{L-3}, \dots, 0_0\rangle$, то есть для *процесса инициализации состояния квантового регистра*.

В случае многокубитовых ЯМР квантовых компьютеров переход к использованию достаточно *низких спиновых температур* T_1 соответствует тому, что исходное инициализированное состояние оказывается практически чистым квантовым состоянием.

3. Необходимо обеспечить *максимальное подавление эффектов декогерентизации и исправление случайных ошибок* квантовых состояний регистра в процессе выполнения квантовых операций. Характерное время декогерентизации должно, по крайней мере, в $10^4 - 10^5$ раз превышать время их выполнения (время такта) для того, чтобы ошибка при выполнении отдельной квантовой операции была менее $10^{-4} - 10^{-5}$, что считается приемлемым для надежной работы многокубитового компьютера с использованием соответствующих корректирующих кодов [1.21]. Проблема подавления декогерентизации квантовых состояний в многокубитовых системах является одной из основных на пути реализации квантовых компьютеров.

Для твердотельных ЯМР квантовых компьютеров мы коснемся этих проблем в подразделах **5.45, 5.46, 6.63**.

4. Необходимо обеспечить за время декогерентизации выполнение требуемой совокупности квантовых операций, определяющей унитарное преобразование $U(t)$. Эта совокупность должна содержать определенный набор защищенных от ошибок *двухкубитовых* операций, таких как **CNOT**, *однокубитовых* операций, таких как операции **NOT**, **H**, и некоторых других. Управляющие операциями импульсы должны контролироваться, соответственно, с точностью не хуже, чем $10^{-4} - 10^{-5}$.

Для организации логических операций в твердотельных гомоядерных квантовых регистрах необходимо иметь возможность *индивидуального обращения* к спинам-кубита. Это можно осуществить, в частности, путем управления резонансной частотой кубита с помощью *электрического, магнитного или электромагнитного воздействия на электронное состояние* атома, содержащего рассматриваемый спин-кубит.

5. Необходимо обеспечить с достаточно высокой надежностью *измерение состояния* отдельных кубитов регистра в вычислительном базисе *на выходе*.

Индивидуальное измерение состояний ядерного спина-кубита в твердотельном ЯМР квантовом компьютере является другой наиболее трудной проблемой. Возможным решением этой проблемы может быть использование *ансамблевых вариантов* ЯМР квантовых компьютеров.

Заключение: Перспективным направлением для реализации полномасштабного ЯМР квантового компьютера может считаться разработка *твердотельных вариантов*, работающих при достаточно *низких спиновых температурах*, что в принципе уже позволяет удовлетворить первым двум из приведенных основных требований.

2.5. Чистые состояния двухкубитового квантового регистра

Рассмотрим теперь квантовые свойства простейшего квантового регистра, представляющего собой систему из двух спинов-кубитов, находящихся в постоянном магнитном поле при $T = 0$ и связанных между собой *изотропным гайзенберговским антиферромагнитным взаимодействием* (так называемая двухспиновая ХХХ-модель). Гамильтониан такой системы, записанный в форме матрицы 2×2 (в единицах $\hbar = 1$, при $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$, $\omega_0 = \gamma B$, $\mathbf{I}_{1,2} = 1/2 \boldsymbol{\sigma}$), имеет вид:

$$\mathbf{H} = -\omega_0 (\mathbf{I}_{1z} \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{I}_{2z}) + J (\mathbf{I}_1 \otimes \mathbf{I}_2), \quad (2.21)$$

где параметр $J > 0$, а $\mathbf{1}$ — единичная матрица 2×2 .

Его *четыре* собственных значения

$$E(I, M) = -\omega_0 M + J(I(I+1)/2 - 3/4) \quad (2.22)$$

соответствуют *четырем* чистым собственным состояниям $|I, M\rangle$ для значений полного спина $I = 0, 1$ и его проекции $M = 0, \pm 1$ на ось z (рис. 1.6).

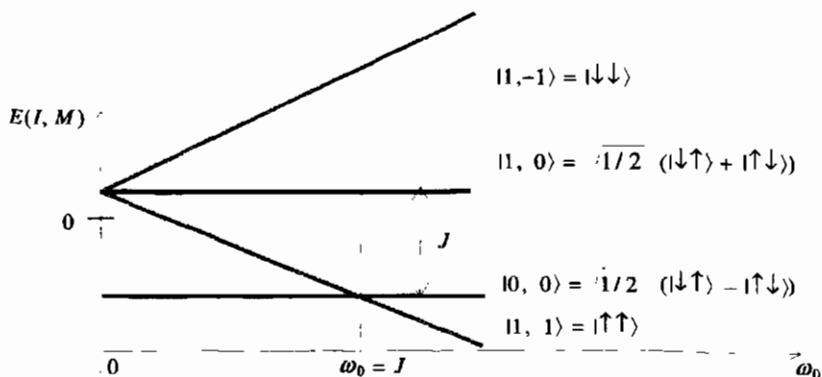


Рис. 1.6. Схема энергетических уровней двухспиновой системы, описываемой гамильтонианом (2.21).

Для избежания путаницы с двухкубитовыми состояниями $|I, M\rangle$, где это возможно, однокубитовые вычислительные состояния будем обозначать далее только стрелками: $|1\rangle \equiv |\uparrow\rangle$ и $|0\rangle \equiv |\downarrow\rangle$.

Итак, имеем одно *синглетное* (антисимметричное)

$$|0, 0\rangle = \sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.23)$$

и три *триплетных* (симметричных) двухкубитовых состояния:

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad |1, 0\rangle = \sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle. \quad (2.24)$$

В отличие от состояний $|\uparrow\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\downarrow\rangle$, состояния $|1, 0\rangle$ и $|0, 0\rangle$ являются двухкубитовыми суперпозициями, называемыми когерентными триплетным и синглетным *максимально запутанными* ЭПР – состояниями, для которых параметр согласованности, согласно (2.9), $C=1$. Оба запутанных состояния характеризуются значением проекции полного спина $M=0$.

Как видно из рис. 1.6, заметим, что, при $\omega_0 < J$ основное состояние рассматриваемой системы является синглетным запутанным состоянием $|0, 0\rangle$ с энергией $E = -3J/4$.

Матрицы плотности запутанных состояний являются недиагональными в вычислительном базисе. В частности, для чистого синглетного ЭПР – состояния она имеет вид

$$\rho(0, 0) = |00\rangle\langle 00| = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (2.25)$$

У этой матрицы только *одно равное единице собственное значение*, как и должно быть, для чистого состояния.

Для сравнения напишем матрицу плотности незапутанного когерентного состояния с $M=0$ как прямое произведение однокубитовых матриц плотности, характеризующихся противоположно направленными векторами Блоха, лежащими с плоскости xz $P_{1x} = -P_{2x} = 1$, то есть движущихся *в противофазе* (рис. 1.7):

$$\rho = 1/4 (1 + 1\sigma_{1x}) \otimes (1 - 1\sigma_{2x}) = \frac{1}{4} \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{vmatrix}. \quad (2.26)$$

Она содержит 12 недиагональных матричных элементов, которые определяются длиной векторов Блоха. Это состояние не стационарно, поскольку не является собственным состоянием гамильтониана (2.21). В отличие от состояния (2.26) максимально запутанное состояние (2.25) является собственным состоянием гамильтониана (2.21), в котором *векторы Блоха* $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_2 = \text{Spr}(0,0)\sigma_1 = \text{Spr}(0,0)\sigma_2 = 0$. Отличными от нуля являются только составляющие эрмитового *тензора квантовых корреляций* двухкубитовых состояний

$$\text{Spr}(0,0)(\sigma_{1-} \otimes \sigma_{2+}) = -1/2, \quad \text{Spr}(0,0)(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}) = -1, \quad (2.27)$$

они отсутствуют в незапутанном состоянии (2.24). Квантовые корреляции в ЭПР – состоянии имеют место как между поперечными, так и между продольными спиновыми составляющими.

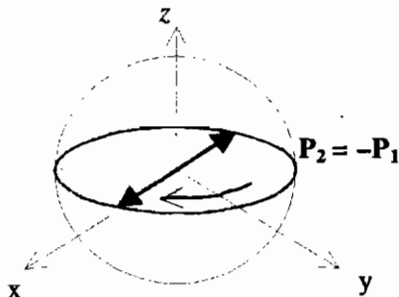


Рис. 1.7. Двухкубитовое состояние, описываемое двумя противоположно направленными векторами Блоха в плоскости xy с $\varphi_1 = 0$ и $\varphi_2 = \pi$.

Таким образом, максимально запутанные квантовые состояния описываются матрицами плотности, содержащими недиагональные элементы, отличительным свойством которых является то, что они не исчезают при обращении в нуль векторов Блоха.

Если ввести следующие обозначения для найденных составляющих тензора квантовых корреляций

$$G_{1-,2+} = (G_{1+,2-})^* = 4\text{Spr}(0,0)(\sigma_{1-} \otimes \sigma_{2+}) = -2, \\ G_{1z,2z} = \text{Spr}(0,0)(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}) = -1, \quad (2.28)$$

то вместо (2.25) получим:

$$\rho(0,0) = \frac{1}{4} \begin{vmatrix} 1+G_{1z,2z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-G_{1z,2z} & G_{1-,2+} & 0 \\ 0 & G_{1-,2+}^* & 1-G_{1z,2z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+G_{1z,2z} \end{vmatrix} =$$

$$= 1/4 (\hat{1} + G_{1z,2z} (\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}) + G_{1+,2-} (\sigma_{1-} \otimes \sigma_{2+}) + G_{1-,2+} (\sigma_{1+} \otimes \sigma_{2-})). \quad (2.29)$$

Из последнего выражения следует, что *геометрическим образом* рассматриваемого максимально запутанного двухкубитового состояния, характеризующегося составляющими трехмерного тензора второго ранга $G_{1i,2j}$, является *поверхность второго порядка* в трехмерном пространстве (x, y, z) , которая описывается уравнением типа

$$G_{1+,2-} (x^2 + y^2)/2 + G_{1z,2z} z^2 = \text{Const} \quad \text{или} \quad (x^2 + y^2) + z^2 = \text{Const}. \quad (2.30)$$

Это будет действительная сфера (при $\text{Const} > 0$), мнимая сфера (при $\text{Const} < 0$) или точка (при $\text{Const} = 0$).

Матрица плотности второго максимально запутанного состояния $\Pi(0)$ отличается от (2.29) знаком недиагональных элементов, и соответствующая поверхность второго порядка будет описываться уравнением

$$(x^2 + y^2) - z^2 = \text{Const}. \quad (2.31)$$

Это будет однополостный круговой гиперboloид при $\text{Const} > 0$, двухполостной круговой гиперboloид при $\text{Const} < 0$ и действительный круговой конус при $\text{Const} = 0$ с осью симметрии z .

В общем случае имеется 4 класса чистых максимально запутанных состояний двух кубитов, являющихся составляющими так называемого ортонормированного *базиса Белла*: $\sqrt{1/2} (|\uparrow\uparrow\rangle \pm |\downarrow\downarrow\rangle)$, $\sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)$. Заметим, что суммарный вектор Блоха двух кубитов не является инвариантом и в разных состояниях имеет разные значения.

При $\omega_0 > J$ основное состояние двухкубитовой системы с антиферромагнитным характером взаимодействия ($J > 0$) становится незапутанным, а *оба вектора Блоха отличны от нуля и ориентированы по полю*.

При ферромагнитном характере гайзенберговского взаимодействия ($J < 0$) основным состоянием является всегда незапутанное состояние

$|1, 1\rangle$, оба вектора Блоха ориентированы против поля. Запутанными состояниями типа $|1, 0\rangle$ и $|0, 0\rangle$ оказываются только возбужденные состояния.

Заключение: Из рассмотрения чистого квантового ансамбля двухкубитовых систем следует, что в общем случае, благодаря наличию запутанных состояний, он не описывается независимыми векторами Блоха, существуют еще квантовые корреляции, описываемые определенными элементами тензора корреляций. Основное состояние двухкубитовой квантовой системы с *изотропным гайзенберговским антиферромагнитным* взаимодействием *не будет запутанным* лишь в достаточно сильных постоянных полях $\omega_0 > J$. Оно всегда не запутано при ферромагнитном типе гайзенберговского взаимодействия.

2.6. Парные запутанные состояния в цепочках спинов с антиферромагнитным взаимодействием

В идеальном случае квантовый регистр является линейной цепочкой, состоящей из конечного числа спинов-кубитов, надежно изолированных от окружения. При этом базисные состояния регистра должны быть достаточно долгоживущими. Ориентация отдельных ядерных спинов, определяемая значениями гиромагнитного отношения отдельного спина-кубита и локального магнитного поля, не обязательно должна быть одинаковой.

Реальный квантовый регистр является *открытой системой*, обменивающейся с окружением как энергией, так и энтропией, его квантовое состояние является *смешанным*. Кроме того, в результате взаимодействия между спинами основное состояние квантового регистра при определенных условиях может стать *запутанным*, то есть не всегда будет иметь необходимый для инициализации вид (2.1). В общем случае в многоспиновой системе могут образовываться весьма сложные запутанные состояния, описываемые неприводимыми матрицами плотности высокого ранга.

Рассмотрим здесь в качестве простой модели квантового регистра одномерную *двухподрешеточную цепочку* с одинаковым числом спинов в каждой подрешетке (полное число спинов L — четное число) в однородном магнитном поле $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$, с одинаковым антиферромагнитным изотропным взаимодействием между ближайшими соседями. Резонансные частоты спинов для нечетных и четных узлов в цепочке обозначим $\omega_1 = \gamma_1 B$ и $\omega_2 = \gamma_2 B$. Гамильтониан рассматриваемой системы (так

называемой ХХZ-модели) запишем в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_L = & - \sum_{k=1}^L \sum_{n=0}^{(L-2)/2} \delta_{k,2n+1} \{ \omega_1 \mathbf{I}_{k,z} \otimes \mathbf{I}_{k+1} + \omega_2 \mathbf{I}_k \otimes \mathbf{I}_{k+1,x} \} + \\ & + \sum_{k=1}^L \{ J_{\perp} (\mathbf{I}_{k,x} \otimes \mathbf{I}_{k+1,x} + \mathbf{I}_{k,y} \otimes \mathbf{I}_{k+1,y}) + J \mathbf{I}_{k,z} \otimes \mathbf{I}_{k+1,z} \}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

где $J > J_{\perp} > 0$, $J_A = J - J_{\perp}$ — константа анизотропии взаимодействия (легкая ось намагничивания направлена по оси z).

Случай $J = 0$ принято называть ХХ0-моделью (или двумерной изотропной ХУ-моделью), а случай $J_{\perp} = 0$ с $\omega_1 = \omega_2$ — моделью Изинга (00Z) в продольном магнитном поле. Спиновый оператор k -го узла в выражении (2.32) \mathbf{I}_k , действующий в 2^L -гильбертовом пространстве, может быть представлен в форме прямого произведения двумерных матриц:

$$\mathbf{I}_k \equiv \mathbf{1}_1 \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{k-1} \otimes \mathbf{I}_k \otimes \mathbf{1}_{k+1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_L.$$

Будем далее предполагать, что выполняются периодические граничные условия, при которых $L+1$ -ый нечетный узел эквивалентен первому узлу, то есть $\mathbf{I}_{L+1} \equiv \mathbf{1}$. Такую систему назовем *спиновым* или *кубитовым кольцом*.

В этом случае гамильтониан (2.32) обладает важными свойствами. Он коммутирует с z -составляющей полного спина $\sum_k I_{k,z}$ и инвариантен относительно операции сдвига \mathbf{T} состояний кубитов на период каждой подрешетки $\Delta k = 2$ ($m_k = m_{k+2}$):

$$\mathbf{T} | m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, \dots, m_{L-2}, m_{L-1}, m_L \rangle = | m_{L-1}, m_L, m_1, m_2, m_3, m_4, \dots, m_{L-2} \rangle. \quad (2.33)$$

Основная трудность математического описания многоспиновых систем связана с экспоненциальным ростом с увеличением числа спинов числа необходимых для этого параметров. Однако во многих случаях для описания наиболее важных физических свойств оказывается достаточным ограничиться небольшим числом параметров, характеризующих, в частности, только двухспиновые как классические, так и квантовые корреляции.

В случае спинового кольца [1.22, 1.23] отмеченные свойства позволяют перейти от равновесной матрицы плотности всего кольца к *приведенной двухспиновой матрице плотности*. Для этого следует вычис-

лечь след от полной матрицы плотности по состояниям всех спинов, кроме двух, соответствующим двум значениям $k = 1, 2$ в (2.32).

Для приведенной двухспиновой равновесной матрицы плотности запишем выражение:

$$\rho = \text{Sp}_{3,\dots,L} \rho_{1,2,\dots,L} = \text{Sp}_{3,\dots,L} \exp(-\mathbf{H}_L/T) / \text{Sp}(\exp(-\mathbf{H}_L/T)), \quad (2.34)$$

которая, вообще говоря, не сводится к виду:

$$\rho_{1,2,\dots,L} = \text{Sp}_{3,\dots,L} \exp(-\mathbf{H}_L/T) / \text{Sp}(\exp(-\mathbf{H}_L/T)). \quad (2.35)$$

Такой вид она имеет для простейшей двухкубитовой ($L=2$) цепочки-кольца, где соответствующий приведенный двухкубитовый гамильтониан с учетом периодического граничного условия

$$\mathbf{H}_{12} = -\omega_1 \mathbf{I}_{1z} \otimes \mathbf{1} - \omega_2 \mathbf{1} \otimes \mathbf{I}_{2z} + 2J_{\perp} (\mathbf{I}_{1x} \otimes \mathbf{I}_{2x} + \mathbf{I}_{1y} \otimes \mathbf{I}_{2y}) + 2J (\mathbf{I}_{1z} \otimes \mathbf{I}_{2z}). \quad (2.36)$$

В результате, рассмотрение смешанного ансамбля двух спиновых цепочек сводится к рассмотрению смешанного ансамбля приведенных двухспиновых систем с *удвоенным* по сравнению с ансамблем независимых двухкубитовых систем значением постоянной взаимодействия. Собственные значения гамильтониана (2.36)

$$E_{1,2} = J/2 \pm (\omega_1 + \omega_2)/2, \quad E_{3,4} = -J/2 \pm J_{\perp} \sqrt{1+X^2} \quad (2.37)$$

соответствуют двум незапутанным состояниям $|\psi_1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$, $|\psi_2\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ и *двум парным частично запутанным* состояниям $|\psi_3\rangle = \sqrt{1-\varepsilon} |\uparrow\downarrow\rangle + \sqrt{\varepsilon} |\downarrow\uparrow\rangle$, $|\psi_4\rangle = \sqrt{\varepsilon} |\uparrow\downarrow\rangle - \sqrt{1-\varepsilon} |\downarrow\uparrow\rangle$, где

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{X}{\sqrt{1+X^2}} \right), \quad X = \frac{\omega_1 - \omega_2}{2J_{\perp}}, \quad (2.38)$$

согласованность которых

$$C = 2\sqrt{(1-\varepsilon)\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{1+X^2}} \leq 1. \quad (2.39)$$

При $\omega_1 = \omega_2$, $J_{\perp} \neq 0$ ($X = 0$) эти два чистых состояния максимально запутаны с согласованностью $C = 1$ и характеризуются значениями полного спина $I = 1$, 0 и его проекции $M = 0$, как и в случае, рассмотренном в предыдущем разделе.

Заметим, что в отличие от максимально запутанных состояний, переходы между частично запутанными состояниями не являются запрещенными.

При определенном значении величины внешнего поля B запутанность исчезает скачком. Это явление называют **квантовым фазовым переходом**.

Для ХХХ-модели ($J = J_{\perp}$) квантовый фазовый переход происходит при

$$B = \frac{J(\gamma_1 + \gamma_2)}{\gamma_1 \gamma_2}. \quad (2.50)$$

С увеличением температуры степень запутанности монотонно уменьшается и при температуре $T > T_c$, где T_c определяется уравнением (рис. 1.8)

$$\exp(J/T_c) \left| \operatorname{sh}(J_{\perp} \sqrt{1 + X^2}/T_c) \right| = 1, \quad (2.51)$$

парная тепловая запутанность отсутствует. Из (2.51) следует, что при $\omega_1 = \omega_2$ критическая температура T_c не зависит от величины внешнего поля. Для ХХХ-модели ($J = J_{\perp}$) для критической температуры получим простое выражение $T_c = 2J/\ln 3 = 1,824$, при этом согласованность

$$C(T) = \frac{\exp(2J/T) - 3}{\exp(2J/T) + 3} = 1 - \frac{6}{\exp(2J/T) + 3}. \quad (2.52)$$

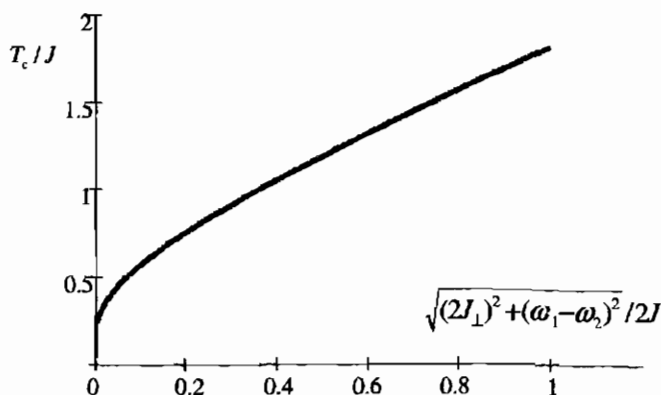


Рис. 1.8. Зависимость критической температуры T_c от анизотропии взаимодействия и магнитного поля.

Мы видим, что при $J_{\perp} = 0$, $\omega_1 = \omega_2$ (модель Изинга типа 00Z, сильная анизотропия) парная тепловая запутанность *отсутствует при любых температурах*. Но достаточно малого значения $J_{\perp} > 0$ или различия частот $\omega_{1,2}$, чтобы критическая температура резко возросла. Для цепочки Изинга в отсутствии продольного поля квантовый фазовый переход в запутанное основное состояние становится возможным при наложении даже очень малого *поперечного поля*. При конечных температурах с увеличением поперечного внешнего поля согласованность в цепочке Изинга растет за счет примешивания вышележащих запутанных состояний, достигая некоторого максимално значения [1.25].

Как следует из (2.47) для ферромагнитного типа взаимодействия, когда $J + J_{\perp} \sqrt{1 + X^2} < 0$, парная тепловая запутанность отсутствует при любой температуре, независимо от величины поля. Заметим, что запутанные состояния в этом случае возможны у возбужденных состояний при конечной температуре, однако они слабо заселены по сравнению с основным состоянием и не дают существенного вклада в тепловую запутанность.

Используя выражение для внутренней энергии, отнесенной к паре спинов

$$E(T) = \sum_i p_i(t) E_i, \quad (2.53)$$

в случае отсутствия внешнего поля получим

$$E(T) = \frac{(J/2) (1 - \exp(J/T) \operatorname{ch}(J_{\perp}/2T) - J_{\perp} \exp(J/T) \operatorname{sh}(J_{\perp}/T))}{1 + \exp(J/T) \operatorname{ch}(J_{\perp}/T)}.$$

В частности, для изотропной XXX – модели получим, что внутренняя энергия

$$E(T) = - (3J/2) \frac{\exp(2J/T) - 1}{\exp(2J/T) + 3} \quad (2.54)$$

полностью выражается через согласованность:

$$E(T) = -J(C(T) + 1/2). \quad (2.55)$$

Большей запутанности соответствует меньшая энергия состояния. Основному состоянию в рассматриваемой модели двухспинового кольца соответствуют значения $E(0) = -3J/2$, $C(0) = 1$.

Температурная зависимость согласованности для парной запутанности из-за вклада состояний других спинов изменяется с числом кубитов

и его четностью в цепочке. Это связано с тем, что на парную согласованность оказывает влияние взаимодействие первых ближайших спинов со вторыми соседями, а вторых с третьими и т. д., что не учитывается в выражении для матрицы плотности (2.35). Оно приводит к ослаблению при $T=0$ парной запутанности, увеличению энергии основного состояния и, соответственно, к уменьшению критической температуры T_c . В частности, общим свойством запутанности многокубитовых систем является то, что когда два спина запутаны максимально друг другом, то ни один из них не может быть запутан с каким-либо другим. Это свойство иногда называют «моногамией» (monogamy) [1.22].

При числе кубитов $L = 3$ в цепочке парная тепловая запутанность вообще исчезает и $T_c = 0$. В пределе при $L \gg 1$ критическая температура для парной тепловой запутанности в цепочке с изотропным антиферромагнитным взаимодействием XXX – типа принимает в наших обозначениях независимо от четности числа кубитов значение $T_c = 0,796J$ [1.26], то есть оказывается значительно меньше критической температуры приведенной выше для парной тепловой запутанности двухспинового кольца $T_c = 2J/\ln 3 = 1,824J$.

Заключение: Равновесные запутанные когерентные смешанные состояния в двухкубитовом ансамбле при изотропном гайзенберговском антиферромагнитном взаимодействии между кубитами не возникают при температуре выше критической ($T > T_c = 2J/\ln 3$), а при $T = 0$ они не образуются при $B \geq \frac{J(\gamma_1 + \gamma_2)}{\gamma_1 \gamma_2}$.

$$B \geq \frac{J(\gamma_1 + \gamma_2)}{\gamma_1 \gamma_2}.$$

Для создания *инициализированного незапутанного состояния* квантового регистра следует использовать *достаточно сильные продольные поля* и/или иметь *достаточно сильную* одноосную анизотропию взаимодействия между спинами. Наличие взаимодействия, хотя оно и приводит к появлению определенных классических корреляций, не всегда сопровождается запутыванием квантовых состояний (примером является модель Изинга в продольном магнитном поле).

2.7. Парная запутанность основного квантового состояния антиферромагнитного кольца*

Основное состояние спинового кольца с антиферромагнитным взаимодействием между ближайшими соседними спинами при $T = 0$, вообще говоря, не является состоянием типа $|\uparrow_1, \downarrow_2, \uparrow_3, \downarrow_4, \uparrow_5, \dots\rangle$ (полное антиферромагнитное упорядочение), поскольку оно минимизируется только изинговской частью гамильтониана и не минимизируется при учете ос-

тальной его части. В результате, в основном состоянии возникает коррелированные состояния отдельных спинов и, в частности, парная запутанность.

Обратимся здесь к общему случаю, когда приведенная двухспиновая матрица плотности ρ описывается $4^2 = 16$ вещественными параметрами

$$Q_\alpha = \text{Sp } F_\alpha \rho, \quad (2.56)$$

где $F_\alpha (\alpha = 1, 2, \dots, 16)$ — базис 16-мерного векторного пространства спиновых операторов, действующих в 4-мерном гильбертовом пространстве. Это 16 матриц 4×4 , включая и единичную матрицу $\hat{1}$ (здесь индексы принимают значения $i, j = \pm, z$):

$$F_\alpha \equiv \{\sigma_{1i} \otimes \mathbf{1}_2, \mathbf{1}_1 \otimes \sigma_{2j}, (\sigma_{1i} \otimes \sigma_{2j}), \hat{1} = \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2\}, \sigma_i = \sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2, \sigma_z. \quad (2.57)$$

Шестнадцать параметров Q_α выражаются через *шесть* составляющих векторов Блоха \mathbf{P}_1 и \mathbf{P}_2 , *девять* вещественных параметров, описывающих как классическую, так и квантовую корреляцию их состояний (когерентности 2-го порядка), представленными составляющими *трехмерных тензоров корреляции* второго ранга $G_{1i, 2j}$ и единицу 1:

$$\mathbf{P}_1 = \text{Sp } \sigma_1 \cdot \rho, \mathbf{P}_2 = \text{Sp } \sigma_2 \cdot \rho,$$

$$P_{1z}P_{2z} + G_{1z, 2z} = \text{Sp } (\sigma_{1,z} \otimes \sigma_{2,z}) \rho, P_{1z}P_{2\pm} + G_{1z, 2\pm} = 2\text{Sp } (\sigma_{1,z} \otimes \sigma_{2,\pm}) \rho,$$

$$P_{1\pm}P_{2\pm} + G_{1\pm, 2\pm} = 4\text{Sp } (\sigma_{1,\pm} \otimes \sigma_{2,\pm}) \rho, P_{1+}P_{2-} + G_{1+, 2-} = 4\text{Sp}_{3, \dots, L} (\sigma_{1,+} \otimes \sigma_{2,-}) \rho. \quad (2.58)$$

Запишем далее такую матрицу плотности ρ в четырехмерном *вычислительном базисе* $(|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle) \equiv (|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle)$, состояния которого будем обозначать $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$, (см. раздел 2.3), выразив ее через спиновые операторы F_α :

$$\rho = 1/4 \sum_{\alpha=1}^{16} Q_\alpha F_\alpha = 1/4 \{(\mathbf{1}_1 + \mathbf{P}_1 \sigma_1) \otimes (\mathbf{1}_2 + \mathbf{P}_2 \sigma_2) + \sum_{i,j} G_{1i, 2j} (\sigma_{1i} \otimes \sigma_{2j})\} =$$

$$= 1/4 \begin{pmatrix} R_{0,0} & R_{0,1} & R_{0,2} & R_{0,3} \\ R_{1,0} & R_{1,1} & R_{1,2} & R_{1,3} \\ R_{2,0} & R_{2,1} & R_{2,2} & R_{2,3} \\ R_{3,0} & R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

где диагональные элементы матрицы (2.59)

$$\begin{aligned} R_{0,0} &= (1 + P_{1,z})(1 + P_{2,z}) + G_{1z,2z}, \\ R_{1,1} &= (1 + P_{1,z})(1 - P_{2,z}) - G_{1z,2z}, \\ R_{2,2} &= (1 - P_{1,z})(1 + P_{2,z}) - G_{1z,2z}, \\ R_{3,3} &= (1 - P_{1,z})(1 - P_{2,z}) + G_{1z,2z} \end{aligned} \quad (2.60)$$

удовлетворяют условию нормировки:

$$R_{0,0} + R_{1,1} + R_{2,2} + R_{3,3} = 4. \quad (2.61)$$

поэтому из четырех диагональных элементов независимыми являются только три.

Приведенная матрица плотности (2.59), в отличие от (2.43), записана здесь без использования выражения типа (2.35) и поэтому в принципе учитывает неявным образом через значения матричных элементов вклад состояний всех спинов в кольцо. Это, в частности, важно для определения его основного состояния.

Из (2.60) следует, что

$$\begin{aligned} R_{0,0} - R_{3,3} &= 2(P_{1,z} + P_{2,z}), \quad R_{1,1} - R_{2,2} = 2(P_{1,z} - P_{2,z}), \\ R_{1,1} + R_{2,2} &= 2(1 - G_{1z,2z}). \end{aligned} \quad (2.62)$$

В частности, если воспользоваться значениями матричных элементов (2.43), полученных для приведенной матрицы плотности в форме (2.35), то, согласно (2.62), будем иметь следующие явные выражения

$$\begin{aligned} P_{1,z} = P_{2,z} &= \frac{\text{sh}[(\omega_1 + \omega_2)/2T]}{\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + \exp(J/T)\text{ch}(J_{\perp}\sqrt{1 + X^2}/T)}, \\ G_{1z,2z} &= \frac{\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] - \exp(J/T)\text{ch}(J_{\perp}\sqrt{1 + X^2}/T)}{\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + \exp(J/T)\text{ch}(J_{\perp}\sqrt{1 + X^2}/T)}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Недиагональные эрмитово-сопряженные матричные элементы (12 независимых вещественных параметров) имеют вид:

$$\begin{aligned} R_{0,1} &= P_{2+} + P_{1z}P_{2+} + G_{1z,2+} = (P_{1,0})^*, \\ R_{2,3} &= P_{2+} - P_{1z}P_{2+} - G_{1z,2-} = (P_{3,2})^*, \\ R_{0,2} &= P_{1+} + P_{1+}P_{2z} + G_{1+,2z} = (P_{2,0})^*, \\ R_{1,3} &= P_{1+} - P_{1+}P_{2z} - G_{1-,2z} = (P_{3,1})^*, \\ R_{0,3} &= P_{1+}P_{2+} + G_{1+,2+} = (P_{3,0})^*, \\ R_{1,2} &= P_{1+}P_{2-} + G_{1+,2-} = (P_{2,1})^*. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Учитывая отмеченные выше свойства симметрии гамильтониана антиферромагнитного кольца (2.33), для матрицы плотности получим выражение (ср. (2.43))

$$\rho = \frac{1}{4} \begin{vmatrix} R_{0,0} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R_{1,1} & R_{1,2} & 0 \\ 0 & R_{1,2}^* & R_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R_{3,3} \end{vmatrix}. \quad (2.65)$$

Из недиагональных элементов в (2.65) сохраняются только те, которые благодаря сохранению z -составляющей полного спина, описывают когерентную запутанную суперпозицию состояний $|\uparrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\uparrow\rangle$ с нулевой полной z -составляющей:

$$R_{1,2} = P_{1+}P_{2-} + G_{1+2-}. \quad (2.66)$$

Для параметров λ_i при $(R_{1,1}R_{2,2})^{1/2} > |R_{1,2}|$ получим

$$\lambda_{1,2} = (1/4) \left| (R_{1,1}R_{2,2})^{1/2} \pm |R_{1,2}| \right|, \quad \lambda_{3,4} = (1/4) (R_{0,0}R_{3,3})^{1/2}, \quad (2.67)$$

где, как следует из (2.66),

$$\begin{aligned} (R_{0,0}R_{3,3})^{1/2} &= \{(1 + P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})^2 - (P_{1,z} + P_{2,z})^2\}^{1/2}, \\ (R_{1,1}R_{2,2})^{1/2} &= \{(1 - P_{1,z}P_{2,z} - G_{1z,2z})^2 - (P_{1,z} - P_{2,z})^2\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Согласованность парных запутанных состояний определяется с помощью выражения

$$C = (1/2) \max [|R_{1,2}| - (R_{0,0}R_{3,3})^{1/2}, 0]. \quad (2.69)$$

Мы видим, что она отлична от нуля лишь при достаточно больших значениях недиагональных элементов матрицы плотности $|R_{1,2}|$ и, таким образом, представляет собой параметр недиагонального порядка в системе спинов-кубитов, характеризующий фазу основного состояния спинового кольца с отличной от нуля запутанностью.

Представим теперь энергию, приходящуюся на пару кубитов в кольце, описываемом гамильтонианом (2.32), через матричные элементы двухспиновой матрицы плотности (2.65):

$$\begin{aligned} E &= \text{Sp}_{1,2,\dots,L} \mathbf{H}_L \cdot \rho_{1,2,\dots,L} = \text{Sp} \mathbf{H}_{12} \cdot \rho_{12} = \\ &= -BM + (J/2) (P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z}) + (J_{\perp}/2) \text{Re}R_{1,2}, \end{aligned} \quad (2.70)$$

где

$$M = (\gamma_1 P_{1,z} + \gamma_2 P_{2,z})/2 \quad (2.71)$$

— средний магнитный момент на один кубит.

Учитывая далее, что минимизации энергии соответствует фаза параметра $R_{1,2}$, равная π , для энергии основного состояния получим

$$E_0 = -BM + (J/2)(P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z}) - (J_{\perp}/2)|R_{1,2}|. \quad (2.72)$$

В таком виде выражение для энергии основного состояния учитывает неявным образом вклад взаимодействия не только с первыми ближайшими соседями, но и вклад взаимодействий с удаленными спинами.

Выражая далее параметр $|R_{1,2}|$, а с ним и недиагональные элементы тензора корреляции через энергию E_0 , для согласованности основного состояния получим:

$$C = 2 \max [(-E_0 - BM + J/2(P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z}))/2J_{\perp} - 1/4((1 + P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})^2 - (P_{1,z} + P_{2,z})^2)^{1/2}, 0]. \quad (2.73)$$

Таким образом, запутанность имеет место при условиях

$$(R_{1,1}R_{2,2})^{1/2} > |R_{1,2}| > (R_{0,0}R_{3,3})^{1/2},$$

$$-E_0 > BM + J/2(P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})/2J_{\perp} + 1/4((1 + P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})^2 - (P_{1,z} + P_{2,z})^2)^{1/2}. \quad (2.74)$$

Отсутствие парной запутанности не означает отсутствия недиагональных элементов матрицы плотности, которые в таком случае будут описывать классические корреляции.

В этом можно наглядно убедиться, если воспользоваться снова полученными выше явными выражениями (2.42) (2.43) для двухспинового кольца. Для недиагонального матричного элемента это дает

$$\begin{aligned} R_{1,2} &= P_{1+}P_{2-} + G_{1+2} = 2(p_3 - p_4) = \\ &= \frac{2 \exp(J/T) \operatorname{sh}(J_{\perp} \sqrt{1 + X^2}/T)}{\operatorname{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + \exp(J/T) \operatorname{ch}(J_{\perp} \sqrt{1 + X^2}/T)}. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Это выражение, как видно, отлично от нуля и при $C=0$, когда $\exp(J/T) \left| \operatorname{sh}(J_{\perp} \sqrt{1 + X^2}/T) \right| \leq 1$.

Для модели Изинга ($J_{\perp} = 0$) недиагональный элемент $R_{1,2} = 0$, то есть отсутствуют как квантовые, так и классические корреляции поперечных составляющих спина. Однако при этом продольная составляющая тензора корреляций отлична от нуля и имеет вид

$$G_{1z,2z} = \frac{\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] - \exp(J/T)}{\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + \exp(J/T)}, \quad (2.76)$$

Это означает, что в модели Изинга классические корреляции продольных составляющих сохраняются.

Полностью выразить парную согласованность через энергию основного состояния E_0 , отнесенную к паре кубитов, удастся только для изотропного кольца с взаимодействием XXX-типа (то есть, когда $J_{\perp} = J$, $\gamma_1 = \gamma_2$) и в отсутствии магнитного поля, когда $P_{1,z} = P_{2,z} = M = 0$. С помощью общего соотношения (2.73) получим выражение, совпадающее по форме с (2.55):

$$C = -E_0/J - 1/2. \quad (2.77)$$

Явное выражение для энергии основного состояния пары спинов в бесконечной ($L \rightarrow \infty$) изотропной антиферромагнитной цепочке с взаимодействием между ближайшими соседними спинами было получено как *точный* результат еще в 1938 году Л. Хультенем. В принятых нами обозначениях $E_0/J = -2\ln 2 + 1/2 = -0,886$ (см. в [1.27]). Это больше значения $-3/2$, соответствующего максимальной запутанности $C = 1$, и меньше значения $-1/2$, соответствующего незапутанному состоянию. Для согласованности основного состояния изотропной антиферромагнитной цепочки теперь будем иметь:

$$C = 2\ln 2 - 1 = 0,386. \quad (2.78)$$

Таким образом, мы видим, что в случае *изотропного спиново-спинового взаимодействия основное состояние* бесконечного антиферромагнитного кольца в отсутствие внешнего поля всегда *запутано*, но согласованность парной запутанности при $T = 0$ не достигает максимального значения, равного единице. Это связано с тем, что в цепочке взаимодействующих спинов основное состояние определяется не только состоянием выделенного спина-кубита и его первых соседей, но и состояниями более далеких соседей, то есть в цепочке имеет место коллективный эффект, приводящий к увеличению энергии при уменьшении степени запутанности основного состояния.

Как известно, квантовый характер состояний системы, принципиально отличающий ее от классической системы, определяется по нару-

где

$$M = (\gamma_1 P_{1,z} + \gamma_2 P_{2,z})/2 \quad (2.71)$$

— средний магнитный момент на один кубит.

Учитывая далее, что минимизации энергии соответствует фаза параметра $R_{1,2}$, равная π , для энергии основного состояния получим

$$E_0 = -BM + (J/2)(P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z}) - (J_{\perp}/2)|R_{1,2}|. \quad (2.72)$$

В таком виде выражение для энергии основного состояния учитывает неявным образом вклад взаимодействия не только с первыми ближайшими соседями, но и вклад взаимодействий с удаленными спинами.

Выражая далее параметр $|R_{1,2}|$, а с ним и недиагональные элементы тензора корреляции через энергию E_0 , для согласованности основного состояния получим:

$$C = 2\max\left[(-E_0 - BM + J/2)(P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})/2 J_{\perp} - \right. \\ \left. - 1/4((1 + P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})^2 - (P_{1,z} + P_{2,z})^2)^{1/2}, 0\right]. \quad (2.73)$$

Таким образом, запутанность имеет место при условиях

$$(R_{1,1}R_{2,2})^{1/2} > |R_{1,2}| > (R_{0,0}R_{3,3})^{1/2},$$

$$-E_0 > BM + J/2(P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})/2 J_{\perp} + 1/4((1 + P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})^2 - (P_{1,z} + P_{2,z})^2)^{1/2}. \quad (2.74)$$

Отсутствие парной запутанности не означает отсутствия недиагональных элементов матрицы плотности, которые в таком случае будут описывать классические корреляции.

В этом можно наглядно убедиться, если воспользоваться снова полученными выше явными выражениями (2.42) (2.43) для двухспинового кольца. Для недиагонального матричного элемента это дает

$$R_{1,2} = P_{1+}P_{2-} + G_{1+,2-} = 2(p_3 - p_4) = \\ = \frac{2\exp(J/T)\operatorname{sh}(J_{\perp}\sqrt{1+X^2}/T)}{\operatorname{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + \exp(J/T)\operatorname{ch}(J_{\perp}\sqrt{1+X^2}/T)}. \quad (2.75)$$

Это выражение, как видно, отлично от нуля и при $C = 0$, когда $\exp(J/T) \left| \operatorname{sh}(J_{\perp}\sqrt{1+X^2}/T) \right| \leq 1$.

Для модели Изинга ($J_{\perp} = 0$) недиагональный элемент $R_{1,2} = 0$, то есть отсутствуют как квантовые, так и классические корреляции поперечных составляющих спина. Однако при этом продольная составляющая тензора корреляций отлична от нуля и имеет вид

$$G_{1z,2z} = \frac{\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] - \exp(J/T)}{\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + \exp(J/T)}, \quad (2.76)$$

Это означает, что в модели Изинга классические корреляции продольных составляющих сохраняются.

Полностью выразить парную согласованность через энергию основного состояния E_0 , отнесенную к паре кубитов, удастся только для изотропного кольца с взаимодействием XXX-типа (то есть, когда $J_{\perp} = J$, $\gamma_1 = \gamma_2$) и в отсутствии магнитного поля, когда $P_{1,z} = P_{2,z} = M = 0$. С помощью общего соотношения (2.73) получим выражение, совпадающее по форме с (2.55):

$$C = -E_0 J - 1/2. \quad (2.77)$$

Явное выражение для энергии основного состояния пары спинов в бесконечной ($L \rightarrow \infty$) изотропной антиферромагнитной цепочке с взаимодействием между ближайшими соседними спинами было получено как **точный** результат еще в 1938 году Л. Хультенем. В принятых нами обозначениях $E_0 J = -2 \ln 2 + 1/2 = -0,886$ (см. в [1.27]). Это больше значения $-3/2$, соответствующего максимальной запутанности $C = 1$, и меньше значения $-1/2$, соответствующего незапутанному состоянию. Для согласованности основного состояния изотропной антиферромагнитной цепочки теперь будем иметь:

$$C = 2 \ln 2 - 1 = 0,386. \quad (2.78)$$

Таким образом, мы видим, что в случае **изотропного спин-спинового взаимодействия основное состояние** бесконечного антиферромагнитного кольца в отсутствие внешнего поля всегда **запутано**, но согласованность парной запутанности при $T = 0$ не достигает максимального значения, равного единице. Это связано с тем, что в цепочке взаимодействующих спинов основное состояние определяется не только состоянием выделенного спина-кубита и его первых соседей, но и состояниями более далеких соседей, то есть в цепочке имеет место коллективный эффект, приводящий к увеличению энергии при уменьшении степени запутанности основного состояния.

Как известно, квантовый характер состояний системы, принципиально отличающий ее от классической системы, определяется по нару-

шению некоторого неравенства, сформулированного Д. Беллом в 1965 году. В работе [1.28] неравенства Белла были рассмотрены применительно к изотропной антиферромагнитной цепочке, и было показано, что они нарушаются, если $-E/J > 3/(2\sqrt{2}) = 0,68$. Однако существует узкий интервал энергий, $0,5 < -E/J < 0,68$, в котором *неравенства Белла не нарушаются*, то есть где спиновая система оказывается не вполне квантовой. Поскольку в основном состоянии $-E/J = 0,886$, то следует сделать вывод, что в *этом состоянии неравенства Белла нарушаются* и, следовательно, спиновая цепочка с изотропным антиферромагнитным взаимодействием в основном состоянии является квантовой системой.

Итак, основное состояние квантового спинового регистра, взаимодействие между спинами-кубитами в котором имеет *изотропный* характер типа XXX, при низких температурах и в отсутствии внешнего поля *неизбежно является запутанными* и не может рассматриваться в качестве основного *инициализированного состояния*.

Однако, как уже отмечалось, квантовый регистр в виде L -спиновой цепочки Изинга OОZ-типа, находящейся в *продольном поле*, не имеет запутанных состояний вплоть до $T = 0$, и инициализированным состоянием регистра может быть его основное состояние.

До сих пор рассматривалась только парная запутанность. В многокубитовых системах существует и более сложная запутанность, включающая L кубитов. L -кубитовая запутанность соответствует корреляциям, описываемым тензором L ранга в $2^{L \times 2^L}$ -мерной матрице плотности.

Заключение: В общем случае приведенная двухкубитовая матрица плотности спинового кольца ρ описывается 15-ю *вещественными параметрами*, выражающимися через составляющие двух векторов Блоха и элементы трехмерного тензора корреляции.

Для бесконечного кольца с изотропным антиферромагнитным взаимодействием в отсутствие поля согласованность для парной запутанности основного состояния может быть выражена через его энергию. В этом случае *основное состояние* всегда является *запутанным*. Оно представляет собой *квантовую фазу* системы с недиагональным порядком. В отличие от парной тепловой запутанности для двухспинового кольца, согласованность основного состояния не соответствует синглетному состоянию пар и не достигает максимального значения $S=1$. При определенных значениях внешнего поля H или анизотропии происходит *квантовый фазовый переход* в незапутанное основное состояние.

Для квантового регистра в виде L -кубитовой цепочки Изинга, находящейся в *продольном поле*, вплоть до $T = 0$, оно не является запутанным.

3. Динамические процессы в ансамбле спиновых систем

3.1. Динамические уравнения для ансамбля двухкубитовых систем*

При рассмотрении динамических процессов в ансамбле многокубитовых цепочек спинов-кубитов воспользуемся простой моделью, учитывающей, как это сделано в предыдущем разделе, только *парную* корреляцию спиновых состояний, описываемую теперь *неравновесной приведенной* матрицей плотности. При этом будем предполагать, что влияние остальных спинов в цепочке, как и общего окружения, сводится к созданию флуктуирующих случайных полей, действующих на рассматриваемую пару кубитов.

В таких системах из полного числа $15 = 2^{2L} - 1$ независимых параметров мы имеем *три* вещественных параметра $P_{1,z}, P_{2,z}, G_{1z,2z}$ (2.60) и *шесть* комплексных параметров (2.64).

Гамильтониана приведенной двухспиновой системы достаточно общего вида (далее по повторяющимся «немым» индексам $i, j = x, y, z$ производится суммирование) запишем в виде:

$$\mathbf{H} = \sum_{\gamma=1}^{15} F_{\gamma} D_{\gamma} = -\gamma_1 B_i / 2 (\sigma_{1i} \otimes \mathbf{1}_2) - \gamma_2 B_j / 2 (\mathbf{1}_1 \otimes \sigma_{2j}) + (J_{ij} / 2) (\sigma_{1i} \otimes \sigma_{2j}), \quad (3.1)$$

где 15-ю независимыми вещественными параметрами являются

$$D_{\gamma} \equiv \{-\gamma_1 B_i / 2, -\gamma_2 B_j / 2, J_{ij} / 2\}. \quad (3.2)$$

Подставляя в уравнение движения фон Неймана для приведенной матрицы плотности

$$i\hbar \rho(t) / \partial t = [\mathbf{H}, \rho(t)] \quad (3.3)$$

выражение (2.59) и гамильтониан (3.1) и вычисляя след матрицы $Q_{\alpha}(t) = \text{Sp} F_{\alpha} \rho(t)$ по спиновым состояниям, получим систему из 15-ти линейных уравнений для классических динамических величин $Q_{\alpha}(t)$:

$$dQ_{\alpha}(t) / dt = -\text{Sp} F_{\alpha} [\mathbf{H}, \rho(t)] = i \sum_{\beta}^{15} \left\{ \sum_{\gamma}^{15} \text{Sp} ([F_{\alpha}, F_{\beta}] F_{\gamma}) D_{\gamma} \right\} Q_{\beta}(t) = \sum_{\beta}^{15} M_{\alpha\beta} Q_{\beta}(t), \quad (3.4)$$

где **антисимметричная эрмитовая матрица**

$$M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha} = M_{\beta\alpha}^* = \sum_{\gamma}^{15} \text{Sp}([F_{\alpha}, F_{\beta} | F_{\gamma}) D_{\gamma}$$

с нулевыми диагональными элементами выражается через 15 независимых параметров D_{α} , определяемых структурой гамильтониана двухспиновой системы, и содержит $15 \cdot 7 = 105$ вещественных параметров.

Полное число соответствующих уравнений равно числу независимых переменных, определяющих **унитарную** динамику двухкубитовой системы, то есть 15-ти.

С учетом свойств коммутаторов и антикоммутаторов матриц Паули с индексами $i, j = x, y, z$:

$$[\sigma_{\alpha, i}, \sigma_{\beta, j}] = i2\varepsilon_{ijk} \delta_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha, k}, \quad \{\sigma_{\alpha, i}, \sigma_{\alpha, j}\} = 2\delta_{ij}, \quad (3.5)$$

эта система динамических уравнений принимает следующий явный вид

$$\begin{aligned} dP_{1i}(t)/dt &= \varepsilon_{ikl}(\gamma_1 P_{1k}(t) B_l + J_{kn} G_{1l, 2n}(t)/2), \\ dP_{2i}(t)/dt &= \varepsilon_{ikl}(\gamma_2 P_{2k}(t) B_l + J_{nk} G_{1n, 2l}(t)/2), \\ dG_{1i, 2j}(t)/dt &= \gamma_1 \varepsilon_{ikl} B_l G_{1k, 2j}(t) + \gamma_2 \varepsilon_{jkl} B_l G_{1i, 2k}(t) + (\varepsilon_{ikl}/2) J_{kj} P_{1l}(t) + (\varepsilon_{jkl}/2) J_{ik} P_{2l}(t), \end{aligned} \quad (3.6)$$

где использовано обозначение $G_{1l, 2n}(t) = P_{1l}(t) P_{2n}(t) + G_{1l, 2n}(t)$.

Полученная система уравнений (3.6) **не учитывает релаксационные** процессы.

Для описания **неунитарных процессов** релаксации в квантовой системе обычно пользуются локальным во времени **линейным уравнением для матрицы плотности**, которая была сформулирована Дж. Линдбладом [1.29] на основе борновского приближения и в предположении марковского характера случайных воздействий со стороны окружения на рассматриваемую квантовую систему. Для матрицы плотности ансамбля двухспиновых систем это уравнение движения имеет вид:

$$i\partial\rho(t)/\partial t = [\mathbf{H}, \rho(t)] + iL_D[\rho(t)], \quad (3.7)$$

где

$$L_D[\rho(t)] = 1/2 \sum_{\gamma, \delta}^{15} a_{\gamma\delta} ([F_{\gamma}\rho(t), F_{\delta}^*] + [F_{\gamma}, \rho(t)F_{\delta}^*]) \quad (3.8)$$

— оператор Линдблада, $a_{\alpha\beta}$ — эрмитовая положительно полуопределенная матрица 15×15 в общем случае с 225-ю вещественными элемен-

тами, имеющими размерность обратного времени. Отметим, что след от правой части (3.7) равен нулю и, следовательно, $\text{Sp}\rho(t) = 1$.

Аналогичное линейное уравнение для матрицы плотности спиновой системы, взаимодействующей с окружающей средой, при наличии внешнего магнитного поля было получено на основе квантово-механической теории в 1953–1957 годах, за 20 лет до Линдблада в серии работ Р. Вангснесса и Ф. Блоха [1.6, 1.7, 1.9], а также А. Редфильда [1.30]. Там же было установлено, что необходимым для этого условием является малость времени корреляции τ_c , характеризующего скорость флуктуирующего воздействия «решетки» на квантовую систему по сравнению с временами релаксации, что отражает *марковский характер* случайных процессов, лежащий также в основе уравнения Линдблада.

Общая линейная система уравнений движения для 15-ти макроскопических динамических переменных $\text{Sp}\rho F_a = Q_a$ с учетом релаксационных эффектов принимает теперь следующий вид:

$$dQ_a(t)/dt = -i \text{Sp}\{[H, \rho(t)] F_a\} + \text{Sp}\{L_D[\rho(t)] F_a\}. \quad (3.9)$$

Однако следует заметить, что уравнение для матрицы плотности в форме (3.7) (3.8) описывает установление максимально смешанного равновесного состояния с равными населенностями для всех состояний, описываемого равновесной матрицей плотности $\rho_0 = 1/4$. Между тем, еще Редфильдом было показано, что описания установления термодинамического равновесия с равновесной матрицей плотности вида

$$\rho_0 = \exp(-H/kT) / \text{Sp} \exp(-H/kT),$$

в релаксационном операторе следует заменить ρ на разность $\rho - \rho_0$. Такое уравнение известно как уравнение Редфильда [1.30, 1.31].

Подставляя снова в (3.9) выражения (3.4) и (3.8) и вводя указанную поправку Редфильда, мы получим *обобщенную систему уравнений*, описывающую динамику двухкубитового ансамбля в виде:

$$dQ_a(t)/dt = \sum_{\beta} M_{a\beta} Q_{\beta}(t) + 1/2 \sum_{\beta} R_{a\beta} (Q_{\beta}(t) - Q_{\beta 0}(B)), \quad (3.10)$$

где

$$R_{a\beta} = \sum_{\beta} \sum_{\gamma, \delta} a_{\gamma\delta} \cdot \text{Sp} F_a ([F_{\gamma} F_{\beta}, F_{\delta}^{\dagger}] + [F_{\gamma}, F_{\beta} F_{\delta}^{\dagger}]) \quad (3.11)$$

— релаксационная эрмитова матрица.

Система для 15 динамических переменных описывает установление термодинамически равновесных значений $Q_{\alpha 0} = \text{Sp} \rho_0 F_{\alpha}$ (вводится дополнительно еще 15 параметров).

Для ансамбля однокубитовых систем матрица $R_{\text{эф}}$ 3×3 характеризуется тремя вещественными (положительными диагональными элементами). В качестве частного случая из уравнения (3.10) следует *уравнение Блоха* для вектора Блоха (1.10).

Число вещественных параметров, характеризующих *равновесное* смешанное состояние ансамбля двухкубитовых систем, равно $2^4 - 1 = 15$, тогда как число вещественных параметров, описывающих динамику *смешанного* состояния, в общем случае увеличивается до максимального числа элементов матрицы $R_{\text{эф}}$ $(2^4 - 1)^2 = 225$. Конкретное значение этих параметров определяется характером энергетического спектра спиновой системы, механизмами взаимодействия кубитов между собой и с окружением и может быть найдено лишь для некоторых простых моделей.

В случае, когда составляющими тензора корреляции можно пренебречь, число динамических параметров значительно уменьшается и сводится к шести составляющим двух векторов Блоха. Релаксационные процессы в такой системе приводят к тому, что динамические процессы в такой системе описываются системой из 6 связанных уравнений, содержащих 36 независимых параметров, равных числу различных элементов релаксационной матрицы в этом случае.

С увеличением числа кубитов в квантовом регистре помимо тензоров корреляции второго ранга для полного описания квантового состояния приходится вводить дополнительные параметры – тензоры корреляции все более высокого ранга. Но система уравнений при этом остается конечной. В результате для произвольной L -кубитовой системы число динамических параметров, равное числу элементов матрицы плотности без единицы, достигает огромных значений $(2^{2L} - 1)^2$. Соответственно растет и число элементов релаксационной матрицы. Таким образом, полное описание релаксационных процессов в многокубитовых квантовых системах при произвольных внешних воздействиях на нее оказывается *практически невозможным*.

Однако, к счастью, конкретные вычислительные операции обычно представляются с помощью достаточно простых квантовых операций, производящихся только с одно- и двухкубитовыми состояниями, которые должны выполняться за времена, малые по сравнению с характерными временами декогерентизации этих состояний, являющимися наименьшими из всех характерных времен релаксации в двухкубитовых спиновых

системах. Поэтому в дальнейшем мы ограничимся рассмотрением только процессов декогерентизации двухкубитовых приведенных состояний.

В случае ядерных спинов в твердом теле часто существенным становится *немарковский* характер воздействия окружения на спины. По аналогии с описанным выше в разделе 1.2 обобщением уравнения Блоха можно предложить также феноменологическое обобщение уравнения (3.10) путем введения взамен независящей от времени релаксационной матрицы $R_{\alpha\beta}$ некоторой *матрицы памяти* $f_{\alpha\beta}(t)$:

$$R_{\alpha\beta}(Q_{\beta} - Q_{\beta 0}(B)) \rightarrow \int_0^t f_{\alpha\beta}(\tau)(Q_{\beta}(t-\tau) - Q_{\beta 0}(B))d\tau. \quad (3.12)$$

Заключение: Процессы декогерентизации и диссипации двуспиновых систем в общем случае описываются в рамках линейной системы 15-ти уравнений, основанных на уравнении Линдблада для матрицы плотности. При этом релаксационная матрица задается $15 \times 15 = 225$ матричными элементами.

Обобщенная система уравнений, вообще говоря, содержит дополнительно еще 15 параметров – равновесных значений динамических переменных. Она может быть обобщена и на случай *немарковских* случайных процессов путем введения соответствующих *матриц памяти*, аналогично тому, как это было сделано при обобщении уравнения Блоха.

3.2. Декогерентизация состояний кубитов и способы ее описания

Декогерентизация квантовых состояний в системе, взаимодействующей с макроскопическим окружением, является, наряду с *диссипацией* энергии, типичным необратимым релаксационным процессом. Детальный обзор различных физических аспектов процессов декогерентизации дан в книгах [1.32, 1.33]. Это явление является и одним из основных ограничивающих факторов на пути создания квантовых компьютеров, поскольку именно оно ответственно за разрушение квантовых суперпозиций и, в частности, запутанных состояний.

Выше уже отмечалось, что матрица плотности как чистого, так и смешанного состояния в произвольном представлении имеет не только диагональные, но и недиагональные элементы. О квантовой когерентности, описываемой недиагональными элементами матрицы плотности, имеет смысл говорить лишь в том случае, если определено *представление* для этой матрицы. Следовательно, должен существовать объектив-

ный способ выбора базиса такого представления. В качестве этого базиса удобно выбрать такие ортогональные состояния квантовой системы, которые *минимально запутаны с состоянием окружения* в течение всего процесса эволюции квантовой системы. Они называются *состояниями-указателями* (pointer-states). Именно эти состояния используются в качестве вычислительного базиса. Примером такого состояния является инициализированное состояние.

Чистое начальное состояние рассматриваемой квантовой системы $\rho(0) = |\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|$ с течением времени, благодаря взаимодействию с окружением, запутывается с его состояниями. В качестве меры *запутанности* состояния квантовой системы, как части более сложной замкнутой квантовой системы, включающей окружение, часто используется *энтропия запутанности*, определяемая как

$$E(\rho) = -\text{Sp } \rho(t) \log_2 \rho(t), \quad (3.13)$$

где $\rho(t)$ — приведенный оператор плотности, полученный путем взятия шпура от общего оператора плотности квантовой системы и окружения $|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$ по неконтролируемым степеням свободы окружения. Иначе говоря, энтропия запутанности является *энтропией фон Неймана* для смешанного состояния квантовой системы, описываемого матрицей плотности $\rho(t) = \text{Sp}_f |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$.

Требуемые для представления матрицы плотности квантовой системы базисные состояния-указатели должны определяться с помощью минимизации функционала $E(\rho)$ относительно $|\Psi(0)\rangle$ с использованием требования их достаточной стабильности (robustness) во времени. Вообще говоря, такая процедура практически трудно выполнима, хотя существуют простые случаи, где такие состояния легко определить из эвристических соображений.

Природа таких состояний существенным образом зависит от вида спектральной плотности распределения частот окружения и их относительной роли в образовании запутанных состояний квантовой системы. В случае, когда характерные частоты ω_c спектральной плотности флуктуирующих полей, создаваемых окружением, малы по сравнению с характерными частотами квантовой системы, или когда гамильтониан квантовой системы и гамильтониан взаимодействия с окружением коммутируют между собой, состояниями-указателями могут служить собственные функции гамильтониана квантовой системы. Соответствующее представление может быть названо *энергетическим*.

В энергетическом представлении процессы диссипации и декогерентизации четко разделяются и имеют свои временные масштабы. Непре-

рывное затухание диагональных в энергетическом представлении элементов матрицы плотности в открытой квантовой системе, связанное с диссипацией энергии неравновесной системы при ее взаимодействии с окружением, характеризуется *временем диссипации энергии (спин-решеточным временем релаксации)*, которое в твердых телах при низких температурах *значительно больше времени декогерентизации*. В результате эволюции квантовой системы матрица плотности приобретает диагональный вид, характерный для смешанного состояния в этом представлении. Ранее было показано, что при наличии парной запутанности состояния вычислительного базиса не являются собственными функциями гамильтониана квантовой системы, и соответствующие квантовые состояния не могут рассматриваться в качестве состояний-указателей.

Заметим, что в произвольном представлении недиагональные элементы матрицы плотности могут оставаться отличными от нуля. Однако при ее диагонализации, то есть при переходе в собственное представление (это уже может быть не энергетическое представление), процессы релаксации матричных элементов будут описываться более сложным образом, не разделяясь на диссипацию и декогерентизацию.

Динамические процессы в квантовом регистре при условии, когда спиновая система и окружение представляют собой замкнутую систему, описываемую полным гамильтонианом

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB}, \quad (3.14)$$

где \mathbf{H}_S , \mathbf{H}_B и \mathbf{H}_{SB} – гамильтонианы спиновой системы, окружающей среды и их взаимодействия, в принципе, в каждом конкретном случае могут быть описаны на полностью квантовой основе. Однако, когда воздействие окружения на спиновую систему имеет характер *случайного стационарного процесса марковского типа*, можно воспользоваться феноменологическим уравнением Линдблада (3.7) для матрицы плотности. Явление релаксации широко изучалось в физике разного рода двухуровневых систем и, в частности, в физике ядерного магнитного резонанса [1.10, 1.31], теория которого основана на уравнении Блоха (1.10).

Наряду со случайными *непрерывными* стационарными воздействиями на квантовую систему со стороны окружающей среды существуют *случайные нестационарные воздействия* (помехи), вообще говоря, немарковского типа, создаваемые, в частности, управляющей и измерительной аппаратурой, которые приводят к *дискретным ошибкам* квантового состояния системы.

Для односпинового ансамбля, в котором отдельные спины-кубиты независимо взаимодействуют с окружением, любые ошибки в однокубитовой матрице плотности $\delta\rho(t)$, в том числе и связанные с непрерывной

декогерентизацией, могут быть определены из уравнения движения для матрицы плотности с гамильтонианом вида

$$\mathbf{H} = -(\omega_d/2) \sigma_z - 1/2 (\zeta_x(t) \sigma_z + \zeta_x(t) \sigma_x + \zeta_y(t) \sigma_y), \quad (3.15)$$

где $\zeta_{x,y,z}(t)$ — амплитуды трех типов случайных нестационарных воздействий на спин-кубит, соответствующих *трем разным типам* ошибок. Заметим, что воздействия, описываемые случайной функцией $\zeta_z(t) = \Delta\omega(t)$ не приводят к переходам между базисными состояниями, то есть не сопровождаются диссипацией энергии.

Заметим, что при таком подходе не учитываются процессы, происходящие в окружающей среде, и в этом смысле рассмотрение не является полным квантовым.

Случайная часть однокубитовой матрицы плотности выражается через три случайных составляющих вектора Блоха следующим образом:

$$\Delta\rho(t) = 1/2 (\Delta P_z(t)\sigma_z + \Delta P_+(t)\sigma_+ + \Delta P_-(t)\sigma_-). \quad (3.16)$$

Для описания процесса декогерентизации в общем случае весьма желательно иметь способ, не требующий определения состояний-указателей. Обратимся для этого к некоторым понятиям квантовой теории информации. Матрица плотности равновесного смешанного состояния открытой квантовой системы описывается матрицей, которая при диагонализации имеет ненулевые матричные элементы, являющиеся населенностями микросостояний p_n для состояний $|n\rangle$. Для такого состояния можно определить информационную энтропию Шеннона:

$$H[p] = - \sum_n p_n \log_2 p_n. \quad (3.17)$$

С другой стороны, информационная энтропия произвольного состояния квантового ансамбля выражается через матрицу плотности, согласно выражению фон Неймана:

$$S[\rho] = E(\rho) = - \text{Sp } \rho(t) \log_2 \rho(t). \quad (3.18)$$

Разность

$$S[\rho] - H[p] \geq 0 \quad (3.19)$$

обращается в нуль, когда матрица плотности диагональна в базисе $|n\rangle$. Если равновесное состояние чистое, то неравенство (3.19) обращается в $S[\rho] \geq 0$.

Скорость декогерентизации начального квантового смешанного состояния будет характеризоваться скоростью затухания этой разности, при этом она не зависит от представления оператора плотности $\rho(t)$, при априори известных начальных базисных состояниях $|n\rangle$. Зависимость от начального базиса и сложный из-за зависимости от $\log_2 \rho(t)$ вид выражения для энтропии являются основными недостатками этого способа [1.34].

Инвариантной относительно выбора представления матрицы плотности как текущего, так и начального состояния мерой процесса релаксации начального квантового состояния, описываемого матрицей плотности $\rho(0)$, включающего все процессы диссипации и декогерентизации, является **точность воспроизведения** состояния (fidelity), определяемая выражением

$$F(t) = \text{Sp } \rho(t)\rho(0) = 1 - p(t), \quad (3.20)$$

где $p(t)$ — вероятность получаемой ошибки.

Точность воспроизведения в случае чистого квантового начального состояния $\rho(0) = |\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|$ принимает вид $F(t) = \text{Sp } \rho(t)|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)| = \langle\Psi(0)|\rho(t)|\Psi(0)\rangle$. В случае достаточной медленности процессов диссипации характерная скорость затухания этой величины будет определять, главным образом, скорость декогерентизации начального состояния.

Для описания процесса релаксации может быть использована также так называемая **чистота** (purity) **квантового состояния**, определяемая выражением

$$P(t) = 2\text{Sp}(\rho(t)^2 - \rho(t)) + 1 = 2\text{Sp}(\rho(t)^2) - 1 \leq 1. \quad (3.21)$$

Для чистого квантового состояния $P = 1$, поскольку $\rho = \rho^2$. Для **максимально смешанного** состояния $\rho(0) = 1/2 \hat{1}$, $P = 0$. Если в начальный момент было задано чистое когерентное состояние, то релаксационные процессы приведут к его декогерентизации и переходу в смешанное равновесное состояние со значением $0 < P(\infty) < 1$.

Закключение: Описание скорости как процессов диссипации, так и процессов декогерентизации на основе уравнения Линдберга с учетом полной релаксационной матрицы даже для двухкубитового ансамбля **практически трудно выполнимо**. Однако, если заведомо известно, что диссипативные процессы являются очень медленными по сравнению с процессами декогерентизации, то для **общего описания** последних можно воспользоваться более простыми характеристиками. Ими являются такие инвариантные относительно используемого представления квантовых состояний величины как **точность** воспроизведения $F(t)$ или **чистота** $P(t)$ квантового состояния.

3.3. Полуклассическая модель адиабатической декогерентизации

3.3.1. Адиабатическая декогерентизация в однокубитовом ансамбле

Будем предполагать, что характерная частота воздействия окружения на спины-кубиты ω_C мала по сравнению с частотой переходов спинов между энергетическими уровнями ω_b ($\omega_C \ll \omega_b$) и поэтому *релаксации энергии практически не происходит* (это предположение как раз соответствует известному *адиабатическому приближению* в теории уширения линии ядерного магнитного резонанса [1.10]).

В этом случае в гамильтониане спина-кубита (3.15) можно учитывать только взаимодействие с внешним и с классическим флуктуирующим полем, создаваемым окружением, следующего вида

$$\mathbf{H} = -(\omega_0 + \Delta\omega(t)) \sigma_z/2, \quad (3.22)$$

где модуляция резонансной частоты $\zeta_z(t) \equiv \Delta\omega(t)$ – случайная функция времени, одинаковая здесь для всех кубитов ансамбля. За адиабатическую декогерентизацию состояния спина ответственна в этом случае так называемая *секулярная часть гамильтониана взаимодействия* с окружением, которая коммутирует z -составляющей спина.

Основной причиной декогерентизации в такой *адиабатической модели* являются не переходы между уровнями спиновой системы, которые дают малый вклад, сравнимый с вкладом в скорость диссипации энергии, а случайная модуляция резонансных частот $\Delta\omega(t)$, которая приводит к *расфазировке* состояний отдельных кубитов в ансамбле за счет случай-

ных сдвигов фазы $\varphi(t) = \int_0^t \Delta\omega(t) dt$ (случайная *фазовая* ошибка).

Подставляя выражение для односпиновой матрицы плотности в форме

$$\rho(t) = 1/2 (1 + \mathbf{P}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}) = 1/2 (1 + P_z(t) \sigma_z + P_+(t) \sigma_+ + P_-(t) \sigma_-) \quad (3.23)$$

в уравнение фон Неймана с гамильтонианом (3.22), для составляющих вектора Блоха $\mathbf{P}(t) = \text{Sp} \boldsymbol{\sigma} \rho(t)$ получим простые уравнения:

$$dP_z(t)/dt = 0, \quad dP_{\pm}(t)/dt = \mp i(\omega_0 + \Delta\omega(t)) P_{\pm}(t), \quad (3.24)$$

из которых следуют точные решения

$$P_z(t) = P_z(0), \quad P_{\pm}(t) = \exp\left(\mp i\omega_0 t \mp i \int_0^t \Delta\omega(\tau) d\tau\right) P_{\pm}(0). \quad (3.25)$$

Матрица плотности соответствующего чистого нестационарного однокубитового состояния со случайной зависимостью от времени фаз после классического усреднения ее по распределению случайных фаз кубитов будет иметь вид

$$\langle \rho(t) \rangle = 1/2 (1 + P_z(0) \sigma_z + P_+(0) \langle \exp(-i\varphi(t)) \rangle \sigma_+ + P_-(0) \langle \exp(i\varphi(t)) \rangle \sigma_-). \quad (3.26)$$

Далее сделаем модельное предположение, а именно, что случайная функция $\varphi(t)$ подчиняется *гауссовскому распределению* со средним значением $\langle \varphi(t) \rangle = 0$. Тогда получим

$$\langle \exp(\mp i(\omega_0 t + \varphi(t))) \rangle = \exp(\mp i\omega_0 t - \langle \varphi^2(t) \rangle / 2) = \exp(\mp i\omega_0 t - \Gamma(t)), \quad (3.27)$$

где декремент декогерентизации

$$\Gamma(t) = \int_0^t (t - \tau) f(\tau) d\tau, \quad (3.28)$$

а $f(\tau) = \langle \Delta\omega(\tau)\Delta\omega(0) \rangle$ — затухающая с характерным временем

$$\tau_c \sim \int_0^{\infty} |f(\tau)| / \langle \Delta\omega^2 \rangle d\tau$$

функция корреляции для стационарного процесса случайной частотной модуляции, являющаяся функцией памяти в рассматриваемом случае, $\langle \Delta\omega^2(0) \rangle \equiv \langle \Delta\omega^2 \rangle$ — интенсивность гауссовского процесса или *второй момент распределения случайных частот*. Заметим, что здесь не использовалось предположение о наличии малого параметра.

Если модуляция резонансной частоты $\Delta\omega(t)$ является также случайной функцией номера кубита в ансамбле и выполняется условие эргодичности то усреднение по временному распределению (3.27) будет удобно заменить усреднением по ансамблю кубитов.

Для усредненной поперечной составляющей вектора Блоха $\langle P_{\pm}(t) \rangle$ в рассматриваемом случае получим уравнение

$$\frac{d\langle P_{\pm}(t) \rangle}{dt} - i\omega_0 \langle P_{\pm}(t) \rangle + \int_0^t f(\tau) d\tau \langle P_{\pm}(t) \rangle = 0, \quad d\Gamma/dt = \int_0^t f(\tau) d\tau. \quad (3.29)$$

Выражение (3.28) при малом времени корреляции τ_c , таком, что $\tau_c^2 \langle \Delta\omega^2 \rangle \ll 1$ (случай «*сильного сужения*» резонансной линии в теории ЯМР, соответствующий марковскому типу случайных воздействий со стороны «решетки») сводится к $\Gamma(t) = tT_{\perp}^{-1}$, где $T_{\perp}^{-1} = \langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_c \approx 1/T_D$ — скорость декогерентизации кубита. Это означает, что при условии «сильного сужения» быстрые флуктуации приводят к *временному усреднению полей* и к существенному подавлению декогерентизации квантовых состояний (как при ЯМР в жидкости). Аналогичный эффект подавления декогерентизации может быть получен и искусственно путем воздействия на спиновую систему определенной последовательности коротких резонансных импульсов, как это делается в ЯМР спектроскопии высокого разрешения [1.35, 1.36]. Полностью марковским случайным процессам соответствует $\delta(\tau)$ — образная зависимость функции $f(\tau)$ от времени.

В противоположном случае «*жесткой решетки*» $\tau_c^2 \langle \Delta\omega^2 \rangle \gg 1$ (предельный немарковский случай, медленные флуктуации) выражение (3.28) сводится к $\Gamma(t) = \langle \Delta\omega^2 \rangle t^2 / 2$. В этом случае эффективная скорость декогерентизации увеличивается до $\langle \Delta\omega^2 \rangle^{1/2} \approx 1/T_D \gg 1/T_{\perp}$. Она определяется случайным статическим разбросом резонансных частот.

Уравнение (3.29), как и (1.13), описывает процессы адиабатической декогерентизации, обусловленные, в частности, и немарковскими случайными процессами, но, в отличие от (1.13), оно получено с использованием гауссовского распределения случайных фаз без привлечения борновского приближения.

Рассмотрим для сравнения на этом же примере вывод уравнения для усредненной поперечной составляющей вектора Блоха $\langle P_{-}(t) \rangle$, соответствующий борновскому приближению. Для этого запишем уравнение (3.24) в интегральной форме

$$P_{-}(t) = \exp(i\omega_0 t) P_{-}(0) - i \exp(i\omega_0 t) \int_0^t \Delta\omega(t') \exp(-i\omega_0 t') P_{-}(t') dt', \quad (3.30)$$

с помощью которого уравнение (3.24) перепишем в виде:

$$\begin{aligned} dP_{-}(t)/dt &= i\omega_0 P_{-}(t) + i\Delta\omega(t) \exp(i\omega_0 t) P_{-}(0) + \\ &+ \int_0^t \Delta\omega(t) \Delta\omega(t') \exp(-i\omega_0(t' - t)) P_{-}(t') dt'. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Это точное выражение (ср. с (1.23)). Далее ограничимся учетом членов второго порядка относительно случайных частот $\Delta\omega(t)$ и произведем

усреднение по их распределению, полагая, что $\langle \Delta\omega(t) \rangle = 0$ и

$$\langle \Delta\omega(t) \Delta\omega(t') \rangle = f(t-t'),$$

не определяя конкретный вид распределения и заменяя под интегралом $P_-(t)$ на $\langle P_-(t) \rangle$. В результате получим уравнение, полностью совпадающее по форме с уравнением (1.13):

$$\frac{d\langle P_-(t) \rangle}{dt} - i\omega_0 \langle P_- \rangle + \int_0^t f(\tau) \exp(i\omega_0\tau) \langle P_-(t-\tau) \rangle d\tau = 0. \quad (3.32)$$

Для определения условий, при которых уравнения (3.29) и (3.32) эквивалентны, перейдем в них во вращающуюся с резонансной частотой ω_0 систему координат, полагая $\langle P_-(t) \rangle = \exp(i\omega_0 t) P'_-(t)$. Получим, соответственно,

$$\frac{dP'_-(t)}{dt} + \int_0^t f(\tau) d\tau P'_-(t) = 0 \quad \text{и} \quad \frac{dP'_-(t)}{dt} + \int_0^t f(\tau) P'_-(t-\tau) d\tau = 0 \quad (3.33)$$

Для значений $t \gg \tau_c > \tau$ под интегралом во втором уравнении (3.33) можно произвести разложение $P'_-(t-\tau) = P'_-(t) - \tau \frac{dP'_-(t)}{dt} + \dots$. В результате найдем

$$\frac{dP'_-(t)}{dt} \left\{ 1 + \int_0^t f(\tau) \tau d\tau \right\} + \int_0^t f(\tau) d\tau P'_-(t) = 0, \quad (3.34)$$

где $\int_0^t f(\tau) \tau d\tau \approx \tau_c^2 \langle \Delta\omega^2 \rangle / 2$. Этот интеграл мал для случая «сильного сужения», когда имеет место малый параметр $\tau_c^2 \langle \Delta\omega^2 \rangle \ll 1$, и второе уравнение (3.33) становится эквивалентным первому.

В случае «жесткой решетки», когда $\tau_c^2 \langle \Delta\omega^2 \rangle > 1$, интеграл для временных интервалов $t \gg \tau_c > \tau$ больше единицы и уравнения (3.33) существенно различаются. Однако для интервалов $\tau_c \gg t > \tau$ будем иметь

$$\int_0^t f(\tau) \tau d\tau \approx t^2 \langle \Delta\omega^2 \rangle / 2 \ll \tau_c^2 \langle \Delta\omega^2 \rangle / 2, \quad \text{то есть оба уравнения (3.33)}$$

или (3.29) и (3.32) снова становятся эквивалентными.

Учитывая эту эквивалентность при рассмотрении процессов декогерентизации квантовых состояний ядерных спинов в твердых телах, когда

выполняется условие жесткой решетки, для временных интервалов $\tau_c \gg t$ будем использовать далее более простое уравнение (3.29).

Точность воспроизведения когерентного однокубитового состояния $F(t)$, обусловленная расфазировкой квантовых состояний в рассматриваемой адиабатической модели определяется выражением:

$$F(t) = \text{Spp}(t)\rho(0) = 1/2(1 + P_x(0)^2 + (P_x(0)^2 + P_y(0)^2) \exp(-\Gamma(t))) . \quad (3.35)$$

При этом населенности начальных базисных состояний $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ не изменяются. Следовательно, эти состояния в рассматриваемом случае могут рассматриваться как состояния-указатели.

Полуклассический подход, в котором влияние окружающей среды рассматривается как результат случайных воздействий, описываемых статистически классическими функциями распределения, использовался также для анализа процессов декогерентизации когерентных квантовых состояний в других более сложных системах, при условии, когда время декогерентизации оказывается самым маленьким из всех других характерных времен и в частности в сравнении с временами, характеризующими динамику окружения [1.37].

3.3.2. Адиабатическая декогерентизация в многокубитовом ансамбле

Рассмотрим сначала в качестве простого примера случай многоспиновой системы, находящейся в основном инициализированном состоянии (отсутствует запутанность), как, например, в случае модели Изинга. Пусть в этой системе создано чистое неравновесное *триpletное запутанное двухкубитовое состояние* с нулевой проекцией полного спина на ось z $|1, 0\rangle = \sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, матрица плотности которого имеет вид

$$\rho(1, 0) = |1, 0\rangle\langle 1, 0| = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} . \quad (3.36)$$

Влияние окружения, включающего состояния остальной части спиновой системы, будем описывать *квазиклассически*, как проявление коррелированных случайных сдвигов резонансных частот кубитов $\Delta\omega_{1,2}(t)$, образующих рассматриваемое запутанное состояние, и соответствующей случайной фазы, определяемой модулированной частью *продольного* спин-спинового взаимодействия $\Delta\omega_j(t) = \Delta J(t)$.

Гамильтониан спиновой системы с учетом секулярной части представим в виде

$$\mathbf{H} = -(\omega_0 + \Delta\omega_1(t))(\sigma_{1z} \otimes \mathbf{1})/2 - (\omega_0 + \Delta\omega_2(t))(1 \otimes \sigma_{2z})/2 + (J + \Delta\omega_J(t))(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z})/2. \quad (3.37)$$

После унитарного преобразования с оператором $\mathbf{U}_0 = \exp(-i\mathbf{H}_0 t)$, где невозмущенный гамильтониан

$$\mathbf{H}_0 = -\omega_0(\sigma_{1z} \otimes \mathbf{1})/2 - \omega_0(1 \otimes \sigma_{2z})/2 + J(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z})/2,$$

матрицы плотности (3.36) под действием случайного поля будет описываться выражением

$$\rho(1,0,t) = \mathbf{U}(t)^{-1} \rho(1,0)\mathbf{U}(t), \quad (3.38)$$

а матрица унитарного преобразования 4x4 имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(t) &= [\exp(i\varphi_1\sigma_{1z}/2) \otimes \exp(i\varphi_2\sigma_{2z}/2)] \cdot \exp(-i\varphi_J(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z})/2) = \\ &= [(\cos(\varphi_1/2)\mathbf{1} + i\sin(\varphi_1/2)\sigma_{1z}) \otimes (\cos(\varphi_2/2)\mathbf{1} + i\sin(\varphi_2/2)\sigma_{2z})] \cdot \\ &\quad \cdot [\cos\varphi_J(1 \otimes \mathbf{1}) + i\sin\varphi_J(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z})]/2 = \\ &= \begin{pmatrix} \exp(i(\varphi_1 + \varphi_2)/2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(i(\varphi_1 - \varphi_2)/2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-i(\varphi_1 - \varphi_2)/2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(-i(\varphi_1 + \varphi_2)/2) \end{pmatrix} \cdot \\ &\quad \cdot \begin{pmatrix} \exp(i\varphi_J) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(-i\varphi_J) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-i\varphi_J) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(i\varphi_J) \end{pmatrix}, \quad (3.39) \end{aligned}$$

где $\varphi_{1,2}(t) = \int_0^t \Delta\omega_{1,2}(t)dt$, $\varphi_J(t) = \int_0^t \Delta J(t)dt$ (аргумент t у $\varphi_{1,2}(t)$ и $\varphi_J(t)$ для краткости далее опущен).

Используя (3.38) для возмущенной матрицы плотности получим

$$\rho(1,0,t) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \exp(-i(\varphi_1 - \varphi_2)) & 0 \\ 0 & \exp(i(\varphi_1 - \varphi_2)) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (3.40)$$

Мы видим, что, модуляция продольной части спин-спинового взаимодействия не оказывает влияния на матрицу плотности рассматриваемого запутанного состояния.

Предположим далее, что случайные фазы $\varphi_{1,2}(t)$ имеют средние значения $\langle \varphi_{1,2}(t) \rangle = 0$ и принадлежат к двухкубитовому приведенному статистическому ансамблю, описываемому *двухмерным гауссовским распределением*, которое учитывает наличие корреляции между ними (см., например, [1.38]):

$$w(\varphi_1(t), \varphi_2(t)) = \frac{1}{2\pi\sigma_1(t)\sigma_2(t)\sqrt{1-\rho_{12}^2(t)}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2(1-\rho_{12}^2(t))}\left(\frac{\varphi_1^2(t)}{\sigma_1^2(t)} - \frac{2\rho_{12}(t)\varphi_1(t)\varphi_2(t)}{\sigma_1(t)\sigma_2(t)} + \frac{\varphi_2^2(t)}{\sigma_2^2(t)}\right)\right], \quad (3.41)$$

со среднеквадратичными значениями случайных фаз при стационарных флуктуациях сдвигов частот

$$\sigma_{1,2}^2(t_1) = \langle \varphi_{1,2}^2(t_1) \rangle = 2 \int_0^{t_1} (t-\tau) f_{1,2}(\tau) d\tau \quad (3.42)$$

и с нормированной *функцией взаимной корреляции* случайных фаз

$$\rho_{12}(t) = \frac{\langle \varphi_1(t)\varphi_2(t) \rangle}{\sigma_1(t)\sigma_2(t)} = \frac{2 \int_0^t (t-\tau) f_{12}(\tau) d\tau}{\sigma_1(t)\sigma_2(t)}, \quad (3.43)$$

где

$$f_{1,2}(\tau) = \langle \Delta\omega_{1,2}(\tau)\Delta\omega_{1,2}(0) \rangle, \quad f_{12}(\tau) = \langle \Delta\omega_1(\tau)\Delta\omega_2(0) \rangle. \quad (3.44)$$

Усредняя с помощью распределения (3.41) возмущенную матрицу плотности (3.40) по статистическому ансамблю, получим

$$\langle \rho(1,0,t) \rangle = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \exp(-\Gamma(t)) & 0 \\ 0 & \exp(-\Gamma(t)) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (3.45)$$

где

$$\begin{aligned} \exp(-\Gamma(t)) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi_2 w(\varphi_1, \varphi_2) \exp(\pm i(\varphi_1 - \varphi_2)) = \\ &= \exp\{-(\sigma_1^2(t) - 2\sigma_1(t)\sigma_2(t)\rho_{12}(t) + \sigma_2^2(t))/2\} = \\ &= \exp\left(-\int_0^t (t-\tau)(f_1(\tau) - 2f_{12}(\tau) + f_2(\tau))d\tau\right). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Функция взаимной корреляции случайных фаз может принимать значения в интервале

$$0 \leq \rho_{12}(t) \leq 1. \quad (3.47)$$

Декремент $\Gamma(t)$, описывающий затухание недиагональных элементов матрицы плотности когерентного состояния в отсутствие корреляции $\rho_{12}(t) = 0$ имеет вид

$$\Gamma(t) = (\sigma_1^2(t) + \sigma_2^2(t))/2 = \int_0^t (t-\tau)(f_1(\tau) + f_2(\tau))d\tau = 2\Gamma_1(t), \quad (3.48)$$

то есть равен сумме декрементов декогерентизации двух однокубитовых состояний. При максимальной корреляции $\rho_{12}(t) = 1$, $\varphi_1(t) = \varphi_2(t)$ (на оба кубита действует одна и та же мода флуктуационных полей) декогерентизация исчезает. Аналогичными свойствами обладает также и синглетное запутанное состояние ЭПР.

Таким образом, характер декогерентизации состояний системы взаимодействующих спинов-кубитов существенно зависит от статистических свойств флуктуирующих полей. При полностью коррелированном воздействии, когда кубиты взаимодействуют с одной и той же адиабатической модой флуктуационных полей (пример так называемой сильной декогерентизации), когерентность двух указанных двухкубитовых состояний *не нарушается*, и они могут рассматриваться в качестве базиса так называемого *подпространства, свободного от декогерентизации* (ПСД) (decoherence-free subspace – DFS). Эти два состояния характеризу-

ются равной нулю полной проекцией спина. Они могут быть выбраны при отмеченных выше условиях в качестве свободных от декогерентизации состояний логических кубитов.

Однако адиабатическая декогерентизация двух других когерентных состояний Белла двухкубитовой системы $(1/2)^{1/2}(|1, +1\rangle \pm |1, -1\rangle) = (1/2)^{1/2}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)$ при полностью коррелированном воздействии случайных полей $\rho_{12}(t) = 1$, как видим, не исчезает. Наоборот, ее декремент $\Gamma(t) = (\sigma_1(t) + \sigma_2(t))^2 / 2 = 2\sigma_1(t)^2 = 4\Gamma_1(t)$, то есть оказывается *в четыре раза больше*, чем при декогерентизации однокубитового состояния.

Для точности воспроизведения рассматриваемого двухкубитового когерентного состояния получим

$$F(t) = \text{Spp}(t)\rho = 1/2 (1 + \exp(-\Gamma(t))). \quad (3.49)$$

Следовательно, при некоррелированных случайных воздействиях будет происходить декогерентизация запутанного состояния ядерных спинов кольца и переход его в незапутанное смешанное состояние с диагональной приведенной матрицей плотности. Для полностью коррелированных случайных воздействий запутанность состояний с нулевой проекцией полного спина будет сохраняться.

Для когерентного запутанного состояния квантового регистра из L кубитов, например, типа суперпозиции L -кубитового состояния «шредингеровского кота»

$$|\psi\rangle = \sqrt{1/2} (|0_{L-1}, 0_{L-2}, \dots, 0_0\rangle + |1_{L-1}, 1_{L-2}, \dots, 1_0\rangle), \quad (3.50)$$

усредненная по гауссовскому распределению случайных фаз матрица плотности в предположении однородных *некоррелированных* фазовых шумов в укрупненном базисе из блоков состояний

$$|0_{L-1}, 0_{L-2}, \dots, 0_0\rangle, \quad |1_{L-1}, 1_{L-2}, \dots, 1_0\rangle$$

имеет вид

$$\langle \rho(t, L) \rangle = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & \exp(-L\Gamma_1(t)) \\ \exp(-L\Gamma_1(t)) & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Таким образом, многокубитовые когерентные запутанные состояния типа «кота» декогерентизируются с эффективным декрементом $L\Gamma_1(t)$. В случае *полностью коррелированных* флуктуаций фаз скорость декогерентизации таких состояний оказывается пропорциональной L^2 .

Для состояний, в которых блоки недиагональных элементов матрицы плотности имеют размерность $< L$, эффективная скорость декогерентизации в зависимости от коррелированности флуктуаций будет пропорциональна этой размерности или ее квадрату.

Таким образом, для того, чтобы удовлетворить третьему основному требованию (раздел 2.4) можно, во-первых, использовать квантовые алгоритмы, которые используют логические операции над состояниями, принадлежащими подпространству, свободному от декогерентизации, во вторых, обеспечить условие полной коррелированности случайного воздействия на все кубиты рассматриваемого состояния.

3.3.3. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, взаимодействующих с магнитными моментами примесных атомов

Роль окружающей среды для ядерных спинов в твердом теле часто могут играть примесные атомы, обладающие электронными или ядерными магнитными моментами.

Рассмотрим здесь в качестве примера модель декогерентизации, в которой каждый ядерный спин-кубит в однокубитовом ансамбле взаимодействует с флуктуирующими электронными спиновыми магнитными моментами N случайно расположенных примесных атомов (S -состояния атомов) посредством *диполь-дипольного магнитного взаимодействия*, описываемого гамильтонианом (в системе единиц СИ):

$$\mathbf{H}_{IS} = \sum_{i,\alpha\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) I_{\alpha} S_{\beta}(\mathbf{r}_i, t), \quad (3.52)$$

где

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\gamma_I \gamma_S \hbar}{r_i^3} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{3r_{i\alpha} r_{i\beta}}{r_i^2} \right), \quad (3.53)$$

$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Тл}^2 \text{ см}^3 / \text{Дж}$, γ_I и γ_S — гиромангнитные отношения ядерного спина и электрона, \mathbf{r}_i — радиус-вектор расстояния от ядерного спина до i -го электронного спина примесного атома, $\gamma_S \hbar S_{\beta}(\mathbf{r}_i, t)$ — составляющие электронного спинового магнитного момента, флуктуирующего из-за взаимодействия с другими электронными спиновыми магнитными моментами примесных атомов, создающего локальное флуктуирующее поле на ядерном спине

$$\Delta B_{\alpha}(t) = - \sum_{i,\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) (S_{\beta}(\mathbf{r}_i, t) - \langle S_{\beta}(\mathbf{r}_i) \rangle) / \gamma_I. \quad (3.54)$$

Угловые скобки обозначают ансамблевое усреднение по спиновым состояниям магнитных моментов окружающих примесных атомов. Предполагается, что при низких температурах колебания положений примесных атомов не имеют существенного значения.

Учтем далее, что функция корреляции случайного поля и ее спектр характеризуются резонансной частотой $\omega_S \gg \omega_I$, продольным (спин-решеточным) τ_1 и поперечным (спин-спиновым) τ_2 временами релаксации электронных спинов.

В сильных полях, когда $\omega_S \gg 1/\tau_2, 1/\tau_1$, электронные уровни не перекрываются и диссипативными процессами можно пренебречь. Мы имеем снова *адиабатический* случай. Функция корреляции для случайной модуляции резонансной частоты ядерного спина

$$\Delta\omega(t) = \gamma_1 \Delta B_z(t) = \sum_{i=1, \beta}^Z D_{z\beta}(r_i) (S_{\beta}(r_i, t) - \langle S_{\beta}(r_i) \rangle) \quad (3.55)$$

будет определяться выражением

$$\langle \Delta\omega(\tau) \Delta\omega(0) \rangle = C_S \int_{\beta} \sum_{\mathbf{r}} D_{z\beta}^2(\mathbf{r}) (\langle S_{\beta}(\mathbf{r}, \tau) S_{\beta}(\mathbf{r}, 0) \rangle - \langle S_{\beta}(\mathbf{r}) \rangle^2) d\mathbf{r}, \quad (3.56)$$

где C_S — концентрация примесных атомов (в см^{-3}).

Выражение для функции памяти для диполь-дипольного взаимодействия ядерных спинов со спинами электронов было получено в [1.39, 1.40]. В рассматриваемом случае адиабатической декогерентизации, когда $\omega_S \tau_2 \gg 1$, она определяется секулярной частью диполь-дипольного взаимодействия и принимает вид

$$f(\tau) = \langle \Delta\omega(\tau) \Delta\omega(0) \rangle = \langle \Delta\omega^2 \rangle \exp(-\tau/\tau_1), \quad (3.57)$$

где

$$\langle \Delta\omega^2 \rangle = C_S \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_1 \gamma_S \hbar \right)^2 \frac{16\pi}{15a^3} (\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2) \quad (3.58)$$

— второй момент распределения случайного разброса резонансных частот, a — минимальное расстояние от ядерного спина до примесного атома порядка постоянной решетки.

$$\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2 = (1 - \hbar^2 (\omega_S / T)) / 4. \quad (3.59)$$

В случае почти полной поляризации электронных спинов, то есть при низких температурах, когда $\omega_S/T \gg 1$, будем иметь

$$\langle \Delta\omega^2 \rangle \approx C_S \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_I \gamma_S \hbar \right)^2 \frac{16\pi}{15a^3} \exp(-\omega_S/T). \quad (3.60)$$

В результате для декремента декогерентизации найдем

$$\Gamma(t) = \int_0^t (t-\tau) \langle \Delta\omega(\tau) \Delta\omega(0) \rangle d\tau = \langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1^2 (t/\tau_1 - 1 + \exp(-t/\tau_1)). \quad (3.61)$$

Мультиплетная сверхтонкая структура, обусловленная взаимодействием с окружающими электронными спинами, остается разрешенной, если $\langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1^2 \gg 1$, что соответствует условию «жесткой решетки». В этом случае декогерентизация состояний ядерных спинов происходит за счет разброса резонансных частот, соответствующих отдельным составляющим сверхтонкой структуры для разных ядерных спинов ансамбля, и мы получим $\Gamma(t) = \langle \Delta\omega^2 \rangle t^2 / 2 \equiv t^2 / 2T_D^2$, где — T_D характерное время *неоднородной декогерентизации* ядерных спинов.

Обратный по отношению к рассмотренному случай соответствует условию «сильного сужения» $\langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1^2 \ll 1$, при котором $\Gamma(t) = t/T_1 = t \langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1$. Ядерный спин «чувствует» единое, усредненное по мультиплетной структуре, быстро флуктуирующее поле, создаваемое магнитными моментами окружающих примесных атомов. В этом случае для времени *однородной декогерентизации* (поперечной релаксации) будем иметь

$$T_1 = (\langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1)^{-1} \approx \langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1^2)^{-1/2} T_D \gg T_D. \quad (3.62)$$

Следовательно, увеличения времени декогерентизации T_1 можно добиться, уменьшая как интенсивность взаимодействия с электронными спинами (уменьшая их концентрацию), так и уменьшением времени продольной релаксации электронных спинов.

В случае выполнения условия «жесткой решетки» эффективное усреднение случайного разброса резонансных частот может быть осуществлено путем использования также методов спектроскопии высокого разрешения и, в частности, импульсных методов.

Заключение: Рассмотренная полуклассическая модель адиабатической декогерентизации может соответствовать большому набору *различных случайных процессов*. В этом смысле полуклассический подход об-

ладает *определенной общностью и широтой*. В частности, из рассмотренных моделей следует, что процесс декогерентизация состояний в многокубитовых системах существенно зависит от корреляционных свойств случайных полей.

Ограниченность модели состоит в том, что она *не вскрывает конкретные микроскопические механизмы взаимодействия спиновой системы с окружением*.

Взаимодействие с электронными магнитными моментами примесных атомов является одним их существенных механизмов декогерентизации кубитовых состояний ядерных спинов. Время адиабатической декогерентизации определяется *вторым моментом распределения случайных частот* и, при достаточно сильных внешних полях, *продольным временем релаксации* электронных спинов, играющим роль *времени корреляции* случайных полей, создаваемых окружением. Для подавления декогерентизации состояний ядерных спинов следует уменьшать как концентрацию случайно распределенных электронных спинов, так и время корреляции случайных полей (время продольной релаксации электронных спинов).

3.4. Квантовые модели адиабатической декогерентизации*

3.4.1. Точно решаемая квантовая модель адиабатической декогерентизации однокубитового состояния

Точно решаемая квантовая модель адиабатической декогерентизации состояний однокубитового ансамбля была первоначально детально изучена в работах [1.41 – 1.43], затем она была существенно уточнена при рассмотрении случая произвольного числа кубитов в регистре в [1.44]. Здесь мы дадим анализ этой модели для *отдельного спина-кубита однокубитового ансамбля*, а затем обсудим ее физическую адекватность.

В этой модели предполагается, что спиновая система и окружающая среда, с которой она взаимодействует, представляет собой замкнутую систему, которая для случая одного спина-кубита описывается гамильтонианом вида (матрица 4×4 , $\hbar = k = 1$):

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB} = \\ &= -(\omega/2) \sigma_z \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1} \otimes \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sigma_z \otimes \sum_k (g_k b_k^+ + g_k^+ b_k), \quad (3.63) \end{aligned}$$

где \mathbf{H}_S и \mathbf{H}_B — гамильтонианы кубита и окружения, $\mathbf{1}_S$ и $\mathbf{1}_B$ — единичные 2×2 матрицы, действующие, соответственно, на кубит и бозонное поле, представляющее окружающую среду, $b_k^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_k$ и $b_k = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_k$ — бозонные матрицы рождения и уничтожения гармонической полевой моды с волновым вектором \mathbf{k} , $b_k^+ b_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_k$ — оператор числа таких бо-

зонных мод. Третье, линейное по бозевским операторам слагаемое описывает секулярную часть взаимодействия спина с бозонным полем, ответственную за модуляцию резонансной частоты благодаря *однобозонным процессам рассеяния*, σ_z — диагональная матрица Паули,

$$g_k b_k^+ + g_k^* b_k = \begin{pmatrix} 0 & g_k \\ g_k^* & 0 \end{pmatrix}.$$

Роль бозонных мод в ЯМР квантовых регистрах могут играть фононные и магнонные моды. Например, при однофононном взаимодействии с акустическими фотонами в простой кубической решетке из N атомов с массами M_0 постоянная взаимодействия с размерностью частоты, с точностью до безразмерного множителя порядка единицы, может быть представлена в виде

$$g_k \sim \omega_0 \sqrt{\hbar \omega_k / (2NM_0)} \cdot \nu, \quad (3.64)$$

где ν — скорость звука.

Рассматриваемый гамильтониан имеет характерное свойство:

$$[\mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B, \mathbf{H}] = 0, \quad (3.65)$$

означающее, что он не описывает диссипацию энергии квантовой системы. Процесс декогерентизации в этом случае оказывается, как и в рассмотренном выше квазиклассическом случае, *адиабатическим*, когда диссипация энергии и сопровождающие ее некоторые процессы декогерентизации являются значительно более медленными, чем процесс декогерентизации, обусловленный только *расфазировкой квантового состояния*. Однако $[\mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B, \mathbf{H}_{SB}] \neq 0$, и это означает, что процесс адиабатической декогерентизации, с другой стороны сопровождается, вообще говоря, релаксационными процессами в окружении, то есть имеется обратное влияние спиновой системы на окружение.

Состояние системы кубит плюс окружение описывается матрицей плотности $\rho(t)$, а динамика отдельного кубита — приведенной матрицей

плотности $\rho_S(t)$, определяемой как след от оператора $\rho(t)$ по степеням свободы окружения:

$$\rho_S(t) = \text{Sp}_B \rho(t) = 1/2 (1 + P_z \sigma_z + P_+(t) \sigma_+ + P_-(t) \sigma_-). \quad (3.66)$$

Базисные состояния-указатели кубита являются в этом случае собственными состояниями гамильтониана \mathbf{H}_S . Взаимодействие с окружением не приводит к изменению населенностей спиновых состояний, диагональные элементы матрицы плотности (P_z) остаются постоянными (нет диссипации энергии). Взаимодействие с окружением определяет динамику фазы и когерентности состояния кубита, описываемой недиагональными элементами $P_{\pm}(t)$.

Предположим, что в начальный $t = 0$ состояния кубита и окружения не коррелированы, и оператор плотности имеет вид: $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B(0)$. Кроме того, предположим, что начальное значение матрицы плотности когерентного состояния кубита имеет отличную от нуля поперечную составляющую вектора Блоха $P_-(0) = \text{Sp}_S(\sigma_- \rho_S(0))$. В качестве матрицы плотности окружения, рассматриваемого как система бозонных возбуждений, будем использовать ее равновесное значение при температуре T , предполагая отмеченное выше обратное влияние спиновой системы на окружение несущественным:

$$\rho_B(0) = \exp(-\mathbf{H}_B/T) / (\text{Sp} \exp(-\mathbf{H}_B/T)) = \prod_{\mathbf{k}} \frac{\exp(-\omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} / T)}{(1 - \exp(-\omega_{\mathbf{k}} / T))^{-1}}. \quad (3.67)$$

Зависимость от времени недиагональных элементов матрицы плотности определяется зависимостью от времени составляющих вектора Блоха $P_{\pm}(t) = 2\text{Sp}(\sigma_{\pm} \rho(t))$. Матрица плотности $\rho(t)$ здесь удовлетворяет уравнению

$$i \partial \rho(t) / \partial t = [\mathbf{H}, \rho(t)], \quad (3.68)$$

которое в представлении взаимодействия $\rho_{\text{int}}(t) = \mathbf{U}^{-1}(t) \rho(t) \mathbf{U}(t)$ имеет вид

$$i \partial \rho_{\text{int}}(t) / \partial t = [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t), \rho_{\text{int}}(t)], \quad (3.69)$$

где

$$\mathbf{H}_{\text{SB}}(t) = \mathbf{U}^{-1}(t) \mathbf{H}_{\text{SB}} \mathbf{U}(t) = \sigma_z \otimes \sum_{\mathbf{k}} \left(g_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} \exp(i\omega_{\mathbf{k}} t) + g_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}} \exp(-i\omega_{\mathbf{k}} t) \right), \quad (3.70)$$

$$\mathbf{U}(t) = \exp(-i(\mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B)t). \quad (3.71)$$

Решение уравнения (3.69) представим как результат следующего унитарного преобразования

$$\rho_{\text{int}}(t) = U_{\text{int}}^{-1}(t) \rho(0) U_{\text{int}}(t), \quad (3.72)$$

в котором при $t > 0$

$$\begin{aligned} U_{\text{int}}(t) &= \exp\left(-i \int_0^t \mathbf{H}_{\text{SB}}(t') dt'\right) = \\ &= \exp\left\{-i \int_0^t \sum_{\mathbf{k}} \sigma_z \otimes (g_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ \exp(i\omega_{\mathbf{k}} t') + g_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}} \exp(-i\omega_{\mathbf{k}} t')) dt'\right\} = \\ &= \exp \sum_{\mathbf{k}} \left((\sigma_z / 2) \otimes i(b_{\mathbf{k}}^+ \xi_{\mathbf{k}}(t) + b_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^*(t)) \right), \quad \xi_{\mathbf{k}}(t) = 2g_{\mathbf{k}} (1 - \exp(i\omega_{\mathbf{k}} t)) / i\omega_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Как видно из (3.73), оператор $U_{\text{int}}(t)$ индуцирует при $t > 0$ запутывание состояний кубита и окружения. Именно образование запутанного состояния с окружением ответственно за процесс декогерентизации квантового состояния кубита, описываемого составляющими вектора Блоха $P_{\pm}(t)$. Вообще говоря, в (3.73) следовало бы ввести оператор упорядочения операторов по времени Вика \mathbf{T} . Однако, как показано в [1.44] это не существенно для однокубитовых ансамблей.

Перейдем к вычислению $P_{-}(t)$. Для этого подставим в выражение $P_{-}(t) = \text{Sp}(\sigma_{-} \rho(t))$ значение $\rho(t) = U(t) \rho_{\text{int}}(t) U^{-1}(t)$ и $\rho_{\text{int}}(t)$ из (3.72). Используя затем свойство инвариантности следа относительно циклической перестановки операторов и соотношение $U(t)^{-1} \sigma_{-} U(t) = \exp(i\omega_0 t) \sigma_{-}$, запишем

$$P_{-}(t) = \exp(i\omega_0 t) 2\text{Sp}(\sigma_{-} U_{\text{int}}^{-1}(t) \sigma_{+} \otimes \rho_{\text{B}}(0) U_{\text{int}}(t)) P_{-}(0). \quad (3.74)$$

Учитывая далее, что

$$U_{\text{int}}^{-1}(t) \sigma_{+} U_{\text{int}}(t) = \sigma_{+} \exp \sum_{\mathbf{k}} i(b_{\mathbf{k}}^+ \xi_{\mathbf{k}}(t) + b_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^*(t)), \quad (3.75)$$

и производя снова циклическую перестановку под знаком Sp_{B} , найдем

$$P_{-}(t) = \exp(i\omega_0 t) \text{Sp}_{\text{B}} \rho_{\text{B}}(0) \exp \sum_{\mathbf{k}} i(b_{\mathbf{k}}^+ \xi_{\mathbf{k}}(t) + b_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^*(t)) P_{-}(0), \quad (3.76)$$

где

$$\begin{aligned} & \text{Sp}_{\mathbf{B}} \rho_{\mathbf{B}}(0) \exp \sum_{\mathbf{k}} i \left(b_{\mathbf{k}}^+ \xi_{\mathbf{k}}(t) + b_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^*(t) \right) = \\ & = \prod_{\mathbf{k}} \text{Sp}_{\mathbf{B}_{\mathbf{k}}} \frac{\exp(-\omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} / T)}{(1 - \exp(-\omega_{\mathbf{k}} / T))^{-1}} \exp \sum_{\mathbf{l}} i \left(b_{\mathbf{l}}^+ \xi_{\mathbf{l}}(t) + b_{\mathbf{l}} \xi_{\mathbf{l}}^*(t) \right) = \\ & = \prod_{\mathbf{k}} \left\langle \exp i \left(b_{\mathbf{k}}^+ \xi_{\mathbf{k}}(t) + b_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^*(t) \right) \right\rangle_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.77)$$

$\text{Sp}_{\mathbf{B}_{\mathbf{k}}}$ — оператор следа матрицы (диагональной суммы по числам заполнения $n_{\mathbf{k}}$), соответствующий вычислению среднего значения в \mathbf{k} -ом состоянии: $\text{Sp}_{\mathbf{B}_{\mathbf{k}}}(\dots) = \langle \dots \rangle_{\mathbf{k}} = \sum_{n_{\mathbf{k}}} \left\langle n_{\mathbf{k}} \left| \frac{\exp(-\omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} / T)}{(1 - \exp(-\omega_{\mathbf{k}} / T))^{-1}} \dots \right| n_{\mathbf{k}} \right\rangle$, при этом

$$\langle 1 \rangle_{\mathbf{k}} = 1.$$

При вычислении этого среднего воспользуемся *теоремой Ф. Блоха* (см., например, [1.45]), которая позволяет найти *точное выражение* для среднего значения

$$\begin{aligned} \prod_{\mathbf{k}} \left\langle \exp i \left(b_{\mathbf{k}}^+ \xi_{\mathbf{k}}(t) + b_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^*(t) \right) \right\rangle_{\mathbf{k}} &= \exp \left(- (1/2) \sum_{\mathbf{k}} \left\langle \left(b_{\mathbf{k}}^+ \xi_{\mathbf{k}}(t) + b_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^*(t) \right)^2 \right\rangle_{\mathbf{k}} \right) = \\ &= \exp \left(- (1/2) \sum_{\mathbf{k}} |\xi_{\mathbf{k}}|^2 (2n_{\mathbf{k}} + 1) \right) = \exp(-\Gamma(t)), \end{aligned} \quad (3.78)$$

где

$$\Gamma(t) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\xi_{\mathbf{k}}(t)|^2}{2} \text{cth}(\omega_{\mathbf{k}}/2T) = \sum_{\mathbf{k}} 4 |g_{\mathbf{k}}|^2 \frac{1 - \cos(\omega_{\mathbf{k}} t)}{\omega_{\mathbf{k}}^2} \text{cth}(\omega_{\mathbf{k}}/2T) \quad (3.79)$$

представляет собой декремент декогерентизации.

Вводя далее в рассмотрение спектральную плотность для окружения $I(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}}) |g_{\mathbf{k}}|^2$, выражение (3.79) представим в виде [1.41, 1.42]:

$$\Gamma(t) = \int_0^{\infty} 4I(\omega) (2n(\omega, T) + 1) \frac{1 - \cos(\omega t)}{\omega^2} d\omega, \quad (3.80)$$

где $n(\omega T) = (\exp(\omega T) - 1)^{-1}$ — среднее число бозонных возбуждений при температуре T . Из (3.80) следует, что вклад тепловых и вакуумных флуктуаций в $\Gamma(t)$ оказывается разделенным, а смешивание временных шкал,

обусловленных этими двумя механизмами, приводит к достаточно сложному процессу декогерентизации. Для составляющих вектора Блоха будем иметь

$$P_z(t) = P_z(0), \quad P_{\pm}(t) = \exp(i\omega_D t - \Gamma(t)) P_{\pm}(0). \quad (3.81)$$

Конкретный вид зависимости $\Gamma(t)$ определяется видом спектральной плотности для окружающей среды. Если роль бозонов играют фононы кристаллической решетки, то их спектр ограничен сверху дебаевской частотой ω_D , а спектральную плотность можно представить в виде $I(\omega) = \alpha \omega^s \exp(-\omega/\omega_D)$, где постоянная α характеризует интенсивность спектра случайных воздействий на кубит, которая определяется через параметры $|g_k|^2$.

При значении параметра $p = 1$ одномерная окружающая среда называется «омической». Авторы работ [1.41–1.43] приводят результаты численного моделирования величины $\Gamma(t)$ для различных значений параметров ω_D и T для одно- и двухкубитового регистра.

В этом случае можно выделить три основных режима декогерентизации:

а) «Спокойный» режим при $t < (\omega_D)^{-1}$ с $\Gamma(t) \sim (\omega_D t)^2 < 1$, когда временные флуктуации мало влияют на декогерентизацию.

б) Квантовый режим при $(\omega_D)^{-1} < t < 1/T$ с $\Gamma(t) \sim 2\ln(\omega_D t)$, когда декогерентизация обусловлена квантовыми вакуумными флуктуациями.

в) Тепловой режим при $t > 1/T$ с $\Gamma(t) \sim Tt$, когда основную роль играют тепловые флуктуации.

Рассмотрим подробнее случай асимптотического поведения отношения $\Gamma(t)/t$ при $t \rightarrow \infty$, которое в пределе будет соответствовать обратному времени поперечной релаксации ядерного спина $1/T_{\perp}$:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} (\Gamma(t)/t) &= \lim_{t \rightarrow \infty} (d\Gamma(t)/dt) = 1/T_{\perp} = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} 4I(\omega)(2n(\omega, T) + 1) \frac{\sin(\omega t)}{\omega t} d(\omega) = 2\pi \lim_{\omega \rightarrow 0} I(\omega)(2n(\omega, T) + 1). \end{aligned} \quad (3.82)$$

При $T \gg \omega$ $n(\omega, T) = 0$ и декогерентизация определяется взаимодействием спина с нулевыми квантовыми флуктуациями бозонного резервуара.

Для среды с $p = 0$ предел $\lim_{\omega \rightarrow 0} I(\omega) = \text{Const}$ конечен. В этом случае мы имеем асимптотически экспоненциальную декогерентизацию со скоростью, определяемую параметром $1/T_{\perp}$. Декогерентизация такого типа

является аналогом случая «сильного сужения» в полуклассической модели декогерентизации. Она определяется только упругими процессами взаимодействия спина с бозоном, когда спектральная плотность отлична от нуля в широкой области частот, начиная с нулевых. При произвольных значениях t вклад в $\Gamma(t)$ дают также и неупругие виртуальные процессы с $\omega \neq 0$.

Заметим, что выражение (3.79) можно получить непосредственно, не прибегая к теореме Блоха, но с самого начала учитывая, что входящая в него интенсивность *не содержит более высоких степеней*, чем $|g_k|^2$, что соответствует *борновскому приближению* теории возмущений. Для этого, разлагая экспоненту в (3.77) в ряд Тейлора до второго порядка по g_k , запишем

$$\begin{aligned} \Gamma(t) &= -[\ln(P_-(t) \exp(-i\omega_0 t))] \approx \\ &\approx - \sum_k \ln \left(1 + i \langle b_k^+ \xi_k(t) + b_k \xi_k^*(t) \rangle_k - \langle (b_k^+ \xi_k(t) + b_k \xi_k^*(t))^2 \rangle_k / 2 + \dots \right) \approx \\ &\approx - \sum_k \left[i \langle b_k^+ \xi_k(t) + b_k \xi_k^*(t) \rangle_k - [\langle (b_k^+ \xi_k(t) + b_k \xi_k^*(t))^2 \rangle_k - \langle (b_k^+ \xi_k(t) + b_k \xi_k^*(t)) \rangle_k^2] / 2 + \dots \right] \end{aligned} \quad (3.83)$$

При усреднении этого разложения сохраняются лишь слагаемые, диагональные по числам заполнения. В результате мы получим то же выражение, что следует из точного (3.79)

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} (d\Gamma(t)/dt) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_k d \langle (b_k^+ \xi_k(t) + b_k \xi_k^*(t))^2 \rangle_k / 2 / dt = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_k 4 |g_k|^2 \langle (2n_k + 1) \rangle \frac{\sin(\omega_k t)}{\omega_k}. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Это значит, что для рассматриваемой модели точный результат полностью эквивалентен результату, полученному в борновском приближении.

3.4.2. Адекватность точно решаемой квантовой модели адиабатической декогерентизации

Обсудим здесь некоторые трудности, с которыми встречается рассмотренная выше квантовая модель декогерентизации.

Произведем диагонализацию полного гамильтониана системы

$$\mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB},$$

пользуясь следующим унитарным преобразованием

$$\hat{U} = \prod_{\mathbf{k}} D(g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}), \quad (3.85)$$

где $D(g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}) = \exp(\sigma_z \otimes (b_{\mathbf{k}}^+ g_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^+) / \omega_{\mathbf{k}}) = D^{-1}(-g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}})$ представляет собой известный из теории *когерентных состояний бозонного поля* унитарный *оператор смещения* Вейля для его k -ой бозонной моды [1.38]. В рассматриваемом случае он является четырехкомпонентной матричной функцией комплексного числа $g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}$.

Оператор смещения $D(g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}})$, действуя на вектор вакуумного состояния $|0\rangle$ (здесь температура $T = 0$), благодаря обратному влиянию спина-кубита на окружение создает когерентное состояние бозонного поля, которое выражается через векторы состояния в пространстве чисел заполнения (фоковские векторы состояний) $|n\rangle$ следующим образом [1.38]:

$$D(g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}) |0\rangle = |g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}\rangle = \exp(-|g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}|^2 / 2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (3.86)$$

Поскольку в вакуумном состоянии $n = 0$, то проекция многомодового когерентного бозевского состояния на исходное вакуумное состояние имеет вид

$$\langle 0 | \hat{U} | 0 \rangle = \langle 0 | \prod_{\mathbf{k}} D(g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}) | 0 \rangle = (\sigma_z \otimes \mathbf{1}_B) \exp(-\sum_{\mathbf{k}} |g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}|^2 / 2), \quad (3.87)$$

откуда следует, что оператор \hat{U} не может быть определен как унитарный оператор, создающий *когерентное состояние* (вакуумное состояние устойчиво) при $\sum_{\mathbf{k}} |g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}|^2 = \infty$. Для существования физически допустимых многомодовых когерентных состояний бозонной системы необходимо выполнение условия [1.46]:

$$\sum_{\mathbf{k}} |g_{\mathbf{k}} / \omega_{\mathbf{k}}|^2 = \int_0^{\infty} (I(\omega) / \omega^2) d\omega < \infty, \quad (3.88)$$

то есть наличие спектра с $p > 2$. Это условие не совместимо с рассмотренным выше условием экспоненциальной декогеренизации.

Оператор $D(g_k/\omega_k)$ производит следующие преобразования бозевских операторов:

$$\begin{aligned} D(g_k/\omega_k) (1_S \otimes b_k) D^{-1}(g_k/\omega_k) &= 1_S \otimes b_k - (\sigma_z \otimes 1_B) g_k/\omega_k, \\ D(g_k/\omega_k) (1_S \otimes b_k^+) D^{-1}(g_k/\omega_k) &= 1_S \otimes b_k^+ - (\sigma_z \otimes 1_B) g_k^*/\omega_k. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Выполняя далее такое унитарное преобразование над гамильтонианом, получим

$$\begin{aligned} &U (H_S \otimes 1_B + 1_S \otimes H_B + H_{SB}) U^{-1} = \\ &= U \left\{ -(\omega_0/2) \sigma_z \otimes 1_B + 1_S \otimes \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sum_k \sigma_z \otimes (g_k b_k^+ + g_k^+ b_k) \right\} U^{-1} = \\ &= H_S \otimes 1_B + 1_S \otimes H_B - \hat{I} \sum_k |g_k|^2 / \omega_k = H_S \otimes 1_B + 1_S \otimes H_B - \hat{I} \int_0^\infty (I(\omega)/\omega) d\omega. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Последнее слагаемое в (3.90) при $\lim_{\omega \rightarrow 0} I(\omega) = \text{Const}$ обращается в $-\infty$ из-за расходимости интеграла для $\omega \rightarrow 0$. Следовательно, экспоненциальный характер декогерентизации при нулевой температуре не достигается *ни при одном из собственных состояний* перенормированного гамильтониана, рассматриваемых в качестве основного. В случае сред $s > 2$, то есть при выполнении условия (3.88), указанное слагаемое имеет конечное значение, и основное состояние определено, но при этом декогерентизация уже не будет соответствовать экспоненциальному типу, а *выходит на насыщение*, и дальнейший распад когерентных состояний будет определяться не учитываемыми в модели релаксационными процессами.

Отметим, кроме того, что выбор гамильтониана взаимодействия спина с бозонной системой в виде (2.63), когда модуляция резонансной частоты кубита определяется однобозонным квантовым процессом рассеяния, *не является вполне обоснованным* и с точки зрения возможных конкретных микроскопических механизмов адиабатического взаимодействия ядерного спина с окружением в твердом теле.

3.4.3. Модель адиабатической декогерентизации состояния ядерного спина-кубита на основе двухбозонных процессов рассеяния

В предлагаемой здесь адиабатической модели предполагается, что ядерный спин взаимодействует не с одной, а с *двумя* бозонными модами.

Гамильтониан модели запишем в виде (матрица 4×4):

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1} \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB} = \\ &= -(\omega_0/2) \sigma_z \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1} \otimes \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{l}} \sigma_z \otimes (g_{\mathbf{k},\mathbf{l}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{l}} + g_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^* b_{\mathbf{l}}^+ b_{\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (3.90)$$

где индексы \mathbf{k}, \mathbf{l} в частности, соответствуют импульсам бозонов. Взаимодействие спина с бозонной системой описывает в первом порядке теории возмущений *упругое рассеяние бозонов* на спине без его переворота, но с изменением импульса рассеиваемых фононов на $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{l}$,

$$g_{\mathbf{k},\mathbf{l}} = g_{\mathbf{l},\mathbf{k}}^* - \omega_0 \left(\hbar (\omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{l}})^{1/2} / (2NM_0) \right) v^2,$$

при этом $(g_{\mathbf{k},\mathbf{l}} / \omega_0) \sim (g_{\mathbf{k}} / \omega_0)^2$ ($g_{\mathbf{k}} \sim \omega_0 \sqrt{\hbar \omega_{\mathbf{k}}} / (2NM_0) v$).

Неупругие процессы с поглощением и испусканием двух бозонов учитываться не будут, поскольку они ответственны за релаксационные процессы, сопровождающиеся переворотом спина и диссипацией энергии квантовой системы.

Выражение для матрицы плотности в представлении взаимодействия теперь принимает вид:

$$\rho_{\text{int}}(t) = \mathbf{U}_{\text{int}}^{-1}(t) \rho(0) \mathbf{U}_{\text{int}}(t), \quad (3.91)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{\text{int}}(t) &= \exp(\sigma_z / 2) \otimes \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{l}} i (\xi_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{l}} + \xi_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^{\mathbf{l}}(t) b_{\mathbf{l}}^+ b_{\mathbf{k}}), \\ \xi_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^{\mathbf{k}}(t) = \xi_{\mathbf{l},\mathbf{k}}^{\mathbf{l}}(t) &= 2g_{\mathbf{k},\mathbf{l}} (1 - \exp(i\omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}} t)) / i\omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}}, \quad \omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}} = \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{l}}. \end{aligned} \quad (3.92)$$

Для вычисления поперечной составляющей вектора Блоха воспользуемся снова выражением (3.74). Учитывая теперь, что

$$\mathbf{U}_{\text{int}}^{-1}(t) \sigma_{\pm} \mathbf{U}_{\text{int}}(t) = \exp \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{l}} i (\xi_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{l}} + \xi_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^{\mathbf{l}}(t) b_{\mathbf{l}}^+ b_{\mathbf{k}}) \sigma_{\pm}. \quad (3.93)$$

и производя циклическую перестановку под знаком следа в выражении для $P_{-}(t)$, в результате найдем

$$\begin{aligned} P_{-}(t) &= \exp(i\omega_0 t) \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{l}} \text{Sp}_{\mathbf{Bk},\mathbf{l}} P_{-}(0) = \\ &= \exp(-i\omega_0 t) \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{l}} \left\langle \exp i (\xi_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{l}} + \xi_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^{\mathbf{l}}(t) b_{\mathbf{l}}^+ b_{\mathbf{k}}) \right\rangle_{\mathbf{k},\mathbf{l}} \cdot P_{-}(0), \end{aligned} \quad (3.94)$$

где $Sp_{B_{kl}}$ соответствует вычислению диагональной суммы по числам заполнения бозонов n_k и n_l :

$$Sp_{B_{kl}}(\dots) \equiv \langle \dots \rangle_{n_k, n_l} = \sum_{n_k, n_l} \langle n_k, n_l | \frac{\exp(-\omega_k n_k / T)}{(1 - \exp(-\omega_k / T))^{-1}} \frac{\exp(-\omega_l n_l / T)}{(1 - \exp(-\omega_l / T))^{-1}} | n_k, n_l \rangle. \quad (3.95)$$

К сожалению, в этом случае коммутатор $[b_k^+ b_l, b_l^+ b_k] = b_k^+ b_k - b_l^+ b_l \neq \text{Const}$, то есть не выполняется необходимое условие для существования теоремы Блоха [1.39]. Поэтому воспользуемся непосредственно теорией возмущений для вычисления асимптотической скорости декогерентизации, аналогично тому, как это было сделано выше при получении выражения (3.84).

Снова с точностью до слагаемых второго порядка по $g_{k,l}$ запишем

$$\begin{aligned} (d\Gamma(t)/dt) &= -d [\ln(P_{\dots}(t) \exp(-i\omega_0 t))] / dt = \\ &= (d/dt) \sum_{k \neq l} \langle (b_k^+ b_l \xi_{k,l}(t) + b_l^+ b_k \xi_{k,l}^*(t))^2 / 2 \rangle_{k \neq l} \approx \\ &= (d/dt) \sum_{k \neq l} \langle (2n_k n_l + n_k + n_l) | \xi_{k,l}(t) |^2 / 2 \rangle_{k \neq l} \end{aligned} \quad (3.96)$$

и получим

$$(d\Gamma(t)/dt) = \sum_{k \neq l} 4 |g_{k,l}|^2 (2n(\omega_k, T)n(\omega_l, T) + n(\omega_k, T) + n(\omega_l, T)) \frac{\sin(\omega_{k,l} t)}{\omega_{k,l}}. \quad (3.97)$$

Введем далее двухчастотную спектральную плотность воздействий со стороны окружения

$$I(\omega, \omega') = \sum_{k,l} |g_{k,l}|^2 \delta(\omega - \omega_k) \delta(\omega' - \omega_{k,l}), \quad (3.98)$$

и, вычисляя $\lim_{t \rightarrow \infty}$, окончательно найдем

$$\begin{aligned} 1/T_{\perp} &= \lim_{t \rightarrow \infty} (d\Gamma(t)/dt) = \\ &= \lim_{\omega' \rightarrow 0} 4\pi \int_0^{\infty} I(\omega, \omega') (2n(\omega, T)n(\omega - \omega', T) + n(\omega, T) + n(\omega - \omega', T)) d\omega = \\ &= 8\pi \int_0^{\infty} I(\omega, 0) \frac{\exp(\omega/T)}{(\exp(\omega/T) - 1)^2} d\omega. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Из этого выражения следует, что основной вклад в $1/T_1$ дают бозонные моды с *близкими частотами* ($\omega' = \omega_{k,l} = 0$), что соответствует реальным процессам *упругого рассеяния*. При низких температурах скорость асимптотической декогерентизации, определяемая рассматриваемым механизмом, в отличие от однобозонного механизма, стремится к нулю, поскольку $n(\omega, T) \rightarrow 0$.

Перейдем теперь к рассмотрению *основного состояния* модели, описываемой гамильтонианом (3.90).

Основному состоянию спиновой системы соответствует собственное значение $\langle \sigma_z \rangle = 1$. Поэтому для описания основного состояния полной системы вместо гамильтониана (3.90) будем использовать следующее выражение (матрица 2×2):

$$\mathbf{H}_0 = -(\omega/2) 1_B + \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sum_{k \neq l} (g_{k,l} b_k^+ b_l + g_{k,l}^* b_l^+ b_k). \quad (3.100)$$

Воспользуемся далее каноническим преобразованием Боголюбова-Тябликова [1.47] для этого случая. Новые бозевские операторы представим в виде суперпозиции:

$$\beta_{k,l} = u_{k,l} b_k + v_{k,l} b_l, \quad \beta_{k,l}^+ = u_{k,l}^* b_k^+ + v_{k,l}^* b_l^+, \quad (3.101)$$

где коэффициенты $u_{k,l}$ и $v_{k,l}$ удовлетворяют следующему условию нормировки

$$|u_{k,l}|^2 + |v_{k,l}|^2 = 1, \quad (3.102)$$

при котором новые бозевские операторы удовлетворяют обычным коммутационным соотношениям.

Гамильтониан системы после преобразования принимает вид:

$$\mathbf{H}_0 = \sum_{k,l} E_{k,l} \beta_{k,l}^+ \beta_{k,l}. \quad (3.103)$$

Уравнения для определения $u_{k,l}$ и $v_{k,l}$ и собственных значений $E_{k,l}$ тогда находятся из соотношений:

$$\begin{aligned} i \frac{d\beta_{k,l}}{dt} &= [\beta_{k,l}, \mathbf{H}_0] = E_{k,l} \beta_{k,l}, \\ i \frac{d\beta_{k,l}^+}{dt} &= [\beta_{k,l}^+, \mathbf{H}_0] = -E_{k,l} \beta_{k,l}^+. \end{aligned} \quad (3.104)$$

С другой стороны, мы имеем уравнения движения для исходных бозевских операторов

$$\begin{aligned} i \frac{db_k}{dt} &= [b_k, H_0] = \omega_k b_k + \sum_l g_{k,l} b_l, \\ i \frac{db_l}{dt} &= [b_l, H_0] = \omega_l b_l + \sum_k g_{k,l}^* b_k. \end{aligned} \quad (3.105)$$

Подставим далее (3.101) в (3.103) и используем (3.104) и (3.105). Собирая коэффициенты при b_k , b_l , получим

$$\begin{aligned} E_{k,l} u_{k,l} &= \omega_k u_{k,l} + g_{k,l}^* v_{k,l}, \\ E_{k,l} v_{k,l} &= \omega_l v_{k,l} + g_{k,l} u_{k,l}. \end{aligned} \quad (3.106)$$

Из условия разрешимости этой системы найдем две ветви энергии перенормированных бозонных мод. Поскольку при упругом рассеянии бозонов $\omega_k = \omega_l$, получим

$$E_{k,l}^{\pm} = \omega_k \delta_{k,l} \pm |g_{k,l}|. \quad (3.107)$$

Условию устойчивости основного состояния соответствует положительность энергии обеих ветвей элементарных возбуждений. Таким образом, трудности, связанные с неограниченным ростом энергии основного состояния в однобозонной модели декогерентизации, в рассматриваемом случае *не возникают*.

Заключение: Известная точно решаемая адиабатическая модель *однобозонной декогерентизации* квантового состояния ядерного спина в твердом теле, исключая из рассмотрения сопровождающиеся диссипацией энергии релаксационные процессы, не является аналогом рассмотренной выше квазиклассической модели. Модель *встречается с рядом трудностей*, которые не позволяют считать ее адекватной реально происходящим декогерентизационным процессам в спиновых системах.

Модель адиабатической декогерентизации состояния кубита, учитывающая двухбозонные упругие процессы рассеяния, *свободна от трудностей*, которые присущи моделям с однобозонными процессами. Она может рассматриваться в качестве квантового аналога квазиклассической модели.

Приложение П.1

Алгоритм факторизации Шора на основе квантового фурье-преобразования*

Алгоритм факторизации Шора состоит в определении простых множителей p и q для заданного целого числа $M = p \cdot q$. Для этого предлагается использовать квантовую схему для определения периода r некоторой периодической функции вида $y_M(x) = a^x \bmod M$, где $x = 0, 1, \dots, N-1$, $N = 2^L$, a — любое число, не имеющее общих делителей с рассматриваемым числом M .

Например, в случае нечетного числа $M = 15$ можно выбрать $a = 2$ (если M — четное число, то задача разделения на множители, очевидно, сводится к задаче для соответствующего нечетного сомножителя). Тогда последовательность чисел $2^0, 2^1, \dots, 2^x$ по модулю 15 представляется в следующем виде 1, 2, 4, 8, 1, 2, 4, 8, ..., то есть имеет по x период $r = 4$.

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

Вычислительная квантовая схема для выполнения квантового алгоритма Шора ([1.16, 1.48]) использует два многокубитовых квантовых регистра X и Y . Каждый из них в начальный момент находится в инициализированном состоянии $|0\rangle = |0_{L-1}, 0_{L-2}, \dots, 0_0\rangle$. Регистр X используется для размещения аргументов x (натуральные числа) функции $y_M(x)$, то есть имеет N состояний $|x\rangle$, а вспомогательный регистр Y используется для размещения значений самой функции $y_M(x)$ с подлежащим определению периодом r . Регистр Y должен быть настолько большим, чтобы поместить значения функции $y_M(x)$, охватывающие достаточное число предполагаемых полных периодов.

На *первом* этапе алгоритма Шора инициализированное исходное состояние $|0\rangle$ регистра X переводится с помощью L -кубитовой операции Уолша-Адамара, представляющей собой совокупность действующих на каждый кубит однокубитовых операций Адамара $\mathbf{W} = \mathbf{H}_1 \otimes \mathbf{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathbf{H}_L$, в равновероятную (с равными $1/\sqrt{N}$ амплитудами) суперпозицию всех $N = 2^L$ булевых состояний $|x\rangle = |x_{L-1}, x_{L-2}, \dots, x_0\rangle$.

Второй регистр при этом остается в состоянии $|0\rangle$. В результате для системы двух регистров получаем незапутанное состояние

$$|\varphi[x,0]\rangle = \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes |0\rangle = \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} |x,0\rangle. \quad (\text{П1.1})$$

Полное число необходимых логических операций на этом этапе определяется числом элементарных операций Адамара, то есть числом L . Параллельно, с помощью обратимой вычислительной операции, квантовый регистр Y заполняется значениями функции $y_M(x) = 2^x \bmod M$, и первоначальное состояние системы двух регистров превращается в суперпозицию, в которой *состояния обоих регистров* становятся определенным образом *запутанными*. Например, в случае $M = 15$ эта суперпозиция имеет вид:

$$\begin{aligned} |\varphi[x, y_M(x)]\rangle &= \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes |y_M(x)\rangle = \\ &= \sqrt{1/N} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |2\rangle + |2\rangle \otimes |4\rangle + |3\rangle \otimes |8\rangle + |4\rangle \otimes |1\rangle + \\ &\quad + |5\rangle \otimes |2\rangle + |6\rangle \otimes |4\rangle + \dots + |N-1\rangle \otimes |2^{N-1} \bmod 15\rangle), \end{aligned} \quad (\text{П1.2})$$

откуда следует, что каждая последовательность значений функций $y_{15}(x)$ имеет на шкале x период $r = 4$, то есть каждому фиксированному состоянию второго регистра соответствуют значения амплитуд, оставшихся в первом регистре x на расстоянии друг от друга, равным периоду функции $y_{15}(x)$. Например, если *зафиксировано* состояние второго регистра $|4\rangle$, то в первом регистре соответствующие последовательности чисел x будут отличаться на период $r = 4$:

$$\begin{aligned} |\varphi[x,4]\rangle &= \sqrt{1/N} (|2\rangle + |6\rangle + |10\rangle + \dots + |4A+l\rangle) \otimes |4\rangle = \\ &= \sqrt{1/(A+1)} \sum_{j=0}^A |rj+l\rangle \otimes |4\rangle = \sum_{x=0}^N f(x)|x\rangle \otimes |4\rangle, \end{aligned} \quad (\text{П1.3})$$

где введена квазипериодическая функция

$$f(x) = \sqrt{1/(A+1)} \sum_{j=0}^A \delta_{x, rj+l}, \quad (\text{П1.4})$$

$0 \leq l \leq r < M$, $A = [N/r - 1]$ (целая часть). В рассматриваемом случае $l = 2$ — начальное значение x в (П.3), определяется выбором фиксированного значения $|4\rangle$.

Состояние (П.3) является однородной суперпозицией нумеруемых числами j и l базисных состояний в первом регистре с периодом r в зависимости от $x = rj + l$. Таким образом, *второй регистр служит для приготовления периодического состояния* в первом регистре. Это оказывается возможным благодаря использованию суперпозиции квантовых состояний обоих регистров, что является проявлением квантового параллелизма в алгоритме Шора. При этом не возникает необходимости отдельного измерения состояния второго регистра.

На *втором* этапе алгоритма для экстракции периода r над состоянием *первого* регистра производится операция Фурье-преобразования (2.16) (далее для простоты будем считать, что N точно делится на r , так что $A = Nr - 1$):

$$\text{QFT}_N: \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^{A} |rj+l\rangle \rightarrow \sum_{k=0}^{N-1} \varphi_f(k) |k\rangle, \quad (\text{П.1.5})$$

где

$$\varphi_f(k) = \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} \exp(2ki\pi x/N) f(x) = \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^{A} \exp \frac{2\pi i(jr+l)k}{N}. \quad (\text{П.1.6})$$

Вероятность получить состояние $|k\rangle$ определяется средним значением (черта сверху) всевозможных исходов, приводящих к состоянию с одними и теми же значениями r и k при измерении состояния регистра

$$p(k) = |\varphi_f(k)|^2 = (r/N^2) \left| \sum_{j=0}^{A} \exp(2\pi i j(rk \bmod N)/N) \right|^2. \quad (\text{П.1.7})$$

Учитывая, что основной вклад в (П.1.6) дают слагаемые, у которых rk/N близко к целому числу, точнее

$$-r/2 \leq rk \bmod N \leq r/2, \quad (\text{П.1.8})$$

в случае малых значений r/N для каждого значения r , которое удовлетворяет (П.1.8), можно получить оценку для вероятности в этом случае [1.16]:

$$p(k) \geq 4/(\pi^2 r). \quad (\text{П.1.9})$$

Из (П.1.9) следует, что по крайней мере с вероятностью $4/\pi^2 = 0,405$ измеренное значение k принимает дискретные значения $k = vN/r$, где $v = 0, 1, \dots, r-1$ — целое число. То есть, в результате квантового Фурье-

преобразования суперпозиция (П1.3) преобразуется в равновероятную суперпозицию (П1.6) с периодом N/r .

Измерение вероятности состояния (П1.7) позволяет определить значения $k = vN/r$, имея которые при известном k/N , можно найти отношение v/r . Если v и r не имеют общих множителей, кроме единицы, можно *определить период* r путем преобразования отношения v/r к виду, когда числитель и знаменатель не имеют других общих наибольших делителей, кроме единицы. После этого с помощью алгоритма Евклида находятся множители числа M .

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

Отметим здесь, что указанная в разделе 2.3 трудность выполнения квантового фурье-преобразования, выполняемого на ЯМР квантовых компьютерах, связанная с временной ценой отдельных квантовых операций, приводит к соответствующей трудности и для алгоритма Шора. Одним из возможных путей ее преодоления, как нам представляется, является замена квантового фурье-преобразования на квантовое вейвлет-преобразование [1.13].

Разложение числа N на множители с помощью классических операций в простейшем случае можно попытаться сделать путем простого деления N на 2, 3, 4 и т.д. до \sqrt{N} . Число элементарных операций в этом случае будет $\sqrt{N} = 2^{L/2}$, то есть экспоненциально зависит от числа кубитов в регистре L . Были разработаны более сложные классические алгоритмы факторизации, такие как RSA-алгоритм, который позволил уменьшить число необходимых операций до $\sim \exp(\text{const } L^{1/3} (\log_2 L)^{2/3})$. Однако это еще не достаточно полно решало проблемы, связанные с разработкой систем секретного обмена сообщениями по открытому каналу связи с открытым ключом (методы криптографии). Квантовый алгоритм факторизации Шора открывает новые возможности в решении проблем криптографии.

Заключение: В случае алгоритма Шора, использующего квантовое дискретное фурье-преобразование, полное число операций *степенным образом* (полиномиально) зависит от L ($\sim L^3$), то есть имеет место экспоненциальный выигрыш по сравнению с любыми классическими методами. Однако при реализации алгоритма Шора на ЯМР квантовом компьютере может встретиться ряд моментов, которые уменьшают указанный выигрыш. Среди них существенным является, на наш взгляд, как уже отмечалось выше, влияние *временной цены* при выполнении квантового фурье-преобразования.

Литература к Части 1

1. *Schumacher B.* Quantum Coding // *Phys. Rev.*, 1995, v. A51, № 4, pp. 2738–2747.
2. *Havel N. F., Doran C. J. L.* Geometric Algebra in Quantum Information Processing // 2001, LANL E-print arXiv:quant-ph/0004031.
3. *Тарханов В. И.* Геометрическая алгебра, ЯМР и обработка информации. – С-Петербург: Изд. СПбГПУ, 2002, 214 с.
4. *Landau L. D.* Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik // *Zeitsch. Phys.*, 1927, Bd. 45, S.430-441 / Перевод с немец.: *Л. Д. Ландау.* Проблема затухания в волновой механике, Собрание трудов. т. I. — М.: Наука, 1969, с. 19–31.
5. *Bloch F.* Nuclear Induction // *Phys. Rev.*, 1946, v. 70, № 7/8, pp. 460–473.
6. *Wangsness R. K., Bloch F.* The Dynamical Theory of Nuclear Induction // *Phys. Rev.*, 1953, v. 89, pp. 729–739.
7. *Bloch F.* Dynamical Theory of Nuclear Induction. II // *Phys. Rev.*, 1956, v. 102, pp. 104–135.
8. *Torrey H. C.* Bloch Equations with Diffusion Terms // *Phys. Rev.*, 1956, v. 104, pp. 563–565.
9. *Bloch F.* Generalized Theory of Relaxation // *Phys. Rev.*, 1957, v. 105, № 4, pp. 1206–1222.
10. *Abraham A.* The Principles of Nuclear Magnetism. — Oxford: Clarendon Press, 1961 / *А. Абрагам.* Ядерный магнетизм / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скроцкого. — М.: ИИЛ, 1963, 552 с.

11. *Lado F., Memory J. D., Parker G. W.* General Approach to the Line-Shape Problem in Nuclear-Magnetic-Resonance Spectra // *Phys. Rev.*, 1971, v. B4, №5, pp. 1406–1422.
12. *Кокин А. А.* Применение преобразования Лапласа в теории магнитного резонанса и релаксации // *Труды Уральского политехнического института, «Магнитный резонанс и релаксация»*, 1961, Сборник 111, с. 16–23.
13. *Валиев К. А., Кокин А. А.* Квантовые компьютеры: надежды и реальность. 2-е изд. — Москва–Ижевск: НИЦ РХД, 2002, 320 с.
14. *Barenco A., Bennett C. H., Cleve C., DiVincenzo D. P., Margolus N., Shor P., Sleater T., Smolin J. A., Weinfurter H.* Elementary Gates for Quantum Computation // *Phys. Rev.*, 1995, v. A52, № 5, pp. 3457–3467.
15. *Schrödinger E.* Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik // *Naturwissenschaften*, 1935, Bd. 23, S. 807–812.
16. *Ekert A., Jozsa R.* Quantum Computation and Shor's factoring algorithm // *Rev. Mod. Phys.*, 1996, v. 68, № 3, pp. 297–301.
17. *Saito A., Riei R., Akagi Y., Hashizume N., Ohta K.* Actual Computational Time-Cost of the Quantum Fourier Transform in a Quantum Computer Using Nuclear Spins // 2000, LANL E-print quant-ph/0001113.
18. *Barenco A., Ekert A., Suominen K. A., Törmä P.* Approximate Quantum Fourier Transform and Decoherence // *Phys. Rev.*, 1996, v. A54, № 1, pp. 139.
19. *Gea-Banacloche J.* Qubit-Qubit Interaction in Quantum Computers // *Phys. Rev.*, 1998, v. A57, № 1, pp. R1–R4.
20. *DiVincenzo D. P.* The Physical Implementation of Quantum Computation // *Fortschr. der Phys.*, 2000, v. 48, № 9–11, pp. 771–783.
21. *Nielsen M. A., Chuang I. I.* Quantum Computation and Quantum Information. — Cambridge Univ. Press, 2000, 676 p.
22. *Wootters W. K.* Entangled Chains // E-print LANL, 2000, quant-ph/0001114.
23. *O'Connor K. M., Wootters W. K.* Entangled rings // *Phys. Rev.*, 2001, v. A63, pp. 052302-1–052302-9.

24. Wootters W. K. Entanglement of Formation of Arbitrary State of Two Qubits // Phys. Rev. Lett., 1998, v. 80, № 10, pp. 2245–2248.
25. Gunlycke D., Kendon V. M., Vedral V., Bose S. Thermal Concurrence Mixing in a One-Dimensional Ising Model // Phys. Rev., 2001, v. A64, pp. 0423302-1–0423302-7.
26. Wang X. Threshold Temperature for Thermal Entanglement and Ground-State Multipartite Entanglement in the Isotropic Heisenberg Model // 2002, LANL E-print quant-ph/0205049.
27. Изюмов Ю. А., Скрябин Ю. Н. Статистическая физика магнитоупорядоченных систем. — М.: Наука, 1987, 264 с.
28. Wang X., Zanardi P. Quantum Entanglement and Bell Inequalities in Heisenberg Spin Chains // 2002, LANL E-print quant-ph/0202108.
29. Lindblad G. On the Generation of Quantum Dynamical Semigroups // Commun. Math. Phys., 1976, v. 48, pp. 119–130.
30. Redfield A.G. On the Theory of Relaxation Processes // Journ. Resear. Devel. IBM, 1957, v. 1, pp. 19–31.
31. Slichter C. P. Principles of Magnetic Resonance. Third Ed. — Berlin et al.: Springer, 1990, 656 p. / Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. / Перевод с англ. 2-го издания 1980 г. под ред. Г. В. Скроцкого. — М.: Мир, 1981, 445 с.
32. Giulini D., Joos T., Kiefer C., Kupsch J., Stamatescu I. O., Zeh H. Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory. — Berlin et al.: Springer, 1996, 366 p.
33. Менский М. Б. Квантовые измерения и декогеренция. — М.: Физматлит, 2001, 228 с.
34. Anastopoulos C. Frequently Asked Questions about Decoherence // E-print LANL, 2000, arXiv:quant-ph/0011123.
35. Haeberelen U. High Resolution NMR in Solids. Selective Averaging — Acad. Press: N.Y., 1976. / Хеберлен У., Меринг М. ЯМР высокого разрешения в твердых телах / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скроцкого и Э. Т. Липпмаа. — М.: Мир, 1980, 504 с.
36. Ernst R. R., Bodenhausen G., Wokaun A. Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions. — Oxford: Univ. Press, 1994, 650 p. / Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР

- в одном и двух измерениях. / Перевод с англ. 1-го издания 1987 г. под ред. К. М. Салихова. — М.: Мир, 1990, 710 с.
37. *Strunz W. T., Haake F., Braun D.* Universality of Decoherence in the Makroworld // E-print LANL, 2002, arXiv:quant-ph/0204129.
 38. *Mandel L., Wolf E.* Optical Coherence and Quantum Optics. — Cambridge: University Press 1995 // *Мандель Л., Вольф Э.* Оптическая когерентность и квантовая оптика. / Перев. с англ. под ред. В. В. Самарцева — М.: Физматлит, 2000, 896 с.
 39. *Кокин А. А., Скряцкий Г. В.* Теория парамагнитного резонанса в системах, содержащих два сорта магнитных момента // ЖЭТФ, 1959, т. 37, вып. 2(8), с. 482–489.
 40. *Кокин А. А.* Магнитный резонанс в системах, обладающих одновременно электронным и ядерным парамагнетизмом // Изв. ВУЗ, 1960, № 4, с. 198–205.
 41. *Palma G. M., Suominen K. A., Ekert A. K.* Quantum Computers and Dissipation // Proc. Roy. Soc., Lond., 1996, v. A452, pp. 567.
 42. *Mozyrsky D., Privman V.* Adiabatic Decoherence // Jour. Stat. Phys., 1998, v. 91, №. 3/4, pp. 787–799.
 43. *Sun C. P., Zhan H., Liu X. F.* Decoherence and Relevant Universality in Quantum Algorithms via a Dynamic Theory for Quantum Measurement // Phys/ Rev., 1998, v. A58, № 3, pp. 1810–1821.
 44. *Reina J. H., Quiroga L., Johnson N. F.* Decoherence of Quantum Registers // E-print LANL, 2001, arXiv:quant-ph/0105029.
 45. *Cohen-Tannoudji C., Dui B., Laloë F.* Механика Квантовая. — Paris Hermann. 1973 // *Козэн-Таннуджи К., Дюу Б., Лалоз Ф.* Квантовая механика, т. 1. — Екатеринбург / Перевод с французского Л. Н. Новикова: Изд. Уральский Университет, 2000, 944 с.
 46. *Alicki R.* Decoherence in Quantum Open Systems Revisited // E-print LANL, 2002, arXiv:quant-ph/0205173.
 47. *Тябликов С. В.* Методы квантовой теории магнетизма. — М.: Наука, 1975, 528 с.

48. *Shor P. Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer // SIAM Jour. Comp., 1997, v. 26, № 5, pp. 1484–1509 / Шор П. Полиномиальные по времени алгоритмы разложения числа на простые множители и нахождения дискретного логарифма для квантового компьютера. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко : Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» т. II. — Ижевск: НИЦ РХД., 1999, с. 200–247.*

Часть 2.

Перспективные варианты твердотельных ЯМР квантовых компьютеров

4. Общие проблемы реализации полномасштабного квантового компьютера

4.1 Жидкостные прототипы ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров и их ограниченность

Первые прототипы ЯМР квантовых компьютеров были реализованы в 1997 году на ядерных спинах *двух* атомов водорода ^1H в молекулах 2,3-дибромотиофена $\text{SCH}:(\text{CBr})_2:\text{CH}$ и на *трех* ядерных спинах — одном в атоме водорода ^1H и двух в изотопах углерода ^{13}C в молекулах трихлорэтилена $\text{CCl}_2:\text{CHCl}$. Позднее были осуществлены квантовые операции также и в других жидкостях с числом спинов-кубитов $L = 3,5,6,7$ (см. обзор Дж.Джонса [2.1] и книгу [2.2]).

Главным преимуществом такого компьютера является то, что практически независимые молекулы-компьютеры, играющие роль квантовых регистров, благодаря усреднению меж- и внутримолекулярных диполь-дипольных магнитных взаимодействий в результате интенсивного броуновского движения в жидкости молекул, *действует независимо*. Тем самым обеспечивается возможность управления ими и измерение их состояний с помощью известных в технике ядерного магнитного резонанса (ЯМР) операций над *макроскопическим объемом* жидкости. Время декогерентизации квантовых состояний ядерных спинов в жидкости может составлять несколько секунд, то есть достаточно велико по сравнению с временем выполнения отдельной логической операции (миллисекунды).

Существенным преимуществом такого компьютера является то, что индивидуальное обращение к отдельным кубитам в них заменяется одновременным обращением к соответствующим кубитам во всех молекулах ансамбля. Компьютер такого рода получил название *ансамблевого* (bulk-ensemble quantum computer) **ЯМР квантового компьютера**. Важной особенностью является то, что он работает при *комнатной температуре*.

В области ЯМР квантовых компьютеров на органических жидкостях к настоящему времени достигнуты наибольшие успехи. Экспериментально на ЯМР квантовых компьютерах были осуществлены алгоритм Гровера поиска данных, квантовое фурье-преобразование, квантовая коррекция ошибок, квантовая телепортация, квантовое моделирование и другие операции.

Однако существует ряд ограничений для развития этого направления ЯМР квантовых компьютеров, которые связаны со следующими обстоятельствами:

1. Исходное квантовое состояние системы ядерных спинов в отдельной молекуле жидкого образца благодаря конечному значению температуры неизбежно является *смешанным*. Для инициализации такого состояния требуется преобразование его в так называемое *квазичистое состояние*, обладающее определенными свойствами чистого основного состояния. Матрица плотности преобразуется при этом к виду [2.1, 2.2]:

$$\rho_0 \rightarrow \rho_\varepsilon = (1 - \varepsilon(L))2^{-L} \cdot \mathbf{1} + \varepsilon(L)|0\rangle\langle 0|. \quad (4.1)$$

Для z -составляющей максимального значения вектора Блоха ядерного спина в этом состоянии получим $P_{z_{\max}} = \text{Sp}(\sigma_z \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}) = \varepsilon(L) \leq 1$, в то время как в чистом состоянии $P_z = \langle 0 | \sigma_z \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} | 0 \rangle = 1$. Следовательно, параметр $\varepsilon(L)$, который имеет при $\omega_0/T \ll 1$ значение $\varepsilon(L) \approx L(\omega_0/T)2^{-L}$, где характерная резонансная частота ω_0 предполагается для простоты одинаковой для всех спинов в молекуле (см. подраздел 5.4.2), представляет собой вероятность, с которой чистое состояние $|0\rangle\langle 0|$ входит в матрицу плотности квазичистого состояния ρ_ε .

Такое преобразование требует выполнения некоторых *неунитарных* операций. Одной из таких операций является «*временное усреднение*» трех результатов, предварительно полученных в итоге унитарных операций над диагональной в вычислительном базисе матрицей плотности смешанного состояния [2.3].

Для смешанного двухкубитового состояния с матрицей плотности

$$\rho = \begin{pmatrix} p_{00} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{01} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{11} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

такими унитарными операциями являются

$$\mathbf{P}_0 = \hat{\mathbf{I}} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \mathbf{P}_1 = \text{SWAP} \cdot \text{CNOT} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{vmatrix},$$

$$\mathbf{P}_2 = \mathbf{P}_1^+ = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}. \quad (4.3)$$

В результате этих трех операций из состояния (4.2) получим:

$$\begin{vmatrix} p_{00} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{01} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{11} \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} p_{00} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{01} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{10} \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} p_{00} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{01} \end{vmatrix} \quad (4.4)$$

Последующее их усреднение дает:

$$\rho_\varepsilon = \langle \rho \rangle = 1/3 (\rho + \mathbf{P}_1 \rho \mathbf{P}_1^+ + \mathbf{P}_2 \rho \mathbf{P}_2^+) = (1 - \varepsilon)/4 \hat{\mathbf{I}} + \varepsilon \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix},$$

$$\varepsilon = (4p_{00} - 1)/3. \quad (4.5)$$

Матрица плотности квазичистого состояния не имеет недиагональных элементов, и, следовательно, *квазичистое состояние является незапутанным* состоянием при любой температуре. При этом число независимых параметров такого квазичистого состояния уменьшается до одного (в (4.5) это населенность основного уровня p_{00}).

2. Измеряемый на выходе жидкостного ЯМР квантового компьютера сигнал пропорционален экспоненциально малому параметру типа $\varepsilon(L) \approx L(\omega_0/T)2^{-L}$, то есть экспоненциально быстро убывает с ростом числа

кубитов L в молекуле. Ограниченная чувствительность ЯМР спектрометра позволяет измерять сигналы в случае, если молекулы содержат относительно небольшое число кубитов.

3. С другой стороны, число ядерных спинов-кубитов с достаточно хорошо различающимися резонансными частотами в каждой молекуле не может быть большим из-за быстрого усложнения мультиплетного характера энергетического спектра и конечной ширины отдельных уровней.

В конечном счете, ансамблевые ЯМР квантовые компьютеры на молекулах органической жидкости не могут иметь число кубитов L , значительно *больше двух-трех десятков* (см. обзор [2.1]). Этого далеко недостаточно для создания на этом пути полномасштабного ЯМР квантового компьютера (раздел 2.1).

Квантовые корреляции в смешанных состояниях жидкостных квантовых компьютеров при комнатных температурах, определяются в основном *локальными взаимодействиями* между кубитами в молекулах. При малых значениях параметра ε и для *относительно небольшого числа кубитов*, при котором $\varepsilon \leq (1+2^{2L-1})^{-1}$, соответствующие квазичистые состояния оказываются *незапутанными* при любых унитарных преобразованиях [2.4]. В таком состоянии *не нарушаются неравенства Белла*, а составляющие тензора корреляции описывают классические корреляции. С этой точки зрения жидкостные прототипы квантовых компьютеров при таких значениях параметра ε не являются вполне квантовыми, однако они могут имитировать некоторые квантовые процессы. Следует отметить, что вопрос о *«квантовости»* процессов в малокубитовых жидкостных квантовых компьютерах ($\varepsilon \ll 1$) все еще остается предметом интенсивных дискуссий.

Однако для значений параметра $\varepsilon > (1+2^{L-1})^{-1}$ квазичистое состояние (4.1) может быть вполне квантовым, в частности это должно иметь место при любых L для $\varepsilon \sim 1$ [2.5].

Заключение: Жидкостные ЯМР квантовые компьютеры могут рассматриваться лишь как *прототипы* полномасштабных ЯМР квантовых компьютеров, которые позволяют имитировать основные принципы квантовых вычислений на ансамбле сравнительно небольших квантовых регистров.

Для реализации полномасштабного многокубитового ЯМР квантового компьютера перспективным представляется *твердотельный вариант ЯМР квантового компьютера*, работающего при достаточно *низких спиновых температурах* и использующего *ансамблевый подход*, уже опробованный на жидкостных типах ЯМР квантовых компьютеров.

4.2. Проблемы приготовления базисных состояний многокубитового квантового регистра

4.2.1. Влияние однокубитовых случайных воздействий на состояния квантового регистра

Обратимся здесь к некоторым свойствам основного (инициализированного) состояния многокубитового квантового регистра при наличии произвольных, случайных воздействий на отдельные кубиты.

Процесс формирования исходного состояния

$$|0\rangle \equiv |0_{L-1}, 0_{L-2}, 0_{L-3}, \dots, 0_0\rangle$$

обычно состоит в приготовлении основных состояний каждого кубита регистра в отдельности. Однако благодаря случайным воздействиям со стороны окружения уже на стадии инициализации могут быть внесены ошибки при приготовлении основных состояний отдельных кубитов, а также всего квантового регистра.

Как уже отмечалось в разделе 2.5, вектор основного чистого квантового состояния системы кубитов $|0\rangle$ определен с точностью до общего фазового множителя с неопределенным значением фазы, представляющей собой сумму неопределенных фаз векторов состояния основных состояний отдельных кубитов. Тогда как матрица плотности чистого основного состояния диагональна и не содержит никаких неопределенных фазовых множителей.

Любое однокубитовое случайное воздействие на чистое однокубитовое состояние может быть представлено в виде унитарного преобразования следующего вида:

$$\begin{aligned}
 U &= \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2}} \begin{vmatrix} 1+i\varepsilon_z & i(\varepsilon_x - i\varepsilon_y) \\ i(\varepsilon_x + i\varepsilon_y) & 1-i\varepsilon_z \end{vmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2}} (1+i\varepsilon_x\sigma_x + i\varepsilon_y\sigma_y + i\varepsilon_z\sigma_z), \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

где случайные вещественные параметры ε_x , ε_y , ε_z характеризуют интенсивность трех возможных типов ошибок (независимые случайные функции времени).

Действуя, например, на состояние $|0\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}$, преобразование (4.6)

переводит его в следующую суперпозицию с состоянием $|1\rangle$:

$$U|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2}} \left((1+i\varepsilon_z)|0\rangle + i(\varepsilon_x+i\varepsilon_y)|1\rangle \right). \quad (4.7)$$

Матрица плотности образованного возмущенного основного состояния

$$U|0\rangle\langle 0|U^\dagger = \frac{1}{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2} \begin{vmatrix} (1+\varepsilon_z^2) & -i(1+i\varepsilon_z)(\varepsilon_x-i\varepsilon_y) \\ i(1-i\varepsilon_z)(\varepsilon_x+i\varepsilon_y) & (\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2) \end{vmatrix} \quad (4.8)$$

содержит теперь комплексные недиагональные элементы, но по-прежнему имеет только одно, равное единице собственное значение, то есть соответствует *чистому* квантовому состоянию кубита с составляющими вектора Блоха

$$P_z = 1 - \frac{2(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2)}{1 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2} = 1 - 2p, \quad P_\pm = 2 \frac{(\varepsilon_z \varepsilon_x - \varepsilon_y) \pm i(\varepsilon_x + \varepsilon_z \varepsilon_y)}{1 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2}. \quad (4.9)$$

Для *точности воспроизведения* основного состояния кубита в соответствии с (3.20) получим

$$F(0) = \langle 0|U|0\rangle\langle 0|U^\dagger|0\rangle = \frac{1}{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2} (1+\varepsilon_z^2) = 1-p, \quad (4.10)$$

где параметр p имеет смысл *вероятности ошибки воспроизведения* основного состояния $|0\rangle$ (тоже случайная величина). При $\varepsilon_z^2, \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 \ll 1$

эта вероятность $p \approx \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 \ll 1$. Нondiagonalные элементы матрицы плотности, в отличие от диагональных, имеют малую, по сравнению с единицей, амплитуду и фазовый множитель со случайной фазой $\varphi = \pm \arctg \frac{\varepsilon_x + \varepsilon_z \varepsilon_y}{\varepsilon_z \varepsilon_x - \varepsilon_y}$, которая даже при малых значениях параметров $\varepsilon_x,$

$\varepsilon_y, \varepsilon_z$ может принимать произвольные значения.

В случае, когда кубит уже находится в состоянии суперпозиции

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle = \begin{vmatrix} c_0 \\ c_1 \end{vmatrix}, \quad |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1, \quad (4.1)$$

воздействия на него оператора U приводит к следующему результату

$$\begin{aligned} U|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2}} \left(1 + i\varepsilon_x\sigma_x + i\varepsilon_y\sigma_y + i\varepsilon_z\sigma_z \right) \begin{vmatrix} c_0 \\ c_1 \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2}} \left((c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) + i\varepsilon_z(c_0|0\rangle - c_1|1\rangle) + \right. \\ &\quad \left. + i\varepsilon_x(c_0|1\rangle + c_1|0\rangle) + \varepsilon_y(-c_0|1\rangle + c_1|0\rangle) \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Видно, что слагаемые в (4.11), содержащие три вещественные случайные величины ε_z , ε_x , ε_y , описывают здесь, соответственно, интенсивность «*фазовых*» (phase flips) (изменяется на π фаза состояния $|1\rangle$), «*амплитудных*» (bit flips) (происходит обмен амплитудами состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$) и «*амплитудно-фазовых*» (both bit and phase flips, $i\sigma_y = \sigma_z\sigma_x$) (происходит обмен амплитуд состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ и изменение на π фазы состояния $|1\rangle$) *ошибок-переворотов*.

Все 2^L базисных векторов состояний квантового регистра $|n\rangle$ создаются в результате совокупности однокубитовых унитарных преобразований *iNOT* (раздел. 2.2), которые переводят основные состояния определенных кубитов $|0\rangle$ в состояния $|1\rangle$. В идеальном случае базисные состояния представляют собой полную ортогональную систему. Неидеальность однокубитовых операций за счет случайных воздействий как при образовании базисных состояний, так и при вводе информации приводит к соответствующим ошибкам.

Например, представим неидеальное однокубитовое унитарное преобразование *iNOT* в виде матрицы

$$\begin{aligned} i\text{NOT}_\varepsilon &= \frac{1}{\sqrt{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2}} \begin{vmatrix} i\varepsilon_z & i((1+\varepsilon_x) - i\varepsilon_y) \\ i((1+\varepsilon_x) + i\varepsilon_y) & -i\varepsilon_z \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2}} \left((1+\varepsilon_x)\sigma_x + i\varepsilon_y\sigma_y + i\varepsilon_z\sigma_z \right). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Преобразование вектора состояния $|0\rangle$ в вектор состояния $|1\rangle$ теперь будет выглядеть следующим образом:

$$i\text{NOT}_z|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2}} \left(\varepsilon_z|0\rangle + ((1+\varepsilon_x) + i\varepsilon_y)|1\rangle \right). \quad (4.13)$$

Точность воспроизведения конечного состояния $|1\rangle$ принимает вид

$$F(1) = \frac{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_y^2}{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2} = 1 - p. \quad (4.14)$$

Следовательно, состояние $|1\rangle$ воспроизводится с ошибкой $p \approx \varepsilon_z^2 \ll 1$, которая определяется в основном *фазовыми переворотами*, и, в отличие от основного состояния имеет теперь амплитуду порядка 1 и общий дополнительный фазовый множитель $\exp(i\varphi)$ со случайной фазой

$\varphi = \arctg \frac{\varepsilon_y}{1+\varepsilon_x}$, $|\varphi| \ll 1$. Для составляющих вектора Блоха получим:

$$P_z = -1 + \frac{2\varepsilon_z^2}{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2} = -1 + 2p,$$

$$P_{\pm} = \frac{2|\varepsilon_z| \sqrt{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_y^2}}{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2} \exp(i\varphi). \quad (4.15)$$

Таким образом, векторы возмущенных базисных состояний квантового регистра, соответствующие состояниям $|1\rangle$ у определенной части кубитов, будут содержать фазовые множители с *непрерывными случайными фазами*, которые определяются совместным вкладом фазовых и амплитудно-фазовых ошибок. Диагональные элементы матрицы плотности состояний, амплитуда которых порядка единицы, как и диагональные элементы матрицы плотности основного состояния, *не содержат никаких фазовых множителей. Их содержат только недиагональные элементы матрицы плотности*, описываемые поперечными составляющими вектора Блоха со случайной фазой.

При образовании *произвольной суперпозиции* базисных векторов состояния отдельные составляющие суперпозиции могут иметь различные общие фазовые множители с неопределенными фазами произвольной величины, несущественным является только один общий фазовый множитель.

4.2.2. Проблемы, связанные со случайными фазовыми множителями в базисных состояниях квантового регистра

Относительно возможности выполнения общих требований, необходимых для создания полномасштабного квантового компьютера (раздел 2.1), было высказано достаточно большое число скептических возражений, ответ на многие из них был дан уже в обзоре Дж. Прескилла [2.6]. Нам представляется полезным высказать здесь наше отношение к некоторым свежим скептическим высказываниям в свете рассматриваемых нами ансамблевых вариантов ЯМР квантовых компьютеров.

Ряд пессимистических утверждений был высказан позже в серии сообщений С. Кэка [2.7–2.11]. Одно из основных его утверждений состоит в том, что ошибки при приготовлении как инициализированного, так и других базисных векторов состояния квантового регистра, связанные с наличием *случайных фазовых множителей*, *нельзя полностью исправить* с помощью известного кода коррекции квантовых ошибок (Quantum Error Correction Codes, QECC) [2.12]. Причиной этого, по его мнению [2.11], является *аналоговая* природа фазовых ошибок, характеризующихся *непрерывным* набором неконтролируемых значений фаз многокубитовых состояний и распространяющихся на многие базисные состояния в гильбертовом пространстве, в то время как в существующих кодах случайные ошибки предполагаются локализованными на ограниченном числе кубитов, и кодирование логических состояний производится лишь на квантовых состояниях *ограниченного подпространства* в полном гильбертовом пространстве квантовой системы. В результате в процессе квантовых вычислений, по мнению С. Кэка, должны возникать неконтролируемые эффекты.

По поводу указанных утверждений отметим здесь следующее:

1. Инициализацию состояния, то есть перевод всех кубитов в основные булевы состояния $|0_i\rangle$ в многокубитовом твердотельном ЯМР квантовом регистре предполагается производить при *низких спиновых температурах* и *достаточно сильных магнитных полях*, обеспечивающих практически полную поляризацию ядерных спинов. *Необходимая малость* вероятности ошибки состояния всего регистра $|0\rangle$, обусловленной случайными воздействиями со стороны окружения, обеспечивается достаточно хорошей изоляцией регистра от окружения.

Общий фазовый множитель со случайной фазой при векторе основного состояния является не существенным, поскольку он выпадает из диагональных элементов матрицы плотности и не определяет значений наблюдаемых величин в этом состоянии.

2. Проблемы, отмеченные С. Кэком, существовали бы для одиночного квантового регистра, возмущенное базисное состояние которого является чистым для каждого конкретного момента времени. Такое воздействие на отдельный кубит в регистре в простейшем случае можно рассматривать как *случайный стационарный процесс*, реализуемый случайными непрерывными функциями $\epsilon_x(t)$, $\epsilon_y(t)$, $\epsilon_z(t)$, принадлежащими к некоторому статистическому ансамблю. Состояние квантового регистра следует описывать матрицей плотности, усредненной по распределению случайных функций, что соответствует усреднению (вычислению следа) полной матрицы плотности по состояниям окружающей среды. Полученная в результате матрица плотности базисного состояния будет эквивалентна приведенной матрице плотности с матричными элементами, зависящими от параметров случайного процесса (средние значения, дисперсии, функции корреляции и т.д.).

3. Однако рассмотренное выше усреднение по времени означает практически неосуществимую процедуру достаточно *длительного накопления* мгновенных результатов измерения возмущенной матрицы плотности, что делает справедливыми утверждения С. Кэка.

Выходом из этой ситуации представляется переход к достаточно *большому ансамблю идентичных квантовых регистров*, в котором случайный стационарный процесс, описывающий случайные воздействия, можно считать *эргодическим*. В этом случае приведенная матрица плотности будет определяться путем усреднения возмущенной матрицы плотности не по времени, а по ансамблю регистров в отдельный момент времени. Практически такое усреднение происходит естественным образом, когда унитарные преобразования при выполнении алгоритмов и измерение состояний кубитов в независимых регистрах-элементах ансамбля производятся одновременно одними и теми же управляющими импульсами, подобно тому как это делается в *ансамблевых жидкостных квантовых компьютерах* (предполагается, что систематические ошибки, вносимые управляющими импульсами, исключены).

4. Произвольная суперпозиция векторов базисных состояний, возникающая в процессе выполнения квантовых операций в результате случайных воздействий, представляет собой сумму с комплексными коэффициентами, называемыми *фазорами* [2.13]. Для ансамблевого варианта квантового регистра эта суперпозиция будет содержать усредненные по ансамблю фазоры, характеризующиеся определенными *усредненными значениями амплитуд и фаз*, не имеющие аналогового характера.

В результате приведенная матрица плотности будет описывать некоторый процесс *декогерентизации* квантового состояния (пример такого

усреднения см. в разделе 3.3), в результате которого произойдет затухание недиагональных элементов матрицы плотности со случайными фазами. Затухание недиагональных элементов многокубитовой матрицы в ансамбле квантовых регистров будет тем быстрее, чем большую размерность имеют недиагональные блоки в исходной матрице плотности. При этом амплитуды и фазы стационарных матричных элементов приведенной матрицы плотности, которая описывает уже не чистое, а *смешанное* состояние квантового регистра, не будут содержать *случайные величины аналогового типа*. Такое состояние не представляло бы проблем для QECC.

5. Степень смешанности ансамблевого квантового состояния будет определяться некоторой средней по ансамблю вероятностью ошибки воспроизводимости чистого состояния квантового регистра $\bar{p} \ll 1$, которую можно рассматривать как *аналог температуры* в жидкостном ЯМР квантовом компьютере. Например, благодаря этим ошибкам чистое базисное состояние отдельного кубита $|0\rangle\langle 0|$ переходит в смешанное состояние, описываемое матрицей плотности вида
$$\begin{vmatrix} 1-\bar{p} & 0 \\ 0 & \bar{p} \end{vmatrix}.$$

Таким образом, мы видим, что на этапе подготовки базисных состояний квантового регистра, *быстрая декогерентизация* в ансамблевом варианте играет *конструктивную роль*, обеспечивая выполнение *второго* основного требования (раздел 2.4).

6. Если выполнены условия хорошей изоляции кубитов от окружения, и они находятся в достаточно сильном поле, то смешанное состояние ансамблевого регистра будет соответствовать *малым значениям* \bar{p} . Для одного кубита оно может быть преобразовано к квазичистому состоянию вида

$$\begin{vmatrix} 1-\bar{p} & 0 \\ 0 & \bar{p} \end{vmatrix} = \bar{p}\mathbf{1} + (1-2\bar{p})|0\rangle\langle 0|, \quad (4.16)$$

где множитель $(1-2\bar{p})$ играет роль множителя ϵ в (4.1), имеющего теперь значение, близкое к единице. В этом случае сохраняются свойства запутанности квантовых состояний [2.5], как отмечалось выше в разделе 4.1, при любом числе кубитов. Это означает, что вычислительные процессы в таких ансамблевых многокубитовых системах будут *действительно квантовыми*, а не классической их имитацией.

Заключение: Состояния отдельного квантового регистра, благодаря воздействиям со стороны окружения, приобретают случайные *аналоговые фазовые ошибки*, наличие которых приводит к ряду проблем. *Исключение этих ошибок* в базисных состояниях квантового регистра в ансамблевых структурах может быть достигнуто в результате быстрого процесса затухания недиагональных элементов усредненной по ансамблю за счет процессов декогерентизации матрицы плотности, которая принимает вид матриц плотности *смешанного* состояния. Случайные фазовые множители со *случайными аналоговыми фазами* у составляющих суперпозиции базисных состояний в результате их усреднения по ансамблю становятся детерминированными комплексными коэффициентами.

4.3. Проблема уменьшения вычислительной ошибки для состояний квантового регистра, представляющих высшие разряды*

М. Дьяконов в своей заметке [2.14] отмечает, что базисные состояния отдельных инициализированных кубитов во входном регистре должны быть заданы с *разной точностью*, поскольку вероятность *вычислительной ошибки* для кубитов, представляющих более высокие бинарные разряды в квантовом регистре, при том же значении ошибки для отдельного физического кубита увеличивается. Так для $L-1$ -го кубита в регистре $\{|n_{L-1}, n_{L-2}, \dots, n_0\rangle$ (высший бинарный разряд числа n) она увеличится в 2^{L-1} раз по сравнению с вероятностью ошибки состояния последнего кубита в регистре (низший бинарный разряд).

Таким образом, возникает *проблема уменьшения вычислительной ошибки* при переходе от низших к высшим двоичным разрядам. М. Дьяконов не находит возможности преодоления этой трудности.

Для решения этой проблемы вместо состояний физических спиновых кубитов, соответствующих каждому двоичному разряду, можно предложить использовать состояния *логических кубитов*, два квантовых состояния которых кодируются состояниями *блоков, состоящих из исходных физических кубитов*. Размер блоков определяется из условия, при котором обеспечивается необходимое подавление ошибок состояний у логических кубитов, составляющих высшие разряды квантового регистра.

Это можно, в принципе, осуществить с помощью метода *связанных* (concatenated) кодов (см., например, книгу [2.12], гл.10), представляющих собой *иерархию* кодирующих схем с числом уровней иерархии, опреде-

ляемых положением логического кубита в регистре и значением необходимой вычислительной точности для данного разряда.

Рассмотрим здесь эту иерархию подробнее, имея в виду *усредненные по ансамблю* матрицы плотности базисных состояний регистра. *Нулевой* уровень иерархии соответствует исходному базисному состоянию, характеризующемуся одинаковой допустимой вероятностью *физической и вычислительной* ошибки воспроизведения этого состояния $p \ll 1$ (знак усреднения по ансамблю здесь опущен). При переходе к следующему *первому* уровню иерархии, если предполагать, что ошибки для базисных состояний, соответствующих разным разрядам *некоррелированы*, вероятность ошибки уменьшается до cp^2 , где c — некоторая постоянная, значение которой определяется конкретной схемой кодирования на первом уровне иерархии. Воспользуемся для этой постоянной оценкой, сделанной для изученных схем квантовых кодов коррекции ошибок, а именно, $c \sim 10^5 - 10^6$ ([2.12], гл.10). На *втором* уровне иерархии вероятность ошибки уменьшается до $c(cp^2)^2 = (c^2p^2)^2/c$. Если *связывание* производится k раз, то на k -ом уровне иерархии уменьшение вероятности ошибки составит уже $(cp)^{2^k} / c$.

Потребуем теперь, чтобы это значение было меньше необходимого уменьшения вероятности вычислительной ошибки для состояния $L-1$ -го логического кубита, то есть в $2^{(L-1)}$ раз меньше вероятности ошибки, которая бы была в отсутствие рассматриваемого кодирования, а именно, запишем

$$(cp)^{2^k} / c < p 2^{-(L-1)} \quad \text{или} \quad (cp)^{2^k - 1} < (1/2)^{(L-1)}, \quad (4.17)$$

откуда следует, что необходимо, чтобы выполнялось условие $cp < 1$, и, следовательно, предельное значение допустимой ошибки для состояния с одним «перевёрнутым» исходным кубитом должно составлять $p < 10^{-5}$ (сравни с *третьим* основным требованием в разделе 2.4).

Число связываний для L -го логического кубита k будет определяться теперь из:

$$k > \log_2 \left(\frac{L-1}{\log_2(1/cp)} + 1 \right) \sim \log_2(L-1). \quad (4.18)$$

Пусть теперь каждому разряду соответствует базисное состояние не с одним кубитом, а с логическим кубитом, закодированного соответствующим образом на первом уровне с помощью d физических кубитов. При этом число исходных физических кубитов на последнем k -ом уровне

иерархии составит

$$\sum_{i=1}^k d^i \approx d^k = \left(\frac{L-1}{\log_2(1/cp)} + 1 \right)^{\log_2 d} \sim (L-1)^{\log_2 d}, \quad (4.19)$$

то есть оно *полиномиально* зависит от L . Так, например, для числа логических кубитов $L = 129$, согласно (4.18), получим иерархию связывающих кодов с $k > 7$, а при $d = 3$ полное число физических кубитов может достигать тысяч.

Заключение: Необходимого уменьшения вероятности *вычислительной ошибки* для кубитов, представляющих более высокие бинарные разряды в квантовом регистре, можно добиться, в принципе, путем использования связывающего кодирования состояний различных двоичных разрядов на иерархии логических кубитов. При этом оказывается, что число физических кубитов на последнем уровне иерархии *полиномиально* растет с числом разрядов L .

4.4. Некоторые проблемы, связанные с вычислительными операциями и измерениями состояний кубитов*

М. Дьяконов утверждает, что *осуществление унитарной вычислительной операции* в системе из $L \sim 10^3$ спинов с точностью $\sim 10^{-5}$ *невозможно*, и, в частности, невозможен контролируемый поворот отдельного спина-кубита, направленного первоначально вдоль оси z (состояние $|0\rangle$), в фиксированное направление плоскости xy из-за «быстрой прецессии его вокруг направления поля» [2.14].

На самом деле такой поворот i -го ядерного спина-кубита (точнее *вектора Блоха*) осуществляется в ЯМР с помощью резонансного для рассматриваемого спина радиочастотного $\pi/2$ импульса круговой поляризации. Это соответствует образованию в лабораторной системе координат суперпозиции его состояний типа

$$|\psi\rangle = \sqrt{1/2} (|0\rangle + \exp(-i\omega_0 t)|1\rangle) \exp(i\varphi_{0i}),$$

где $\omega_0 = \gamma V$ — резонансная частота и φ_{0i} — незначительная общая фаза состояний кубитов. При достаточно точной настройке резонансная частота *вполне контролируема* и в случае использования *ансамблевого подхода* она имеет определенное одно и то же значение для всех эквивалентных кубитов в ансамбле. Важно здесь и другое: матричные элементы матрицы плотности для суперпозиции базисных состояний, как уже от-

мечалось ранее в разделах 1.1 и 2.1, *вообще не содержат общего фазового множителя*:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = 1/2 \begin{vmatrix} 1 & \exp(i\omega_0 t) \\ \exp(-i\omega_0 t) & 1 \end{vmatrix}, \quad (4.20)$$

а фазовый множитель такой наблюдаемой величины, как среднее значение оператора σ_- в этом состоянии $P_- = \text{Sp}(|\psi\rangle\langle\psi| \sigma_-) = 1/2 \exp(i\omega_0 t)$ вполне определен. Вектор Блоха во вращающейся с резонансной частотой системе координат занимает вполне определенное положение в плоскости xy ($P_- = 1/2$), и наличие быстрой прецессии вектора состояний *не приводит к неконтролируемому разбросу направлений вектора Блоха* в этой плоскости. Эксперименты на жидкостных ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров это наглядно подтверждают.

К наиболее фундаментальным трудностям М. Дьяконов относит роль *разности временных зависимостей фаз* векторов состояний физических спинов-кубитов $|0_i\rangle$ и $|1_i\rangle$, которые определяются разностью их энергий $\pm\omega_{0i}/2$. В качестве примера рассматривается одно из базисных состояний регистра, в котором отдельные кубиты имеют одну и ту же резонансную частоту $\omega_{0i} = \omega_0$. Вектор состояния регистра $|0_1, 0_2, 1_3, 0_4, \dots, 1_L\rangle$, у которого l кубитов находится в состоянии $|1_i\rangle$, будет иметь дополнительный общий фазовый множитель $\exp(il\omega_0 t)$ относительно фазового множителя, соответствующего состояниям $|0_i\rangle$.

В результате *разные с вычислительной точки зрения* базисные состояния, такие как $|1_1, 0_2, 1_3, 0_4, \dots, 1_L\rangle$ и $|0_1, 1_2, 1_3, 0_4, \dots, 1_L\rangle$, с одним и тем же числом l , будут иметь одну и ту же общую фазу и в этом смысле *с физической точки зрения оказываются одинаковыми*.

Произвольная суперпозиция из состояний с разным числом l будет иметь, по утверждению М. Дьяконова, набор фазовых множителей с $1 \leq l \leq L$, и из-за неконтролируемости их фаз зависимость от времени состояния будет носить случайный характер. Из этого делается вывод о невозможности сохранить когерентность такого состояния в момент выполнения вычислительных операций.

На самом деле, с точки зрения выполняемых квантовых операций, базисные состояния отдельных кубитов и всего регистра, в том числе и приведенные выше, правильнее описывать *не векторами состояния*, а матрицами плотности, поскольку, в конечном счете, именно с помощью матриц плотности определяются наблюдаемые величины. Для всех чистых базисных состояний в вычислительном базисе они имеют только *одно, равное единице, вещественное* собственное значение и не содержат

вообще никаких фазовых множителей. Для отдельного кубита базисным состояниям соответствуют направленные по и против векторы Блоха, которые не прецессируют и не имеют фазового множителя.

Фазовые множители могут появиться в определенных состояниях у недиагональных элементов матрицы плотности, описывающих образование когерентных суперпозиций базисных состояний в процессе выполнения унитарных преобразований. Они, как уже отмечалось, вполне контролируются управляющими импульсами. Разрушение таких когерентных состояний будет происходить за счет общих процессов декогерентизации, которые в принципе могут быть подавлены до необходимого уровня. Случайные воздействия со стороны окружения приводят к появлению случайных фазовых множителей, которые, однако, в ансамбле квантовых регистров в результате усреднения по ансамблю становятся детерминированными и контролируруемыми.

При выполнении вычислительных операций существенное значение имеет избирательное обращение к отдельным кубитам регистра, которые для этого должны иметь либо *отличающиеся резонансные частоты* в резонансных и нерезонансных состояниях $|1_i\rangle$, либо они должны быть *пространственно разделены* для того, чтобы резонансный импульс мог воздействовать селективно только на вполне определенный спин. В этом смысле состояния регистра $|1_1, 0_2, 1_3, 0_4 \dots 1_L\rangle$ и $|0_1, 1_2, 1_3, 0_4 \dots 1_L\rangle$ различны не только с вычислительной, но и с физической точки зрения.

Конечно, резонансные переходы для одного спина могут вызывать также и *нерезонансные переходы* в регистре у спинов с другой резонансной частотой и генерировать в регистре *нежелательные* осциллирующие состояния кубитов. Однако вклад их при определенных условиях можно минимизировать выбором параметров импульсов [2.15].

Наконец, М. Дьяконов считает *непреодолимой задачей одновременного измерения* состояний большого числа ($L > 10^3$) спинов и каждого с точностью $\sim 10^5$.

На самом деле, такая *предельная точность* выполнения логической операции на один кубит и один вентиль *необходима только для обеспечения помехозащищенности вычислительного процесса (четвертое* основное требование). Для этого вычислительные процессы осуществляются с использованием квантовых кодов QECC, при этом *не требуется прибегать к измерениям всех состояний* кубитов ([2.12], гл.10).

Измерение же состояний логических кубитов необходимо производить лишь *на выходе компьютера*, где требования к точности гораздо ниже.

Состояние квантового регистра на выходе представляется суперпозицией базисных состояний, подобной суперпозиции на входе, но уже с другими коэффициентами c'_i . Измерение состояния квантового регистра сводится к измерению, как и в классическом компьютере, 2^L величин $|c'_i|^2$, то есть диагональных элементов матрицы плотности в вычислительном базисе. Считывание результата вычисления (*пятое* основное требование) производится путем измерения состояний отдельного диагонального элемента каждой из L -кубитовых приведенных матриц плотности выходного регистра, а *не одновременно* всех 2^L коэффициентов суперпозиции полной матрицы плотности $|\Psi_L\rangle\langle\Psi_L|$, то есть так же, как и на выходе классического цифрового компьютера. Более существенным здесь представляется вопрос о том, как произвести это измерение в каждом конкретном случае. Здесь большое значение может иметь использование ансамблевых методов как для управления кубитами, так и для измерения их состояний на выходе.

М. Дьяконов обсуждает также вопрос о том, где осуществляется переход от квантового к классическому компьютеру. Нам представляется, что решение вопроса, где граница между квантовым и классическим компьютером определяется ролью, которую играют свойства *суперпозиции* и *запутанности* квантовых состояний, *квантовый параллелизм* и *квантовый характер динамики кубитов* в эффективной производительности квантовых операций. В классическом пределе их роль в системах из двухуровневых элементов несущественна, кубиты становятся обычными битами, а компьютер классическим цифровым.

Заключение: Трудности, отмеченные М. Дьяконовым в его заметке, представляются, на наш взгляд, вполне преодолимыми. Так, в частности, в результате выполнения унитарных вычислительных операций в многокубитовых квантовых компьютерах с избирательным обращением к кубитам не возникает *неконтролируемых* быстро осциллирующих фаз, связанных с разной временной зависимостью фаз базисных векторов состояний. Необходимость *измерения состояний всех кубитов* регистра в процессе выполнения квантовых логических операций с *предельно высокой точностью* не возникает.

Важнейшими с точки зрения основных требований остаются проблемы подавления процессов декогерентизации квантовых состояний, исправления случайных ошибок, организации помехоустойчивых квантовых вычислений, а также проблема измерения конечного квантового состояния. Их решение для ЯМР квантовых компьютеров может быть существенно *облегчено при использовании ансамблевого подхода*.

5. Многокубитовые твердотельные ЯМР квантовые компьютеры

5.1. Кремниевый многокубитовый ЯМР квантовый компьютер по схеме Кейна и проблемы его реализации

Радикально новый вариант твердотельного ЯМР квантового компьютера с *индивидуальным обращением к отдельным кубитам*, который допускает *произвольное число кубитов L* в квантовом регистре, был предложен австралийским физиком Б. Кейном в 1998 году [2.16]. Интенсивные теоретические и экспериментальные исследования возможности создания различных вариантов кремниевых квантовых компьютеров развернуты в настоящее время в специально созданном для этих целей Австралийском центре технологии квантовых компьютеров [2.17–2.19].

Согласно предложенной Кейном схеме, в *приповерхностный слой* МОП-структуры, образованной на изотопно-чистом кремнии ^{28}Si , на глубину порядка $c \sim 10$ нм внедряются донорные атомы стабильного изотопа ^{31}P с ядерным спином $I = 1/2$ в виде регулярной цепочки на расстоянии друг от друга $l_x \sim 20$ нм, образуя своего рода линейную «искусственную молекулу», с произвольным числом ядерных спинов-кубитов (рис. 2.1).

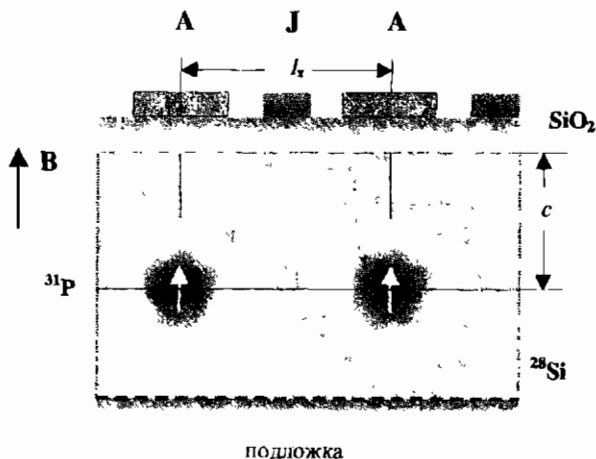


Рис. 2.1. Схематическое изображение двух ячеек полупроводниковой структуры в модели Кейна с ядерными спинами-кубитами донорных атомов ^{31}P .

При температурах $T < 0,1$ К донорные атомы не ионизированы и находятся в основном орбитальном S-состоянии, а электронные спины в полях порядка нескольких тесла практически полностью поляризованы. Гамильтониан спиновой системы отдельного донора ^{31}P имеет вид:

$$\mathbf{H} = \omega_S \mathbf{S}_z \otimes \mathbf{1} - \omega_I \mathbf{1} \otimes \mathbf{I}_z + \mathbf{A} \mathbf{I} \mathbf{S}, \quad (5.1)$$

где $A/2\pi = 117,53$ МГц [2.20] — постоянная сверхтонкого взаимодействия, $\omega_I = \gamma_I B$, $\omega_S = \gamma_S B$, $\gamma_I/2\pi = 17,2$ МГц/Тл, $\gamma_S/2\pi = 28,1$ ГГц/Тл — гиромагнитные отношения ядерного спина ^{31}P и спина электрона,

$$\zeta = \frac{\gamma_I}{\gamma_I + \gamma_S} = 0,382 \cdot 10^{-3}.$$

Собственные значения гамильтониана (5.1) описываются формулой Брейта-Раби, которую запишем в виде (рис. 2.2а):

$$E(F, M_F, X) = -A \left\{ \frac{1}{4} + \zeta X M_F + (-1)^F \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(1 + M_F X) \sqrt{1 + 2M_F X + X^2} \right\} \quad (5.2)$$

или

$$E(F, 0, X) = -A \left\{ \frac{1}{4} + (-1)^F \frac{1}{2} \sqrt{1 + X^2} \right\}, \quad E(1, \pm 1, X) = A \left\{ \frac{1}{4} \mp (\zeta - \frac{1}{2}) X \right\}, \quad (5.3)$$

где

$$X = (\omega_I + \omega_S)/A \approx \omega_S/A, \quad (5.4)$$

$F = I \pm 1/2 = 0, 1$, $M_F = M + m$, $M_0 = 0$, $M_I = \pm 1, 0$, $M, m = \pm 1/2$ — проекции электронных и ядерных спинов на ось z.

Частоты $\omega_B, \omega_S, \omega_D, \omega_C = \omega_D - \omega_A^-$ (СВЧ диапазон в полях порядка нескольких тесла) соответствуют в основном электронным переходам, радиочастоты ω_A^\pm — в основном ядерным переходам.

При температурах $T < 0,1$ К и при $X \approx \gamma_S B/A \gg 1$ заселенными являются только два низших энергетических уровня, между которыми происходят резонансные переходы на частоте

$$\omega_A^+ = E(1, -1) - E(0, 0) \approx A/2 + (\omega_I - \omega_S)/2 + (A/2) \sqrt{1 + X^2} \approx A/2 + \omega_I + \frac{A^2}{4\omega_S}. \quad (5.5)$$

При B-3 Тл резонансная частота составляет $\omega_A^+/2\pi \sim 100$ МГц.

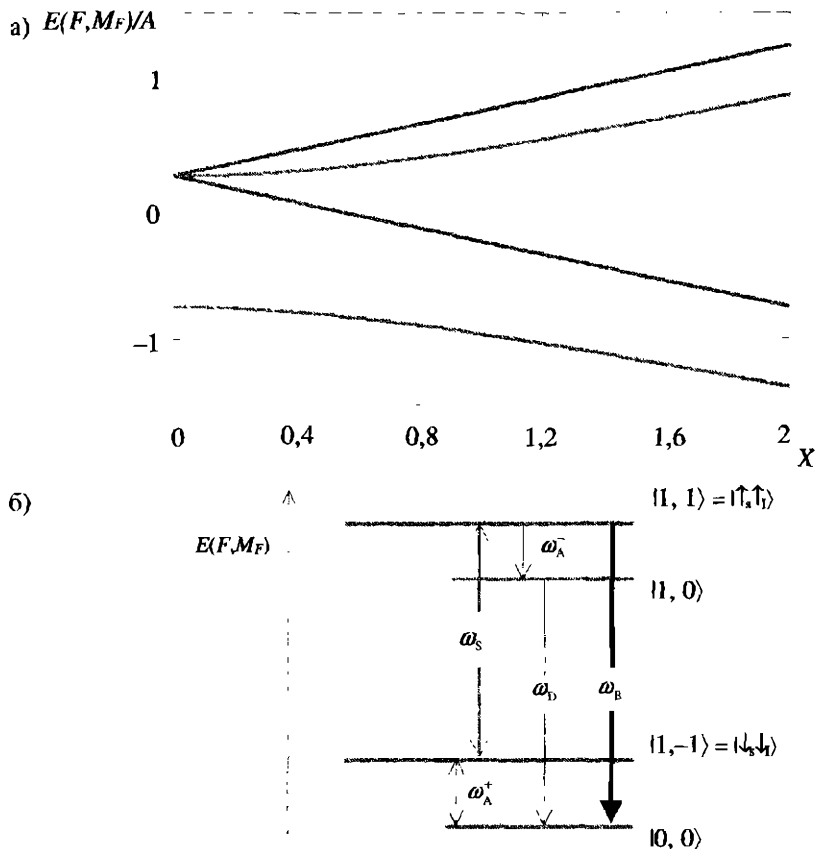


Рис. 2.2 а) Энергетический спектр электрон-ядерной системы донорного атома ^{31}P (5.2). б) Схема энергетических уровней донорного атома и обозначение состояний. Переходы на частоте ω_s в первом приближении запрещены.

Состояния

$$|1, 0\rangle = \sqrt{1-\alpha} |\uparrow_s \downarrow_I\rangle + \sqrt{\alpha} |\downarrow_s \uparrow_I\rangle, |0, 0\rangle = \sqrt{\alpha} |\uparrow_s \downarrow_I\rangle - \sqrt{1-\alpha} |\downarrow_s \uparrow_I\rangle, \quad (5.6)$$

где

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{X}{\sqrt{1+X^2}} \right), \quad (5.7)$$

являются частично запутанными электрон-ядерными спиновыми состояниями со значением согласованности, которая для основного запутанного состояния $|0, 0\rangle$ в сильных полях ($X \gg 1$) составляет $C \approx 2 \sqrt{\alpha(1-\alpha)} \approx 2\sqrt{\alpha} \approx 1/X \ll 1$. В слабых полях $\alpha \approx 1/2$ состояния $|1, 0\rangle$ и $|0, 0\rangle$ близки к максимально запутанным *триплетному и синглетному* электрон-ядерным спиновым состояниям ЭПР с $C = 1$.

Настройку резонансных частот отдельных спинов в схеме Кейна предполагается осуществлять *индивидуально* путем воздействия на ядерные спины через сверхтонкое взаимодействие, изменяя *электрический потенциал* на затворах А.

Другой характерной чертой схемы Кейна является использование затворов **J**, с помощью которых предполагается изменять степень перекрытия электронных плотностей соседних доноров и тем самым *включать или выключать косвенное взаимодействие между ядерными спинами-кубитами*, участвующими в двухкубитовых операциях. Затворы А и **J** отделены от поверхности кремния слоем окисла, создающим барьер для предотвращения проникновения донорного электрона в затвор (рис. 2.1). Длина затворов А $\sim a$.

Для выполнения унитарных операций над кубитами предполагается использовать стандартную импульсную технику ЯМР, для измерения состояний отдельных кубитов высокочувствительные методы, в частности, основанные на использовании *одноэлектронных транзисторов* [2.21].

Наличие *технологических погрешностей и заряженных примесей* является причиной нежелательного случайного разброса значений постоянной сверхтонкой структуры и искажений симметричной зависимости ее от потенциала затвора для разных кубитов, что приводит, соответственно, к случайному *разбросу значений резонансных частот*. Поэтому точная настройка постоянной сверхтонкого взаимодействия представляет собой важную, но и достаточно *трудную проблему*.

Взаимодействие ядерных спинов доноров со случайно распределенными парамагнитными центрами (атомами и дефектами) окружения также приводит к случайному разбросу значений резонансных частот различных кубитов и процессам декогерентизации состояний квантового регистра. Поэтому сам кремний и окисел кремния должны быть *достаточно хорошо очищены* как от заряженных, так и от парамагнитных примесей и атомов изотопа ^{29}Si , обладающего ядерным спином $I = 1/2$,

который содержится в естественном кремнии в количестве 4,7%. Эти вопросы рассматриваются более детально в подразделе 5.4.5.

Помимо кремния в рассматриваемой схеме могут быть использованы при должной очистке и другие бесспиновые полупроводниковые материалы и структуры, например, Ge, Si/Si_{1-x}Ge_x и SiC.

Основные преимущества схемы Кейна с индивидуальным обращением к кубитам заключаются в следующем:

1. В кремниевом ЯМР квантовом компьютере по схеме Кейна используется *один тип атомов* с ядерными спинами (гомоядерная система), которые сами по себе являются кубитами, а их число L , в отличие от жидкостных прототипов, может быть *произвольно большим*.

2. При температурах менее 1 К в полях порядка нескольких тесла ядерные спины имеют *очень большие времена* (часы и дни) продольной релаксации [2.22], что обеспечивает достаточно длительную метастабильность исходных базисных состояний квантового регистра.

3. При реализации такого квантового компьютера могут быть использованы достижения современной кремниевой нанотехнологии.

Заключение: При несомненных преимуществах схемы Кейна она обладает *определенными трудностями*. Они состоят в следующем:

1. Для инициализации состояний кубитов потребуются либо *очень низкие температуры ядерных спинов* (< 1 мК), либо специальные методы динамической поляризации ядерных спинов.

2. Сигнал, несущий информацию о состоянии отдельного ядерного спина индивидуального атома фосфора очень мал и требует разработки *исключительно высокочувствительных односпиновых методов измерения*.

3. Необходимо исключить влияние *случайных фазовых множителей* при подготовке базисных состояний квантового регистра и формировании суперпозиций базисных состояний.

4. Требуется *высокая точность* регулярного расположения донорных атомов и большого числа затворов в нанометровом масштабе.

5. Необходимо исключить влияние процесса декогерентизации квантовых состояний кубитов, определяемого шумовыми *флуктуациями напряжений на затворах А*.

6. Определенные трудности представляет *точная настройка резонансных частот* отдельных кубитов и, в особенности, *точный контроль* взаимодействия между соседними кубитами с помощью электрического потенциала на затворах **J** (см. ниже подраздел 5.2.3).

5.2. Дальнейшее развитие схемы Кейна кремниевых ЯМР квантовых компьютеров

Первоначальная схема Кейна получила дальнейшее развитие и стала основой для ряда новых предложений по реализации полномасштабных ЯМР квантовых компьютеров. В них рассматривались различные варианты преодоления отмеченных выше трудностей. Это, прежде всего, работа самого Кейна [2.23]. Ряд результатов был получен также [2.24–2.28].

5.2.1. Эффект усиления сигнала ЯМР

Интенсивность ЯМР сигнала и скорость выполнения квантовых операций определяются резонансным значением *частоты Раби* [2.29]. В рассматриваемом случае она в свою очередь определяется амплитудой матричного элемента гамильтониана взаимодействия электрон-ядерной спиновой системы с внешним радиочастотным полем $b_x(t) = 2bcos(\omega_\lambda^+ t)$, где b — амплитуда поляризованной по кругу составляющей радиочастотного поля (обычно ~ 1 мТл), вызывающего резонансные переходы между двумя нижними состояниями:

$$\mathbf{H}_{rf}(t) = (\gamma_S S_x - \gamma_I I_x) b_x(t) = \mathbf{H}_{rf} \cos(\omega_\lambda^+ t). \quad (5.8)$$

Резонансная частота Раби находится из выражения [2.28]

$$\Omega = \gamma_I b_{\text{eff}}(X) = 2|\langle 0,0 | \mathbf{H}_{rf} | 1,-1 \rangle| = (\sqrt{\alpha} \gamma_S + \sqrt{1-\alpha} \gamma_I) b, \quad (5.9)$$

из которого следует, что частота Раби имеет максимальное значение при $\alpha = 1/2$ ($X = 0$), далее с ростом X она монотонно уменьшается до значения, соответствующего отдельному ядерному спину при $\alpha = 0$. Поэтому с точки зрения скорости выполнения квантовых операций предпочтительнее работать в относительно слабых внешних полях, при которых $\gamma_S/\gamma_I > X \approx \omega_S/A \gg 1$ или $3,5 \text{ Тл} > B \gg 3,9 \cdot 10^{-3} \text{ Тл}$. В этом случае

$$b_{\text{eff}}(X) = (1 + \eta) b, \quad (5.10)$$

где $\eta = A/(2\omega_I) \gg 1$ — коэффициент усиления сигнала ЯМР в парамагнитных образцах, обусловленный воздействием радиочастотного поля на ядерные спины преимущественно через поперечную составляющую электронной поляризации. Например, для магнитных полей $B = 1 \text{ Тл}$ мы имеем $b_{\text{eff}} = 4,4b$, а при $B = 0,01 \text{ Тл}$ — значение $b_{\text{eff}} = 338b$. На существование эффекта усиления в парамагнитных образцах впервые было указано в работе К. А. Валиева [2.30].

Для описания динамики рассматриваемой двухуровневой системы с равновесной поляризацией ядерных спинов P_{z0} мы можем воспользоваться формально уравнением типа уравнения Блоха [2.28]:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} + \frac{P_x \mathbf{i} + P_y \mathbf{j}}{T_{\perp}} + \frac{(P_z - P_0) \mathbf{k}}{T_{\parallel}} = \gamma_1 (\mathbf{P} \times \mathbf{V}_{\text{eff}}(t)), \quad (5.11)$$

где роль внешнего магнитного поля, включающего и радиочастотное поле, играет эффективное магнитное поле, учитывающее эффект усиления, $\mathbf{V}_{\text{eff}}(t) = (\omega_A^+ / \gamma_1) \mathbf{k} + 2b_{\text{eff}} \cos(\omega_A^+ t) \mathbf{i}$.

Из анализа этого уравнения, подобного анализу решения стандартного уравнения Блоха [2.29], следует, что сигнал ЯМР *не может быть увеличен* за счет эффекта усиления сверх максимального значения, соответствующего значению $P_{y \text{ max}} = \sqrt{T_{\perp} / T_{\parallel}} P_0 / 2$. В условиях резонанса оно достигается при $b_{\text{eff}} = 1 / \gamma_1 \sqrt{T_{\perp} T_{\parallel}}$.

С другой стороны, отсюда следует вывод о том, что за счет эффекта усиления максимальное значение сигнала ЯМР будет соответствовать **меньшим мощностям** радиочастотного поля, чем в отсутствие этого эффекта. Это может позволить снизить влияние этих полей на управляющие полупроводниковые устройства. Кроме того, эффект усиления, благодаря увеличению частоты Раби, при тех же мощностях радиочастотных импульсов позволяет *уменьшить длительность импульсов*, используемых для выполнения квантовых операций и, как уже отмечалось, тем самым увеличить скорость выполнения (тактовую частоту) этих операций.

При более точном рассмотрении эффекта усиления в твердотельном случае вместо уравнения (5.11) следует использовать обобщенное уравнение Блоха, учитывающее процессы последействия (см. раздел 1.3):

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}}{dt} + \int_0^t f(\tau) \exp(i\omega_0 \tau) (P_x(t-\tau) \mathbf{i} + P_y(t-\tau) \mathbf{j}) d\tau + \frac{(P_z - P_0) \mathbf{k}}{T_{\parallel}} = \\ = [\mathbf{P} \times (\omega_0 \mathbf{k} + 2b_{\text{eff}} \cos(\omega \tau) \mathbf{i})]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Переходя во *вращающуюся с частотой ω_0* систему координат и пренебрегая противоположно вращающейся компонентой линейно поляризованного радиочастотного поля для изображения Лалласа

$$\mathbf{P}(p) - P_0 \mathbf{k} / p = \int_0^{\infty} (\mathbf{P}(t) - P_0 \mathbf{k}) \exp(-pt) dt \quad (5.13)$$

с равновесным значением вектора Блоха в начальный момент $P(t=0) = P_0 \mathbf{k}$, получим систему уравнений

$$\begin{aligned}(p + F(p))P_x + (\omega - \omega_0)P_y &= 0, \\ (p + F(p))P_y - (\omega - \omega_0)P_x - \gamma_1 b_{\text{eff}} P_z &= 0, \\ (p + 1/T_{\parallel})P_z + \gamma_1 b_{\text{eff}} P_y &= P_0/pT_{\parallel} + P_0,\end{aligned}\quad (5.14)$$

где $F(p) = \int_0^t f(t) \exp(-pt) dt$.

Откуда, в частности, следует

$$P_y(p) = \frac{-\gamma_1 b_{\text{eff}} (p + F(p))}{\Delta(p)} P_0 (1/pT_{\parallel} + 1), \quad (5.15)$$

где

$$\Delta(p) = (p + F(p))[(p + F(p))(p + 1/T_{\parallel}) + (\gamma_1 b_{\text{eff}})^2] + (\omega - \omega_0)^2 (p + 1/T_{\parallel}). \quad (5.16)$$

В условиях резонанса $\omega = \omega_0$ будем иметь

$$P_y(p) = \frac{\gamma_1 b_{\text{eff}} P_0 (1/pT_{\parallel} + 1)}{(p + F(p))(p + 1/T_{\parallel}) + (\gamma_1 b_{\text{eff}})^2}. \quad (5.17)$$

Перейдем теперь от изображения к оригиналу

$$\begin{aligned}P_y(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} \exp(pt) P_y(p) dp \\ P_y(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} \frac{\gamma_1 b_{\text{eff}} P_0 (1/pT_{\parallel} + 1) \exp(pt)}{(p + F(p))(p + 1/T_{\parallel}) + (\gamma_1 b_{\text{eff}})^2} dp.\end{aligned}\quad (5.18)$$

Стационарное значение этого интеграла определяется выражением [2.31]:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_y(t) = \lim_{p \rightarrow 0} p P_y(p) = \frac{\gamma_1 b_{\text{eff}} P_0 / T_{\parallel}}{F(0) / T_{\parallel} + (\gamma_1 b_{\text{eff}})^2}, \quad (5.19)$$

максимальное значение которого достигается при

$$(\gamma_1 b_{\text{eff}}) = \sqrt{F(0)} / T_{\parallel}. \quad (5.20)$$

Функция памяти в виде $f(t) = \langle \Delta \omega^2 \rangle \exp(-t/\tau_C)$ имеет изображение $F(p) = \langle \Delta \omega^2 \rangle / (p + 1/\tau_C)$. Для максимального стационарного значения получим

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{y \text{ max}}(t) = \frac{P_0}{2} \frac{1}{\sqrt{\langle \Delta \omega^2 \rangle \tau_C T_{\parallel}}}. \quad (5.21)$$

Реально оно достигается при $t > \max(T_{\parallel}, \tau_C, (\langle \Delta \omega^2 \rangle \tau_C)^{-1})$.

В случае T_{\parallel} и $\tau_C \gg t > \langle \Delta \omega^2 \rangle^{-1/2}$ можно пренебречь процессами продольной релаксации и затуханием функции памяти (флуктуации случайных полей затухают медленно). Под интегралом в выражении (5.17) тогда следует произвести замену $p + F(p) \approx p + \langle \Delta \omega^2 \rangle / p$ и $p + 1/T_{\parallel} \approx p$. В результате получим, что максимальное стационарное значение

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{y \text{ max}}(t) = \frac{P_0}{2} \frac{1}{\sqrt{\langle \Delta \omega^2 \rangle T_{\parallel}^2}} \quad (5.22)$$

будет достигаться при $(\gamma_1 b_{\text{eff}})^2 = \langle \Delta \omega^2 \rangle$.

В обоих случаях мы получаем выражение типа $P_{y \text{ max}} = \sqrt{T_{\perp} / T_{\parallel}} P_0 / 2$ с той лишь разностью, что роль T_{\perp} играют, соответственно, $(\langle \Delta \omega^2 \rangle \tau_C)^{-1}$ и $(\langle \Delta \omega^2 \rangle)^{-1/2}$, то есть те параметры, которые характеризуют эффективное время поперечной релаксации в случаях быстро и медленно флуктуирующей решетки.

5.2.2. Энергетический спектр электронно-ядерной спиновой системы двух доноров

Структура энергетического спектра электрон-ядерной системы *двух соседних донорных атомов а и б* имеет существенное значение для организации двухкубитовых операций в схеме Кейна. Эту структуру рассмотрим здесь более детально, принимая для простоты одинаковыми постоянные сверхтонкого взаимодействия атомов.

Гамильтониан такой системы запишем в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \gamma_S \mathbf{B} (S_a + S_b) + J(S_a S_b) + \Delta \hat{H}, \\ \Delta \hat{H} &= \hat{H}_a + \hat{H}_b = -\gamma_I \mathbf{B} (I_a + I_b) + A(I_a S_a + I_b S_b), \end{aligned} \quad (5.23)$$

где спиновые операторы в матричной форме имеют вид

$$S_a \equiv (1 \otimes S_a) \otimes \hat{1}, S_b \equiv \hat{1} \otimes (1 \otimes S_b), I_a \equiv (I_a \otimes 1) \otimes \hat{1}, I_b \equiv \hat{1} \otimes (I_b \otimes 1), \quad (5.24)$$

$\hat{1}$ — единичная матрица 4×4 , 1 — единичная матрица 2×2 , $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$.

Опуская пока сверхтонкое взаимодействие с ядерными спинами, которое в рассматриваемых внешних полях является малым возмущением, для собственных значений гамильтониана в нулевом приближении получим выражение

$$E_0(S, M) = \omega_S M + J [S(S+1)/2 - 3/4]. \quad (5.25)$$

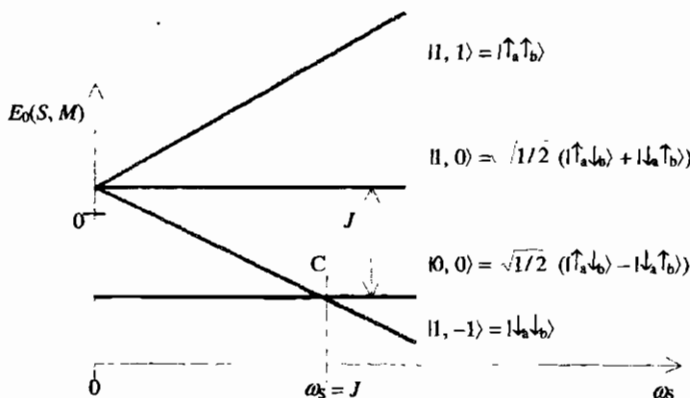


Рис. 2.3. Уровни энергии двух взаимодействующих электронных спинов.

Оно описывает три триплетных ($S=0, M=\pm 1, 0$) и один синглетный ($S=0, M=0$) электронные спиновые уровни энергии, подобно рассмотренному ранее случаю (выражению (2.22), рис. 1.6), но с обратным расположением триплетных уровней (рис. 2.3).

Четырехкратное вырождение каждого из электронных состояний снимается при включении взаимодействия с ядерными спинами, образуя сверхтонкую структуру.

Из симметрии гамильтониана (5.23) относительно перестановки доноров **a** и **b** следует, что его собственные состояния распадаются на две группы: *симметричные*, принадлежащие ядерному и электронному спиновым триплетам или синглетам ($I+S=0, 2$), и *антисимметричные* состояния, принадлежащие ядерному триплету и электронному синглету или наоборот ($I+S=1$).

Заметим, кроме того, что поскольку коммутатор z -составляющей полного спина, коммутирует с гамильтонианом

$$\hat{H} [S_{za} + S_{zb} + I_{za} + I_{zb}, \hat{H}] = 0,$$

то суммарная проекция ядерных и электронных спинов на направление магнитного поля $m_a + m_b + M_a + M_b = m + M$ ($m = m_a + m_b$, $M = M_a + M_b$) является сохраняющейся величиной. Поэтому матрица 16×16 , представляющая гамильтониан (5.23), распадается на *пять неприводимых матриц*, соответствующих состояниям со значениями $m + M = 0, \pm 1, \pm 2$. Пример полной картины сверхтонкого расщепления для неодинаковых постоянных сверхтонкого взаимодействия, полученной диагонализацией матрицы 16×16 , приведен в [2.26-2.27].

Сверхтонкая структура энергетического спектра «двухатомной молекулы» вблизи *точки пересечения* C (рис. 2.3) невозмущенных синглетного и триплетного уровня при $\omega_S = J$ играет в модели Кейна *важную роль*. В области пересечения двух уровней слабое возмущение, каким является сверхтонкое взаимодействие, приводит к *раздвижке (антипересечению) пересекающихся уровней*, имеющих одинаковую симметрию [2.32]. Для этой области возможен простой анализ [2.2].

В точке пересечения C встречаются только *три из четырех* состояний неприводимой совокупности $|S, M; I, m\rangle$ с $m + M = -1$: $|1, -1; 1, 0\rangle$, $|1, -1; 0, 0\rangle$ и $|0, 0; 1, -1\rangle$ и *три из шести* состояний неприводимой совокупности с $m + M = 0$: $|0, 0; 0, 0\rangle$, $|0, 0; 1, 0\rangle$ и $|1, -1; 1, 1\rangle$. Оставшиеся состояния из этих совокупностей относятся к вышележащим электронным спиновым состояниям, при $\omega_S \gg A$ они не играют существенной роли и могут не учитываться.

Для антисимметричных пар состояний $|1, -1; 0, 0\rangle$; $|0, 0; 1, -1\rangle$ и симметричных состояний $|0, 0; 0, 0\rangle$, $|1, -1; 1, 1\rangle$ в точке C возникают *антипересечения* энергетических уровней. Симметричное $|1, -1; 1, 0\rangle$ и антисимметричное $|0, 0; 1, 0\rangle$ состояния пересекаются со всеми остальными состояниями без образования антипересечения, их возмущение происходит за счет вклада вышележащих состояний соответствующих неприводимых совокупностей и в области пересечения приводит лишь к некоторому сдвигу уровней.

Рассмотрим далее отдельно два случая:

а) Из неприводимой совокупности с $m + M = -1$ в качестве базисных выберем *три* состояния электрон-ядерной системы $|S, M; I, m\rangle$: с *двумя триплетными* $|1, -1; 0, 0\rangle, |1, -1; 1, 0\rangle$ и *одним синглетным* $|0, 0; 1, -1\rangle$ электронными состояниями.

Гамильтониан (5.23) в представлении этих трех состояний принимает следующий вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} J/4 - \omega_S & 0 & 2^{-3/2} A \\ 0 & J/4 - \omega_S & 2^{-3/2} A \\ 2^{-3/2} A & 2^{-3/2} A & \omega_A - 3J/4 \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$

В этом приближении собственное значение симметричного состояния $|1, -1; 1, 0\rangle$ совпадает с энергией основного триплетного электронного состояния $E_0(1, -1) = -\omega_S + J/4$. При более точном рассмотрении с учетом вышележащего состояния $|1, 0; 1, -1\rangle$ [2.33] оказывается, что эта энергия приобретает небольшой сдвиг

$$E(1, -1; 1, 0) = E_0(1, -1) - \frac{(A/2)^2}{\omega_S}.$$

Для собственных значений энергии *антипересекающихся антисимметричных* состояний с $m + M = -1$ получим

$$E_{\pm}^a = (-J/2 - \omega_S + \omega_A)/2 \pm \sqrt{(J - \omega_S - \omega_A)^2/4 + (A/2)^2}. \quad (5.27)$$

Квантовые состояния, соответствующие этим уровням, представляют собой суперпозиции двух состояний $|1, -1; 0, 0\rangle$ и $|0, 0; 1, -1\rangle$.

Частота перехода между *нижним и средним уровнями* вблизи точки С при $J < \omega_S$ определяется выражением

$$\omega_J = E(1, -1; 1, 0) - E_-^a = \frac{(A/2)^2}{\omega_S - J} - \frac{(A/2)^2}{\omega_S}. \quad (5.28)$$

В этой области она соответствует разности энергий синглетного $|0, 0\rangle$ и триплетного $|1, 0\rangle$ (запутанных) состояний пары ядерных спинов с равной нулю полной проекцией ядерных спинов $m = 0$ и триплетным состоянием электронных спинов $|1, -1\rangle$, которые контролируются затвором J . Для значений $B = 2$ Тл, $\omega_S/2\pi = 57$ ГГц и $J/2\pi = 30$ ГГц $< \omega_e$ для этой частоты будем иметь $\omega_J/2\pi = 75$ кГц $\ll \omega_A^*/2\pi \sim 100$ МГц.

В первоначальной схеме Кейна [2.16] предполагалось использовать именно эти два уровня в качестве «рабочих» для организации двухкубитовых операций, а также процесса измерения конечного состояния кубита.

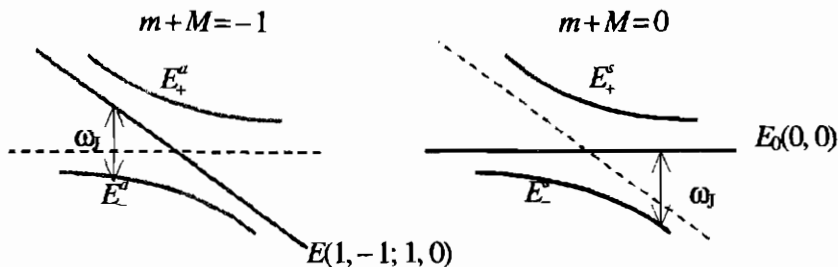


Рис. 2.4. Антисимметричная и симметричная пары антипересекающихся уровней вблизи точки С.

Как видно из рис. 2.4, адиабатическое увеличение параметра J или уменьшение величины поля B приводит при прохождении точки пересечения С справа налево к переходу нижнего антисимметричного состояния электрон-ядерной системы с $M + m = -1$ из триплетного электронного состояния двух доноров с полной проекцией спина $M = -1$ в синглетное состояние с $M = 0$ и, соответственно, к переходу состояния ядерных спинов из *синглетного запутанного* $(0, 0)$ в *триплетное незапутанное* состояние $(1, -1)$ с перевернутым значением одного из спинов. Другими словами, электрон и ядро обмениваются спиновыми состояниями. Состояния ядерных спинов до и после прохождения точки С, соответственно, имеют равный нулю полный вектор Блоха и вертикально направленный суммарный вектор Блоха. В этих состояниях *они не генерируют сигнал*, и требуются специальные методы для их детектирования.

Если энергия связи двух электронов на одном доноре превышает энергию связи для каждого электрона на своем доноре, то обоим электронам в синглетном состоянии становится энергетически выгоднее находиться на одном из доноров (D^- -состояние). В результате произойдет перенос заряда с одного донора на другой, что, согласно Кейну [2.16], может быть *использовано для измерения состояния ядерного спина с помощью высокочувствительных одноэлектронных емкостных методов* (одноэлектронные транзисторные схемы).

б) Вторая пара *антипересекающихся симметричных* состояний с $m + M = 0$ имеет собственные значения [2.2, 2.26]:

$$E_{\pm}^s = (J/2 - \omega_S + \omega_I)/2 \pm \sqrt{(J - \omega_S + \omega_I)^2/4 + (A/2)^2}, \quad (5.29)$$

при этом роль среднего уровня играет теперь $E(0, 0) = -3J/4$ (рис. 2.4.).

Нижнее антипересекающееся состояние в сильных полях $|1, -1; 1, 1\rangle$ в этом случае соответствует $M = -1, m = 1$, а вышележащее среднее состояние $|1, -1; 1, 0\rangle$ соответствует $M = -1, m = 0$, то есть отличается только перевернутым состоянием одного из ядерных спинов. При прохождении точки пересечения происходит одновременное переворачивание как электронного, так и ядерного спина, снова происходит обмен информацией между электронным и ядерным спином, ядерное триплетное *незапутанное состояние* ядерных спинов $|1, 1\rangle$ *переходит в триплетное запутанное состояние* $|1, 0\rangle$.

Эта пара уровней может быть также *предложена в качестве «рабочей»* для организации вычислительных и измерительных операций. Определенное преимущество этой пары состоит в том, что при переходе точки С пара ядерных спинов сохраняется в триплетном состоянии, а полная проекция изменяется на единицу. Это соответствует повороту суммарного вектора Блоха из вертикального положения в перпендикулярную плоскость, в которой он вращается с резонансной частотой вокруг направления поля и, в отличие от случая, рассмотренного Кейном, *индуцирует сигнал ядерной индукции*, для измерения которого могут быть использованы резонансные методы. Этот случай имеет значение для рассматриваемых далее ансамблевых методов измерения сигнала.

5.2.3. Электрический контроль состояний кубитов

Первоначальный анализ зависимости постоянной сверхтонкого взаимодействия от электрического потенциала для разных форм затворов был дан в [2.16, 2.24–2.27], а позднее было выполнено численное моделирование [2.34], учитывающее также и влияние поверхностного барьера.

При относительно *малых* значениях потенциала V на затворах A эта зависимость имеет колоколообразный характер вида $\Delta A(V)/A \approx -(V/V_0)^2$. Значение постоянной $1/V_0^2$ определяется геометрическими параметрами структуры a и c и поляризуемостью донорного атома χ . При $a \sim c$ на основе теории возмущений было получено следующее выражение $1/V_0^2 \approx \chi/(4a^2 \delta E)$ [2.24], где $\delta E \approx 0,04 \text{ эВ} = 6,4 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$ — характерное расстояние до возбужденных электронных уровней донора, $\chi = 4\pi\epsilon_0(9/2) \cdot (a_B^*)^3$ —

поляризуемость водородоподобного атома, имеющая для его эффективного борковского радиуса $a_B^* = 2$ нм, и $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-14}$ Ф/см — значение $\chi \sim 4 \cdot 10^{-32}$ Фсм². В результате будем иметь $(\omega/V_0)^2 \sim 2 \cdot 10^{-12} (\text{В/см})^2$, откуда для $a \sim c \sim 10$ нм получим $V_0 \sim 1$ В. Следовательно, приведенная квадратичная зависимость $\Delta A(V)/A$ справедлива при $V \ll 1$ В.

Численное моделирование, выполненное в работе [2.34] для значений потенциала на затворе $-1\text{В} < V < 1\text{В}$ и широкого диапазона значений параметра c , показало наличие порогового значения напряжения, при котором происходит резкое уменьшение электронной плотности на ядре донора и, соответственно, резкое уменьшение постоянной сверхтонкого взаимодействия.

Коснемся далее некоторых технологических аспектов. Неточность размещения донорных атомов в структуре, например, в направлении оси z , определяет ошибку значения параметра V_0 . Относительную среднеквадратичную величину этой ошибки при геометрических параметрах $a \sim c$ оценим из простого соотношения $(\delta V_0)^2 / V_0^2 \approx (\delta z)^2 / a^2$. Для оценки связанной с ней среднеквадратичной ошибки в настройке резонансной частоты при заданном потенциале V далее получим

$$\overline{(\delta \omega_A^+)^2} / (\omega_A^+)^2 \sim \overline{(\delta A)^2} / A^2 \sim 4(V/V_0)^4 \overline{(\delta z)^2} / a^2. \quad (5.30)$$

Если принять теперь, в соответствии с общими требованиями к полномасштабным квантовым компьютерам, что $\sqrt{\overline{(\delta \omega_A^+)^2} / (\omega_A^+)^2} \leq 10^{-4} - 10^{-5}$ и потребовать, чтобы технологические погрешности в расположении доноров в структуре составляли не более нескольких процентов, то потенциал на затворе должен быть ограничен значениями порядка 0,1 В.

Увеличение рабочих напряжений потребует либо существенного ужесточения технологических допусков, либо проведения индивидуальной калибровки значений потенциала на каждом затворе A .

Флуктуации напряжения на затворе приводят к соответствующим флуктуациям постоянной сверхтонкого взаимодействия и в конечном счете могут привести к *декогерентизации* квантовых состояний спиновых кубитов. Этим и других вопросов, связанных с процессами декогерентизации, мы коснемся ниже в подразделе 5.4.4.

Необходимое расстояние между кубитами в цепочке Кейна $l_x \sim 20$ нм определяется из требования, согласно которому постоянная косвенного обменного взаимодействия между электронными спинами соседних донорных атомов $J > 0$, обусловленная перекрытием электронных волновых функций, могла бы контролироваться с помощью потенциала на затво-

рах J . В поле $B = 2$ Тл значение $J(l_x)$, при котором имеет место пересечение электронных спиновых уровней, соответствует в кремнии расстоянию между атомами $l_x \sim 10\text{--}20$ нм [2.16], а в случае германия при определенной ориентации осей симметрии она может быть порядка 25–50 нм [2.24, 2.25].

К сожалению, электрический контроль параметра J оказывается не простым, поскольку зависимость этой постоянной $J(l_x)$ от расстояния между соседними ядерными спинами l_x благодаря междолинным интерференционным эффектам в электронной системе имеет *нерегулярный осциллирующий характер*, зависящий, кроме того, от наличия механических напряжений в полупроводниковой структуре [2.35].

Б.Кейном был предложен вариант кремниевого ЯМР квантового компьютера [2.23], в котором доноры предполагались разнесенными на такие расстояния, при которых обменное взаимодействие между электронными спинами практически отсутствовало, и проблема контроля параметра J отпадала. В этом случае передачу информации о когерентном состоянии одного ядерного спина к другому предлагается осуществлять по следующей схеме. Сначала посредством операций SWAP информация передается через сверхтонкое взаимодействие от ядерного спина к электронному спину, связанному с донором. Затем с помощью цепочки затворов, часть из которых находится над свободными от доноров областями, путем приложения электрических импульсов производится ионизация донора и переход электрона в приповерхностный двумерный (или одномерный) проводящий канал. Этот канал должен быть полностью свободен от ловушек с зарядом, и электроны проводимости могут без потери спиновой когерентности достигать затвора, расположенного над удаленным вторым донором. Затем напряжение на этом затворе снимается, и квантовая информация с помощью второй операции SWAP передается от электронного спина к ядерному спину второго донора. Преимуществом такого подхода являются большие геометрические масштабы структуры. Там же рассматривался и вариант двухмерной архитектуры, напоминающей архитектуру одноэлектронных приборов с зарядовой связью, а для инициализации ядерных спинов при температурах $T \sim 0,1$ К предлагалось использовать некоторую структуру, названную *спиновым рефрижератором*.

Описанная идея Кейна развивается далее в статье Б. Кейна с сотрудниками [2.36]. В ней обращается внимание на то, что основное состояние донорных атомов является стабильным при равном нулю потенциале на затворе A и при значении потенциала, при котором донорный атом ионизируется, а постоянная сверхтонкого взаимодействия практически обращается в нуль. Это позволяет с помощью затворов A осуществлять не-

чувствительный к ошибкам настройки их состояний дискретный цифровой контроль, когда сверхтонкое взаимодействие либо включено, либо выключено для каждого тактового цикла. Авторы статьи [2.36] предлагают кодировать состояния логических кубитов двумя максимально запутанными электрон-ядерными состояниями

$$|0\rangle_L \equiv \sqrt{1/2} (|\uparrow_s \downarrow_I\rangle - |\downarrow_s \uparrow_I\rangle)$$

и

$$|1\rangle_L \equiv \sqrt{1/2} (|\uparrow_s \downarrow_I\rangle + |\downarrow_s \uparrow_I\rangle),$$

которые принадлежат гильбертовому подпространству состояний с суммарной проекцией электрон-ядерного спина $M_a + m_a = 0$. Пространство состояний всех кубитов регистра можно представить как совокупность таких инвариантных подпространств. Внутри каждого подпространства переворот ядерного спина сопровождается переворотом электронного спина, и полное изменение магнитной энергии, соответствующее резонансной частоте для логического кубита, будет $\Delta E = (\gamma_s + \gamma_I)B$. В то же время переходы между разными подпространствами требуют переворачивания только одного из спинов, что соответствует нерезонансным переходам. Как видно из (5.2) вклады сверхтонкого взаимодействия и магнитного поля имеют сравнимую величину ($X \sim 1$) в полях порядка 1 мТл, поэтому рабочими полями в этом случае будут слабые поля.

Основной недостаток предложенной в [2.36] модификации первоначальной схемы Кейна, по нашему мнению, состоит в необходимости перехода к миллитесловым постоянным полям. Это потребует понижения спиновых температур до микрокельвиновых значений. Кроме того, эта схема требует сохранения индивидуального обращения к отдельным логическим кубитам и дополнительного повышения уровня очистки материала от парамагнитных примесных центров для подавления декогерентизации состояний ядерных спинов в слабых полях.

Заключение: 1. Эффект усиления сам по себе не позволяет повысить максимально возможное значение сигнала при использовании стандартных методов ЯМР. Однако он позволяет существенно *снизить мощность* радиочастотных управляющих импульсов и *увеличить скорость* выполнения квантовых операций.

2. Помимо пары антипересекающихся уровней, рассматривавшихся Кейном для организации вычислительных и измерительных операций над состояниями кубитов, может быть предложена другая пара антипересекающихся уровней, преимущество которой заключается в возможности детектировать изменение состояний ядерных спинов при ансамблевом обращении к ним непосредственно резонансными методами.

3. Из требования обеспечения необходимой точности выполнения квантовых операций следуют достаточно **жесткие требования к геометрическим параметрам** наноструктуры.

Общий вывод состоит в том, что, несмотря на ряд предложенных модификаций схемы Кейна, основные проблемы этой схемы, касающиеся инициализации и измерений состояний кубитов **в рамках индивидуального подхода, не находят радикального решения.**

5.3. Некоторые варианты многокубитовых ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров

Для преодоления отмеченных в разделе 5.1 трудностей, с которыми сталкивается модель Кейна, разумным представляется использование **ансамблевого подхода**, успешно продемонстрированного в жидкостных прототипах квантовых компьютерах. Можно ожидать, что такой подход позволит решить проблему с фазовыми множителями (**третья** трудность схемы Кейна), использовать стандартные методы ЯМР для измерения сигнала на выходе компьютера и динамические методы поляризации ядерных спинов (охлаждение спиновой системы). Было предложено несколько различных твердотельных ансамблевых вариантов. Рассмотрим здесь кратко некоторые из тех, которые относятся к ЯМР квантовым компьютерам.

5.3.1. Ансамблевый твердотельный ЯМР квантовый компьютер с двумерным электронным газом

Один из первых вариантов ансамблевого твердотельного ЯМР квантового компьютера был предложен еще до появления модели Кейна [2.37]. Модель представляла собой **цепочки из атомов** с ядерными спинами $1/2$, помещенных в **двухмерный электронный газ**, находящийся в условиях **квантового эффекта Холла**. Двухмерный электронный газ может образовываться в различных гетероструктурных переходах. При температуре порядка 1 К и внешних магнитных полях порядка нескольких тесла существуют интервалы значений магнитных полей, при которых электроны в двухмерном газе заполняют целое число уровней Ландау. Электронный газ тогда образует **недиссипативную квантовую жидкость**, то есть находится в когерентном квантовом состоянии, а зависимость холловской проводимости от концентрации электронов или внешнего магнитного поля имеет платообразные участки конечной длины при значениях, кратных $e^2/(2\pi h) = 38,7 \text{ Ом}^{-1}$, где e — заряд свободно-

го электрона (целочисленный эффект Холла). Экспериментально измеренное время спин-решеточной релаксации ядерных спинов в такой системе составляет от нескольких минут до получаса.

Типичное расстояние между ядрами должно быть сравнимо с магнитной длиной $l_H = (\hbar/eB)^{1/2}$, которое составляет при нескольких тесла порядка 10 нм. В условиях квантового эффекта Холла прямое диполь-дипольное взаимодействие ядерных спинов пренебрежимо мало. Основным взаимодействием между ядерными спинами является *косвенное спиновое взаимодействие* через электроны проводимости двухмерного электронного газа. Это взаимодействие экспоненциально затухает в зависимости от расстояния с характерной длиной l_H [2.38].

Для выполнения двухкубитовых операций необходимо иметь возможность включать и выключать это взаимодействие в течение определенных интервалов времени. Для этого предлагается геометрически расположить атомы такими парами, чтобы двухспиновое взаимодействие не было пренебрежимо мало между спинами соседних атомов, что соответствует расстоянию между атомами порядка 100 нм.

Одной из возможностей выключения на определенный промежуток времени взаимодействия спинов для одной пары атомов является размещение между основными атомами дополнительных примесных атомов, которые могут быть ионизированы с помощью внешнего электромагнитного импульса, локально нарушающего когерентность двухмерного электронного газа, а с ней и косвенное взаимодействие между спинами в паре. Предполагается, что селективность резонансных частот может быть также достигнута путем использования примесей различного типа, помещая их вблизи ядерных спинов.

Квантовые операции следует выполнять одновременно на всех группах соответствующим образом настроенных спинов. Квантовые операции должны производиться обычным образом с помощью радиочастотных импульсов.

Для инициализации состояний ядерных спинов предлагается использовать накачку поляризованным по кругу светом, рождающим электрон-дырочные пары. Эти пары после аннигиляции фиксируют ядерную поляризацию в соответствии с поляризацией света.

Для измерения состояния спинов в [2.37] предлагается использовать *ансамблевый* подход, аналогичный используемому в жидкостных квантовых компьютерах, то есть путем измерения среднего значения сигнала, создаваемого действующими параллельно копиями спиновых цепочек (аналоги молекул в жидкостном варианте). Предполагается, что в случае ансамбля, состоящего из копий спиновых цепочек, разделенных между

собой на расстояние, большее, чем расстояние между спинами в цепочке, при достаточном числе этих копий можно значительно снизить неточность определения спинового состояния.

Основными недостатками этого варианта являются:

а) наличие присущих ему механизмов декогерентизации ядерных спинов, обусловленных присутствием примесных атомов, гетеропереходов, а также декогерентизацией электронных состояний в двухмерном электронном газе;

б) сохранение проблемы инициализации состояний ядерных спинов.

5.3.2. Ансамблевый ЯМР квантовый компьютер на естественных кристаллах

Рассмотренные выше варианты, как и модель Кейна, предполагают создание *искусственных наноструктур*. Особняком стоит вариант ансамблевого компьютера, предложенный в [2.39]. В качестве кубитов в нем рассматриваются *ядерные спины фтора*, принадлежащие *естественному твердому кристаллу флюороапатита* ($\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$), которые располагаются в виде одномерных цепочек в параллельных плоскостях кристалла.

Предлагаемый квантовый компьютер состоит из ансамбля N одномерных цепочек, каждая из n ядерных спинов атомов ^{19}F с $I = 1/2$, в кристалле флюороапатита. Кристалл длиной 10 мкм и шириной 1 мкм предлагается смонтировать на конце кантилевера магнитно-резонансного силового микроскопа (MRFM). Он содержит $N = 10^7$ кубитов с эквивалентными частотами в каждой плоскости кристалла. Диспрозиевый микромагнит с размерами $10 \times 4 \times 400$ мкм³ располагается параллельно плоскости кристалла. На расстоянии 2,07 мкм сверху магнита должно быть создано магнитное поле ~ 7 Тл с градиентом $\sim 1,4$ Тл/мкм. Благодаря градиенту поля ядерные резонансные частоты цепочек атомов в различных параллельных плоскостях в кристалле *будут различны*. Для цепочек в соседних плоскостях разность частот составит $\Delta\omega / 2\pi = 19,2$ кГц.

Исходную поляризацию ядерных спинов предполагается достигать путем охлаждения кристалла до очень низких температур. Основной проблемой является подавление тех диполь-дипольных спиновых взаимодействий, которые приводят к декогерентизации спиновых состояний при сохранении взаимодействий, необходимых для выполнения логических операций. Предлагается для этого использовать кристаллы высокого

качества и метод «контролируемого усреднения» с помощью радиочастотных импульсов, известного в технике ЯМР высокого разрешения в твердых телах [2.40].

Если диполь-дипольное взаимодействие хорошо усредняется, то время декогерентизации будет приближаться к спин-решеточному времени релаксации T_1 , которое определяется тепловыми флуктуациями парамагнитных примесей и для достаточно хорошо очищенных кристаллов при низких температурах может достигать часов.

Эксперимент должен выполняться в высоком вакууме ($<10^{-5}$ мм Hg). Осцилляции кантилевера могут детектироваться с помощью оптоволоконного сенсора. Считывание производится при циклической адиабатической инверсии, которая модулирует намагниченность в плоскости ядер на частоте ω_m , близкой к резонансной частоте кантилевера. Ядерные спины с резонансной частотой ω подвергаются действию радиочастотного поля, создаваемого в катушке $b_x = 2b \cos\{[\Omega \cos(\omega_m t) + \omega_1]t\}$, где Ω — частота прохождения, которая должна быть меньше разности резонансных ядерных частот соседних цепочек $\Delta\omega$.

Сделанные в [2.39] оценки показывают, что в рамках предложенного варианта можно реализовать уже при существующей чувствительности магнитно-резонансной силовой микроскопии квантовые вычисления на 300 кубитах при температурах $T = 10$ мК и полях $B = 20$ Тл.

Аналогичный вариант был предложен для кремниевой структуры, в которой на краю террас в кристалле ^{28}Si создавались регулярные цепочки из атомов ^{29}Si , ядерные спины которых играли роль кубитов [2.41].

В [2.42] в качестве кристалла, в котором естественным образом создаются квазиодномерные цепочки из протонов, принадлежащих гидроксильным группам, был рассмотрен гидроксипатит кальция $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$.

Эти схемы имеют два важных преимущества по сравнению с описанными выше вариантами твердотельных ЯМР квантовых компьютеров. Во-первых, исключаются трудности, связанные с созданием искусственных наноструктур с контролируемым расположением атомов с ядерными спинами; во-вторых, предлагаемом варианте используются ядерные спины, которые естественным образом организованы в кристаллической структуре; в-третьих, наличие достаточно большого ансамбля спинов позволяло бы исключить проблемы считывания и инициализации состояний отдельных ядерных спинов.

Основной недостаток этого варианта, по-видимому, связан с необходимостью создавать чересчур большие градиенты магнитного поля.

5.4. Многокубитовый ансамблевый кремниевый ЯМР квантовый компьютер

5.4.1. Кремниевый ансамблевый ЯМР квантовый компьютер с полосковыми затворами

В качестве альтернативного варианта кремниевого многокубитового квантового компьютера, позволяющего преодолеть ряд трудностей схемы Кейна, может быть рассмотрена кремниевая структура, содержащая *достаточно большой ансамбль* одинаковых «искусственных молекул» Кейна [2.24, 2.25, 2.2, 2.28], управляемых системой чередующихся полосковых (в отличие от модели Кейна) затворов шириной $a \leq 10$ нм типа **A** и **J**.

Донорные атомы ^{31}P в такой структуре располагаются вдоль полосковых затворов **A** на расстоянии l_y друг от друга, расстояние между атомами, находящимися под соседними полосковыми затворами типа **A**, имеет то же значение $l_x \sim 20$ нм, что и в схеме Кейна. Эти атомы образуют однокубитовый ансамбль, резонансную частоту всех кубитов в котором предполагается настраивать путем изменения потенциала на затворе **A**, а путем изменения потенциала на затворах **J** включать и выключать косвенное взаимодействие между соседними однокубитовыми ансамблями (рис. 2.5).

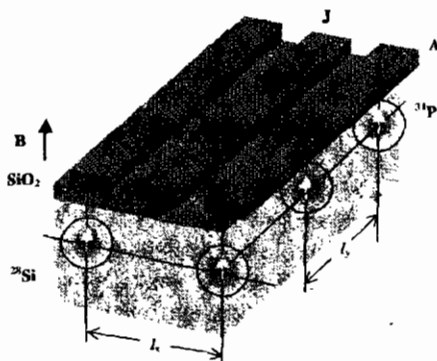


Рис. 2.5. Схема расположения донорных атомов ^{31}P под полосковыми затворами. Изображены две ячейки квантового регистра для трех элементов ансамбля.

При этом можно ожидать, что из-за ансамблевого усреднения в значительной степени будут сняты трудности, связанные с технологическими неточностями расположения отдельных доноров и с отмеченной выше

нерегулярной осциллирующей зависимостью постоянной J от расстояния l_x между полосковыми затворами.

Здесь *возможны два различных случая*:

1. При значении $l_y \gg l_x$, когда косвенное взаимодействие между электронными спинами донорных атомов вдоль полосковых затворов (ось y) пренебрежимо мало, то есть $J(l_y) < T \ll \omega_s$, $J(l_x)$ регулярность расположения цепочек доноров вдоль направления оси y не играет существенной роли. Такая структура распадается на систему независимых цепочек кубитов вдоль оси x . Они образуют *ансамбль параллельно действующих копий* эквивалентных «искусственных молекул» Кейна, электронные спины в которых в начальном состоянии ориентированы по полю. При температурах порядка 1 мК все ядерные спины-кубиты будут находиться в одинаковых основных состояниях, определяемых внешним полем и сверхтонким взаимодействием.

Сигнал на выходе в такой системе будет пропорционален, как и в случае жидкостей, числу «молекул» или числу донорных атомов под полосковыми затворами A , который для достаточно большого *ансамбля параллельно работающих* цепочек, как показано в разделе 5.4.2, может быть *доступен измерению стандартными методами ЯМР*.

2. Более сложная ситуация возникает в случае, когда донорные атомы под полосковыми затворами расположены регулярно и $l_y < l_x$, то есть, $J(l_y) \gg \omega_s$, $J(l_x) > T$. Обменное взаимодействие между электронными спинами *вдоль полосковых затворов* в этом случае способствует образованию при низких температурах искусственных двухмерных донорных структур с *квазиодномерными антиферромагнитно упорядоченными* цепочками вдоль оси y .

При наличии внешнего поля, направленного по одному из направлений намагниченности двух магнитных подрешеток антиферромагнитных цепочек, ядерные резонансные частоты соседних ядерных спинов ω_A будут различны для каждой из них: $\omega_A^\pm = |\omega_1 \pm A/2|$, а ядерные спины будут ориентироваться, соответственно, либо по полю, если $|\omega_1| > A/2$, либо по направлению электронного спина, если $|\omega_1| < A/2$.

Результирующий сигнал ЯМР при настройке на одну из частот ω_A^\pm будет пропорционален половине числа ядерных спинов в антиферромагнитной цепочке или половине числа донорных атомов под затвором A .

Далее остановимся подробнее на первом из указанных многокубитовых ансамблевых вариантов. Но сначала рассмотрим соответствующее

отношение сигнала к шуму для ансамблевого квантового компьютера. Ко второму варианту вернемся в разделе 6.2.

5.4.2. Отношение сигнал-шум ансамблевого ЯМР квантового компьютера

Для измерения состояний ядерных спинов-кубитов в жидкостных ансамблевых ЯМР компьютерах используется стандартная техника ЯМР (рис. 2.6). Образец в виде ампулы с жидкостным регистром помещается в поле \mathbf{B} постоянного магнита ЯМР спектрометра и переменное поле $\mathbf{b}(t)$ (линейно поляризованное в односоленоидной схеме), создаваемое напряжением $V_{\omega}(t)$

$$\mathbf{B}(t) = \mathbf{B} + \mathbf{b}(t) = B\mathbf{k} + 2b\cos(\omega t + \varphi)\mathbf{i}. \quad (2.47)$$

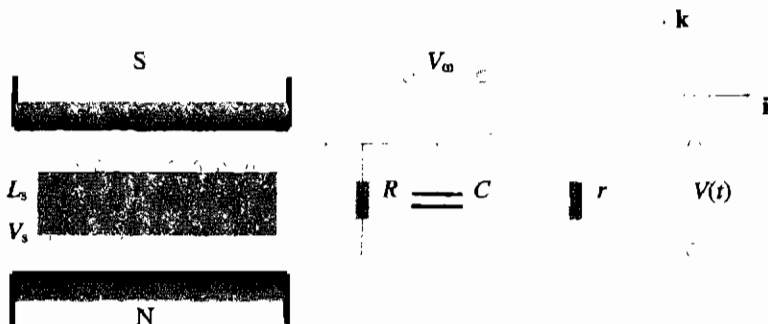


Рис. 2.6. Принципиальная односоленоидная схема ЯМР спектрометра.

$L_s = \mu_0(KA)^2/V_s$ — индуктивность соленоида резонансного контура, V_s — объем соленоида, K — число витков и A — площадь витка соленоида, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Гл}^2\text{см}^3/\text{Дж}$

Амплитуда индуцированного радиочастотного напряжения $V(t)$ на выходе ЯМР спектрометра определяется выражением (в единицах СИ)

$$V(t) = \mu_0 Q_s KA \frac{dM_x}{dt} = \sqrt{\frac{\mu_0 Q_s R V_s}{\omega_A}} \cdot \frac{dM_x}{dt}, \quad (5.31)$$

где для резонансной радиочастоты $\omega = \omega_A = (L_s C)^{-1/2}$ добротность резонансного контура в схеме с параллельным соединением выходного сопротивления с резонансным контуром определяется выражением $Q_s = R/(\omega_A L_s)$.

Максимальное значение наведенной ядерной макроскопической намагниченности M_x в образце достигается, как это следует из анализа решений уравнений Блоха [2.29], при амплитуде радиочастотного поля $b = 1/(\chi \sqrt{T_{1T} T_{1H}})$ и составляет

$$M_{x \max} = M_{20}/2 = \chi \hbar (N/V_s) P_{0 \max} / 4, \quad (5.32)$$

где $P_{0 \max}$ – величина максимального равновесного значения вектора Блоха, N – число ядерных спинов в объеме V_s .

В случае, когда образец представляет собой ансамбль «молекул», состоящих из L донорных атомов ^{31}P , роль максимального равновесного вектора Блоха будет играть максимально возможная равновесная поляризация ядерных спинов, отнесенная к одному спину-кубиту и одному элементу ансамбля. Ее значение в достаточно сильных полях ($X \gg 1$, $a \ll 1$ (несколько тесла)) определяется населенностями двух нижних атомных спиновых уровней (рис. 2.26)

$$|0,0\rangle = \sqrt{\alpha} |\uparrow_s \downarrow_t\rangle - \sqrt{1-\alpha} |\downarrow_s \uparrow_t\rangle, \quad |1,-1\rangle = |\downarrow_s \downarrow_t\rangle. \quad (5.6)$$

Вероятности независимого заполнения этих двух уровней одновременно всеми L кубитами в «молекуле» имеют следующий вид

$$\begin{aligned} (p(0,0))^L &= \left(\frac{\exp(\hbar\omega_A^+ / 2kT)}{\exp(\hbar\omega_A^+ / 2kT) + \exp(-\hbar\omega_A^+ / 2kT)} \right)^L, \\ (p(1,-1))^L &= \left(\frac{\exp(-\hbar\omega_A^+ / 2kT)}{\exp(\hbar\omega_A^+ / 2kT) + \exp(-\hbar\omega_A^+ / 2kT)} \right)^L. \end{aligned} \quad (5.33)$$

В результате, учитывая, что матричные элементы

$$\langle 0,0 | \sigma_z | 0,0 \rangle \approx 1, \quad \langle 1,-1 | \sigma_z | 1,-1 \rangle = -1, \quad (5.34)$$

для величины $P_{0 \max}$ получим

$$\begin{aligned} P_{0 \max} &= \langle 0,0 | \sigma_z | 0,0 \rangle (p(0,0))^L + \langle 1,-1 | \sigma_z | 1,-1 \rangle (p(1,-1))^L = \\ &= (p(0,0))^L - (p(1,-1))^L = \frac{2\text{sh}(L\hbar\omega_A^+ / 2kT)}{2^L \text{ch}(\hbar\omega_A^+ / 2kT)}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

С другой стороны, $P_{0 \max}$ имеет смысл *максимально возможной вероятности*, с которой чистое состояние с полной ядерной поляризацией

$P_0 = 1$ входит в квазичистое состояние (раздел 4.1), обозначаемое параметром $\varepsilon(L)$ [2.1]

$$P_{0 \max} = \varepsilon(L) = \frac{2 \operatorname{sh}(L \hbar \omega_A^+ / 2kT)}{2^L \operatorname{ch}(\hbar \omega_A^+ / 2kT)^L}. \quad (5.36)$$

Максимально возможная **амплитуда сигнала ЯМР** от L -кубитового ансамблевого образца в результате принимает вид

$$|V_{\max}| = (\mu_0/4) Q_s K A \omega_A^+ (N/V_s) \chi \hbar \varepsilon(L) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\mu_0 Q_s R \omega_A^+}{V_s}} N \gamma \hbar \varepsilon(L). \quad (5.37)$$

Заметим, что при комнатных температурах, когда $L \hbar \omega_A^+ / kT \ll 1$, мы имеем уже использовавшееся выше значение $\varepsilon(L) = L 2^{-L} \hbar \omega_A^+ / kT$, то есть максимально возможная амплитуда ЯМР сигнала **экспоненциально уменьшается** с ростом числа кубитов L .

Отношение сигнала к шуму (S/N) при среднеквадратичном значении напряжения на сопротивлении R , создаваемом тепловым шумом в измерительной цепи,

$$V_N = \sqrt{4kTR\Delta\nu}, \quad (5.38)$$

где $\Delta\nu$ — ширина полосы усилителя, принимает теперь вид

$$(S/N) = |V_{\max}| / V_N \approx \frac{1}{8} \sqrt{\frac{\mu_0 \hbar Q_s \hbar \omega_A^+}{V_s \Delta\nu kT}} \chi N \varepsilon(L). \quad (5.39)$$

В частности, для жидкого образца с двухкубитовыми молекулами ($L = 2$), полагая $\varepsilon(L) \sim \hbar \omega_A^+ / kT \sim 10^{-5}$ и используя (5.39), получим оценку для отношения сигнала к шуму следующего вида (V_s — в см^{-3})

$$(S/N) \sim (Q/\Delta\nu V_s)^{1/2} N 10^{-16}. \quad (5.40)$$

Таким образом, для того, чтобы можно было наблюдать ЯМР сигнал ($(S/N) > 1$) в **жидкостном** двухкубитовом ансамбле при комнатных температурах и при $\Delta\nu \sim 1$ Гц, $V_s \sim 1 \text{ см}^3$, $Q \sim 10^3$, он должен иметь число молекул в образце (элементов ансамбля) $N > 10^{16}$.

В случае парамагнитной жидкости число полностью поляризованных ядерных спинов может быть увеличено путем использования динамической поляризации (эффект Оверхаузера), а дополнительное усиление считываемого сигнала ЯМР может быть получено с помощью методов двойного электронно-ядерного резонанса.

При низких температурах $\omega_N/T \gg 1$, как это следует из (5.36), параметр $\epsilon(L) \approx 1$. Основное состояние оказывается чистым квантовым состоянием полностью поляризованных ядерных спинов с $P_0 = 1$. Сигнал ЯМР оказывается независимым от числа кубитов L , и экспоненциального уменьшения его не происходит. В этом случае практически не требуется никакой специальной процедуры инициализации состояний ядерных спинов. Но это будет неизбежно твердотельный ЯМР квантовый компьютер.

Далее мы покажем, что при таких низких спиновых температурах ($T \sim 1$ мК) сигнал ЯМР будет наблюдаем для многокубитовых ансамблей и при приемлемом для создания полномасштабного квантового компьютера числе элементов ансамбля. Возникает вопрос: *как создать такие низкие спиновые температуры?*

5.4.3. Охлаждение ядерных спиновых систем и инициализация ядерных спиновых состояний путем динамической поляризации

Процессы электронной и ядерной продольной релаксации для разрешенных переходов между уровнями донорного атома ^{31}P в кремнии интенсивно исследовались в конце 50-х годов [2.20, 2.22]. Для переходов с частотами ω_B и ω_C (рис. 2.26) были найдены исключительно большие электронные продольные времена релаксации $\tau_{\text{ЯВ}} \approx \tau_{\text{ЭС}}$ при низких температурах, которые достигали *одного часа* при $T = 1,25$ К и $B \sim 0,3$ Тл, не зависели от концентрации фосфора до концентраций $C \sim 10^{16}$ см $^{-3}$ и изменялись обратно пропорционально температуре решетки T .

Время релаксации $\tau_{\text{ЭС}}$ для переходов с частотой ω_B , которые сопровождаются одновременным переворачиванием электронного и ядерного спинов («запрещенные» переходы) при $T=1,25$ К, $B=0,3$ Тл и $C \sim 10^{16}$ см $^{-3}$ составляло более $\tau_{\text{ЭС}} \sim 30$ часов $> \tau_{\text{ЯВ}}, \tau_{\text{ЭС}}$.

Для структуры, изображенной на рис. 2.2, с $d = 20$ нм, $l_x = 20$ нм, $l_y = 50$ нм для средней концентрации донорных атомов будем иметь $C = (d l_x l_y)^{-1} = 5 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$. Для такого значения C , согласно [2.22], при гелиевых температурах время релаксации $\tau_{\text{ЯВ}} \sim 100$ с. Дальнейшее увеличение времени релаксации может быть достигнуто уменьшением температуры решетки.

Исключительно большие времена продольной релаксации делают возможным образование долгоживущих ядерных неравновесных состояний, которые характеризуются сверхнизкими спиновыми температурами уже при температурах решетки порядка 1 К.

Требуемая инициализация ядерных квантовых состояний (практически полная поляризация ядерных спинов) будет происходить при *спино-*

вых температурах $T \leq 1$ мК. Для получения такой спиновой температуры в многокубитовом ансамбле рассмотренного выше типа в условиях, когда температура окружения порядка 0,1 К, представляется перспективным использовать известные методы динамической поляризации ядерных спинов в твердых телах.

Один из таких методов динамической поляризации ядерных спинов донорных атомов основан на насыщении с помощью СВЧ накачки «запрещенного» перехода (рис.2.2 б) в двойном электрон-ядерном резонансе во всем ансамбле квантовых цепочек. Такой способ динамической поляризации ядерных спинов широко используется для создания поляризованных ядерных мишеней. Он получил название *солид-эффекта* Абрагама [2.29]. Важно заметить, что, в отличие от ансамблевого случая, при насыщении соответствующих переходов у кубитов отдельной цепочки Кейна потребовалась бы очень жесткая локализация необходимой СВЧ-мощности.

Для описания процесса динамической поляризации в ансамбле двух-спиновых систем воспользуемся упрощенным подходом, позволяющим рассмотреть существо солид-эффекта [2.28].

Стационарные значения электронной $P_S = 2\langle S_z \rangle$ и ядерной $P_I = 2\langle I_z \rangle$ поляризации могут быть выражены через населенности четырех состояний следующим образом

$$\begin{aligned} P_S &= p(1,1) + p(1,0) - p(1,-1) - p(0,0), \\ P_I &= p(1,1) + p(0,0) - p(1,0) - p(1,-1), \end{aligned} \quad (5.41)$$

где $p(F, M_F)$ – населенности состояний F, M_F (рис. 2.2). Они удовлетворяют условию нормировки:

$$p(1,1) + p(1,0) + p(1,-1) + p(0,0) = 1. \quad (5.42)$$

Запишем теперь скоростные уравнения для населенностей (скорости релаксации, соответствующие переходам с частотами ω_A^{\pm} , будем считать одинаковыми):

$$\begin{aligned} dp(0,0)/dt &= (p(1,1) - p(0,0)r_B)/\tau_{IB} + (p(1,0) - p(0,0)r_D)/\tau_{ID} + \\ &\quad + (p(1,-1) - p(0,0)r_A^+)/T_{IA}, \\ dp(1,-1)/dt &= (p(1,0) - p(1,-1)r_C)/\tau_{IC} + (p(1,1) - p(1,-1)) \cdot W_S + \\ &\quad + (p(0,0)r_A^+ - p(1,-1))/T_{IA}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 dp(1,0)/dt &= (p(1,-1)r_C - p(1,0))/\tau_{1C} + p(0,0)r_D - p(1,0)/\tau_{1D} + \\
 &\quad + (p(1,1) - p(1,0)r_A^-)/T_{1A}, \\
 dp(1,1)/dt &= (p(0,0)r_B - p(1,1))/\tau_{1B} + (p(1,-1) - p(1,1)) \cdot W_S + \\
 &\quad + (p(1,0)r_A^- - p(1,1))/T_{1A},
 \end{aligned} \tag{5.43}$$

где параметры (здесь снова используем единицы $\hbar = k = 1$)

$$r_{B,C,D} = \exp(-\omega_{B,C,D}/T), \quad r_A^\pm = \exp(-\omega_A^\pm/T)$$

представляют собой отношения скоростей для тепловых переходов вверх и вниз. Значения $\omega_{B,C,D}/T \gg 1$, $\omega_A^\pm/T \ll 1$ ($T \leq 0,1$ К) соответствуют полной тепловой электронной $P_{S0} = -1$ и слабой ядерной $P_{J0} \sim \omega_A^\pm/T \ll 1$ равновесным поляризациям.

Предположим далее, что скорость индуцированного внешним СВЧ полем «запрещенного» электронного перехода $|1, 1\rangle \rightarrow |1, -1\rangle$ с частотой ω_S , сопровождающегося одновременным переворотом электронного и ядерного спинов W_S , и продольные времена релаксации удовлетворяют условию:

$$W_S^{-1} < \tau_{1B} = \tau_{1C} \ll T_{1A}, \tau_{1D}, \tau_{1S}, \tag{5.44}$$

где τ_{1D}, τ_{1S} — продольные времена релаксации электронных спинов для запрещенных переходов. В результате получим следующие уравнения

$$\begin{aligned}
 dp(0,0)/dt &= p(1,1)/\tau_{1B} + (p(1,-1) - p(0,0))/T_{1A}, \\
 dp(1,-1)/dt &= p(1,0)/\tau_{1B} + ((p(1,1) - p(1,-1)) \cdot W_S + (p(0,0) - p(1,-1))/T_{1A}), \\
 dip(1,0)/dot &= -p(1,0)/\tau_{1B} + (p(1,1) - p(1,0))/T_{1A}, \\
 dip(1,1)/dot &= -p(1,1)/\tau_{1B} + (p(1,-1) - p(1,1)) \cdot W_S + (p(1,0) - p(1,1))/T_{1A}.
 \end{aligned} \tag{5.45}$$

С помощью уравнений (5.41), (5.42), (5.45) получим следующие скоростные уравнения для P_S и P_J :

$$\begin{aligned}
 dP_S/dt &= -(P_S + P_J) \cdot W_S - (P_S + 1)/\tau_{1B}, \\
 dP_J/dt &= -(P_S + P_J) \cdot W_S - P_J/T_{1A}.
 \end{aligned} \tag{5.46}$$

Условие стационарного насыщения ($W_S > 1/T_{1A}$) для перехода $|1, 1\rangle \rightarrow |1, -1\rangle$ обеспечивает выравнивание населенностей $p(1,1) = p(1,-1)$,

в результате которого мы получаем *полную ядерную спиновую поляризацию*

$$P_1 = -P_S = p(0,0) = 1. \quad (5.47)$$

что эквивалентно в рассматриваемом случае охлаждению ядерных спинов до спиновых температур $T_1 < 10^{-3}$ К. В этом состоянии при температурах решетки $\sim 0,1$ К ядерные спины могут находиться после отключения накачки в течение времени, определяемом временем продольной релаксации, $T_{1A} \sim 10$ часов [2.22].

Таким способом при использовании ансамблевого подхода и динамической поляризации может быть преодолена *первая* трудность схемы Кейна.

5.4.4. Отношение сигнал-шум для ансамблевого кремниевое квантового компьютера

Для реализации ансамблевого кремниевое квантового регистра можно предложить в качестве одного из возможных вариант планарной схемы, которая представляет собой *n-p* параллельно работающих блоков, каждый из которых содержит N_0 параллельно соединенных *L*-кубитовых линейных «молекул» Кейна [2.28] на кремниевой пластине. Так что полное число «молекул» в ансамбле составляет $N = n \cdot p \cdot N_0$ (рис.2.7).

Выходной сигнал от такого ансамбля параллельно работающих цепочек, как и в случае жидкостей, будет пропорционален числу «молекул» N . Интенсивность считываемого ЯМР сигнала от такого ансамбля параллельно работающих цепочек, в отличие от жидкостного прототипа, при полной поляризации ядерных спинов, то есть при спиновых температурах $< 10^{-3}$ К, не содержит малого множителя $\varepsilon(L) \approx L \exp(-L\hbar\omega_A^+ / kT)$.

В **Приложении П2** показано, что величина ЯМР сигнала от образца с дискретным расположением спинов с точностью до несущественного множителя совпадает с величиной сигнала от макроскопического образца с той же средней концентрацией спинов. Поэтому, полагая в выражении (5.39) $\hbar\omega_A^+ / kT_1 \sim 1$ ($T_1 \sim 1$ мК) и $\varepsilon(L) \sim 1$, в качестве оценки для необходимого отношения сигнал-шум будем иметь

$$(S/N) \sim (Q/V_s)^{1/2} \cdot N \cdot 10^{-10} > 1, \quad (5.48)$$

где эффективный объем ансамбля N «молекул» $V_s \sim N \cdot \Delta l_x l_y L$. Полагая теперь для оценки $\Delta \approx 1$ мм, $l_x = 20$ нм, $l_y = 50$ нм, число кубитов в «молекуле» $L = 1000$, а добротность резонансного контура при низких температурах $Q \approx 10^6$, получим, что сигнал ЯМР будет превышать шумовой сигнал при полном числе «молекул» $N = n \cdot p \cdot N_0 > 10^5$.

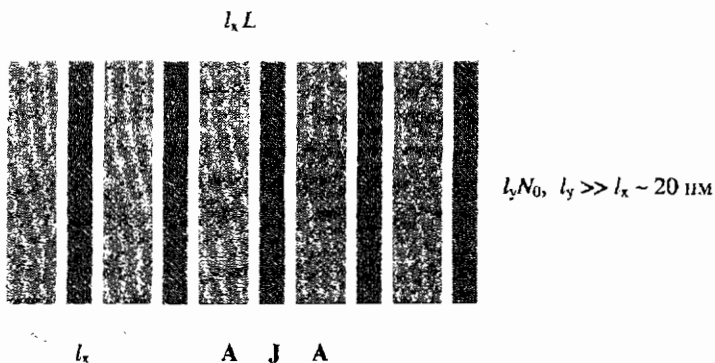


Рис. 2.7. Вид сверху схемы регулярного расположения полосковых затворов А (широкие линии) и J (узкие линии) в одном блоке. Толщина пластины ^{28}Si принята равной $\Delta \sim 1$ нм.

Для оценки величин n и p рассмотрим блок квадратной формы, у которой $50N_0p = 20 \cdot Ln = 20 \cdot 1000 \cdot n$ и $N_0 = 100$. В результате найдем $n \approx 16$, $p \approx 63$. Площадь всей такой структуры будет порядка 400×400 мкм².

Таким образом, общий размер многокубитовой структуры, даже если учесть значительные пассивные области, где будут располагаться затворы и соединения, оказывается достаточно малым для того, чтобы *эта структура могла быть размещена в зазоре магнита стандартного ЯМР спектрометра*. При дальнейшей оптимизации рассмотренной структуры можно ожидать и дополнительного уменьшения числа «молекул» N .

Следовательно, становится возможным использование стандартной ЯМР техники для считывания информации, что существенно упрощает этот процесс и позволяет отказаться от высокочувствительных односпинных измерительных устройств, рассматриваемых в схеме Кейна.

В этом состоит основное преимущество ансамблевого варианта. Таким способом может быть преодолена *вторая* трудность схемы Кейна.

Заметим, что, в рассматриваемой схеме открывается возможность отказаться от системы управляющих резонансной частотой кубитов затворов А, если наложить вдоль направления оси x градиент магнитного поля. Для того, чтобы получить для ядерных спинов соседних донорных атомов, отстоящих друг от друга на расстоянии ~ 20 нм, различие резонансных частот в ~ 100 Гц, потребуется вполне приемлемый градиент $dB/dx \sim 1$ Тл/см.

5.4.5. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, обусловленная модуляцией секулярной части сверхтонкого взаимодействия

Как следует из третьего общего требования к полномасштабным квантовым компьютерам, время декогерентизации квантовых состояний кубитов T_D должно быть велико (> 1 с) по сравнению с продолжительностью управляющих радиочастотных импульсов ($\sim 10^{-5}$ с), для того, чтобы можно было выполнить необходимое количество логических операций ($> 10^4$).

Модуляция ядерных спиновых резонансных частот $\Delta\omega(t)$, определяемая секулярной частью сверхтонкого взаимодействия электронных и ядерных спинов донорного атома ^{31}P , описывается выражением

$$\Delta\omega(t) = A(t) S_z(t) - A_0 \langle S_z \rangle, \quad (5.49)$$

где $A(t) = A_0 + \Delta A(t)$, $\Delta A(t)$ — модуляция постоянной сверхтонкого взаимодействия, $A_0/2\pi = 117$ МГц.

Для малой величины амплитуды модуляции выражение (5.49) может быть представлено в виде двух слагаемых, соответствующих двум независимым механизмам адиабатической декогерентизации:

$$\Delta\omega(t) = \Delta\omega_S(t) + \Delta\omega_B(t) = A_0 (S_z(t) - \langle S_z \rangle) + \Delta A(t) \langle S_z \rangle. \quad (5.50)$$

Роль флуктуаций постоянной сверхтонкой структуры, обусловленных флуктуациями потенциала на затворе **A** в квантовом регистре, исследовалась в работе [2.43], где были сделаны оценки для допустимого уровня такого рода шумов в электрической цепи. Этот механизм декогерентизации (назовем его внешним) здесь не рассматривается.

Внутренний механизм декогерентизации, определяемый первым слагаемым в (5.49), был рассмотрен нами в [2.44, 2.45].

Корреляционная функция случайных частот $f_S(t) = \langle \Delta\omega_S(t) \Delta\omega_S(0) \rangle$ определяется флуктуациями электронной спиновой поляризации и зависит от электронной резонансной частоты $\omega_0 = \gamma_S B$, от продольного τ_1 (часы) и поперечного τ_2 времен релаксации. В адиабатическом случае $\omega_0 > 1/\tau_2 \gg 1/\tau_1$ получим

$$\langle \Delta\omega_S(t) \Delta\omega_S(0) \rangle = \langle \Delta\omega_S^2 \rangle \exp(-t/\tau_1) \quad (5.51)$$

и, соответственно, для декремента декогерентизации найдем

$$\Gamma(t) = \langle \Delta\omega_S^2 \rangle \tau_1^2 (t/\tau_1 - 1 + \exp(-t/\tau_1)), \quad (5.52)$$

где

$$\langle \Delta \omega_S^2 \rangle = A^2 (\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2) = A^2 (1 - \text{th}^2(\hbar \omega_0 / 2kT)), \quad (5.53)$$

T — температура решетки.

Для $\tau_1 \approx 10^4$ с и $t \sim T_D \sim 1$ с получим $1 \ll \langle \Delta \omega^2 \rangle \tau_1^2 < (\tau_1 / T_D)^2$, что соответствует немарковским случайным процессам (медленное затухание флуктуаций) или случаю «жесткой решетки». В этом случае

$$\Gamma(t) = \langle \Delta \omega^2 \rangle t^2 / 2, \quad (5.54)$$

откуда характерное время декогерентизации можно оценить из простого соотношения $\langle \Delta \omega^2 \rangle \approx 1 / T_D^2$.

Для значения времени декогерентизации при $\hbar \omega_0 / kT \gg 1$ запишем условие

$$1 / T_D^2 \approx 2A^2 \exp(-\gamma_S \hbar B / kT) < 1 \text{ с}^{-2}, \quad (5.55)$$

откуда найдем, что *необходимое подавление декогерентизации будет достигнуто при достаточно больших значениях* отношения $B/T > 30$ Тл/К, то есть при достаточно высокой степени поляризации электронных спинов. Это соответствует, например, при $B = 3$ Тл температурам решетки $T < 0,1$ К.

Мы видим здесь, что имеется простая возможность «включения» при необходимости быстрого механизма декогерентизации путем временного увеличения рабочей температуры всего ансамбля. Этот прием может быть использован для исключения случайных фазовых множителей при подготовке базисных состояний ансамблевого квантового регистра. Таким способом может быть преодолена *третья* трудность схемы Кейна.

Другим (внутренним) механизмом модуляции постоянной сверхтонкой структуры является взаимодействие донорных атомов с фононами, которое приводит к искажению симметрии потенциала в их окрестности и тем самым изменяет значение эффективной постоянной сверхтонкого взаимодействия. Поскольку однофонная модель адиабатической декогерентизации, как уже отмечалось в подразделе 3.4.2, не является вполне адекватной, мы рассмотрим здесь двухфононную модель, учитывая только один из возможных комбинационных (рамановских) процессов двухфононного рассеяния, не сопровождающегося переворотом спина.

Для этого параметр сверхтонкого взаимодействия запишем в представлении взаимодействия:

$$A(t) = A_0 + \Delta A(t) = \\ = A_0 \left[1 + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{l}} g_{\mathbf{k},\mathbf{l}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{l}} \exp(i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{l}})t) + g_{\mathbf{k},\mathbf{l}}^* b_{\mathbf{l}}^+ b_{\mathbf{k}} \exp(-i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{l}})t) \right], \quad (5.56)$$

где $b_{\mathbf{l}}^+$ и $b_{\mathbf{k}}$ — операторы испускания и поглощения фононов с частотами $\omega_{\mathbf{l}}$ и $\omega_{\mathbf{k}}$, $g_{\mathbf{k},\mathbf{l}} = g_{\mathbf{l},\mathbf{k}}^* \sim (\hbar(\omega_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{l}})^{1/2}/(2NM_0))v^2$ — безразмерная (выражение в подразделе 3.43 без множителя ω_0) постоянная связи с акустическими фононами, v — скорость звука, N — полное число атомов в кристалле, M_0 — масса атома (для простоты рассматривается простая кубическая решетка).

Для описания механизма декогерентизации, описываемого вторым слагаемым в (5.50), удобнее использовать непосредственно функцию $\Gamma(t)$ [2.44].

Учитывая, что при $(\hbar\omega_0/kT) \gg 1$ $\langle S_z \rangle \approx 1/2$, и поступая аналогично тому, как это делалось в разделе 3.43, для скорости изменения декременты декогерентизации получим

$$(d\Gamma(t)/dt) = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{l}} (A/2)^2 |g_{\mathbf{k},\mathbf{l}}|^2 (2n(\omega_{\mathbf{k}}, T)n(\omega_{\mathbf{l}}, T) + n(\omega_{\mathbf{k}}, T) + n(\omega_{\mathbf{l}}, T)) \frac{\sin(\omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}}t)}{\omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}}}. \quad (5.57)$$

Перейдем далее от суммирования по \mathbf{k} к интегрированию по $\omega_{\mathbf{k}}$ и $\omega_{\mathbf{l}}$:

$$\sum_{\mathbf{k}} \dots \rightarrow \frac{9N}{\Omega^3} \int_0^{\Omega} \dots \omega_{\mathbf{k}}^2 d\omega_{\mathbf{k}}, \quad (5.58)$$

где $\Omega = v(6\pi^2)^{1/3}/a = k\Theta/\hbar$ — частота Дебая, a — постоянная решетки.

Учитывая теперь, что при $\omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}} \rightarrow 0$ (упругое рассеяние фононов) под интегралом, можно положить

$$\frac{\sin(\omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}}t)}{\omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}}} \approx \pi\delta(\omega_{\mathbf{k},\mathbf{l}}). \quad (5.59)$$

В результате найдем

$$d\Gamma(t)/dt = \frac{81\pi}{8} (\hbar A_0 / M_0 v^2)^2 (T/\Theta)^7 (k\Theta/\hbar) \int_0^{\Theta/T} \frac{x^6 \exp x}{(\exp x - 1)^2} dx = 1/T_D. \quad (5.60)$$

При $T/\Theta < 10^{-3}$ интеграл в (5.61) приблизительно равен $6! = 720$. Принимая для кремния $\Theta = 625$ К, $a = 5,4 \cdot 10^{-8}$ см, $v = 5 \cdot 10^5$ см/с, $M_0 = 0,46 \cdot 10^{-29}$ Дж·с/см² [2.46], будем иметь

$$1/T_D \sim 0,7 \cdot 10^4 (T/\Theta)^7 \text{ с}^{-1}. \quad (5.62)$$

Таким образом, мы видим, что при низких температурах ($T < 0,1$ К) фононный механизм адиабатической декогерентизации является несущественным по сравнению с *механизмом модуляции сверхтонкого взаимодействия*, обусловленным флуктуациями электронной спиновой поляризации.

5.4.6. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, обусловленная взаимодействием с ядерными спинами примесных атомов

Роль окружающей среды для ядерных спинов в твердом теле могут играть примесные атомы с магнитными моментами. Однако механизм декогерентизации состояний ядерных спинов, связанный с взаимодействием с магнитными моментами примесных парамагнитных атомов, вследствие конечного расстояния до них, является менее существенным по сравнению с механизмом, обусловленным взаимодействием с собственными электронными спинами. Последний механизм при высокой степени поляризации электронных спинов ($BT > 30$ Тл/К) в свою очередь оказывается в значительной степени подавленным.

Рассмотрим здесь модель декогерентизации, в которой ядерный спин взаимодействует с магнитными моментами ядерных спинов случайно распределенных примесных атомов, какими являются не поляризованные в той же степени как электронные спины ядерные спины атомов изотопов ²⁹Si. Диполь-дипольное магнитное взаимодействие, описывается гамильтонианом

$$H_{IS} = \hbar \sum_{i, \alpha\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) I_\alpha I_{\beta, \text{imp}}(\mathbf{r}_i, t), \quad (5.63)$$

где

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\gamma_I \gamma_{I, \text{imp}} \hbar}{r_i^3} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{3r_{i\alpha} r_{i\beta}}{r_i^2} \right), \quad (5.64)$$

$\gamma/2\pi = 108$ МГц/Тл, $\gamma_{I, \text{imp}}/2\pi = -53$ МГц/Тл — гиромагнитные отношения ядерного спина изотопа ³¹P и-изотопа ²⁹Si, \mathbf{r}_i — радиус-вектор расстояния от ядерного спина-кубита до i -го примесного ядерного спина,

$\gamma_{\mathbf{L},\text{imp}} \hbar I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i, t)$ — флуктуирующий магнитный момент примесного атома, создающего случайное локальное поле

$$\Delta B_{\alpha}(t) = - \sum_{i,\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) (I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i, t) - \langle I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i) \rangle) / \gamma_{\mathbf{L}}, \quad (5.65)$$

среднее значение $\langle \gamma_{\mathbf{L}} B_{\alpha}(t) \rangle = \sum_{i,\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) \langle I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i) \rangle$ определяет сдвиг

резонансной частоты кубита.

Функция корреляции для случайной модуляции резонансной частоты ядерного спина будет определяться выражением

$$\langle \Delta\omega(\tau) \Delta\omega(0) \rangle = C_{\mathbf{L},\text{imp}} \int_{\beta} D_{z\beta}^2(\mathbf{r}) (\langle I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}, \tau) I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}, 0) \rangle - \langle I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}) \rangle^2) d\mathbf{r}, \quad (5.66)$$

где $C_{\mathbf{L},\text{imp}}$ — концентрация примесных атомов ^{29}Si (см^{-3}).

В рассматриваемом случае адиабатической декогерентизации выражение для функции корреляции принимает вид

$$\langle \Delta\omega(\tau) \Delta\omega(0) \rangle = \langle \Delta\omega^2 \rangle \exp(-\tau / T_{\text{fl,imp}}), \quad (5.67)$$

где среднеквадратичное значение частоты модуляции

$$\langle \Delta\omega^2 \rangle = C_{\mathbf{L},\text{imp}} \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_{\mathbf{L}} \gamma_{\mathbf{I},\text{imp}} \hbar \right)^2 \frac{16\pi}{15a^3} (\langle I_{z,\text{imp}}^2 \rangle - \langle I_{z,\text{imp}} \rangle^2), \quad (5.68)$$

$$\langle I_{z,\text{imp}}^2 \rangle - \langle I_{z,\text{imp}} \rangle^2 = (1 - \text{th}^2(\gamma_{\mathbf{L},\text{imp}} B \hbar / 2kT_{\mathbf{I}})) / 4, \quad (5.69)$$

a — минимальное расстояние до примесного ядерного спина порядка постоянной решетки. Для кремния $a^{-3} \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$.

Полагая $T_{\text{fl,imp}} \sim 10^4 \text{ с} \gg T_{\text{D}}$ (условие «жесткой решетки») и используя снова требование $T_{\text{D}} > 1 \text{ с}$, для определения допустимой концентрации изотопов ^{29}Si получим условие

$$1/T_{\text{D}}^2 \approx \langle \Delta\omega^2 \rangle = C_{\mathbf{L},\text{imp}} \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_{\mathbf{L}} \gamma_{\mathbf{I},\text{imp}} \hbar \right)^2 \frac{4\pi}{15a^3} ((1 - \text{th}^2(\gamma_{\mathbf{L},\text{imp}} B \hbar / 2kT_{\mathbf{I}})) < 1 \text{ с}^{-2}. \quad (5.70)$$

Для значений $B/T > 30 \text{ Тл/К}$ мы получим весьма жесткое условие для допустимого значения концентрации примесных атомов изотопа ^{29}Si

$C_{I,imp} < 6.10^{15} \text{ см}^{-3}$ ($\sim 10^{-5}\%$). Однако если спиновая температура T_I для ядерных спинов примесных изотопов соответствует значению, при котором имеет место почти полная их поляризация $|\gamma_{I,imp} | B\hbar / kT_I| > 1$, то есть для $T_I < 0,8 \text{ мК}$, то допустимая концентрация изотопов ^{29}Si в естественном кремнии будет $C_{I,imp} \% < 4,5 \cdot 10^{-2} \%$. Она будет быстро увеличиваться при дальнейшем понижении спиновой температуры.

Для сравнения отметим, что естественная распространенность изотопа ^{29}Si в кремнии составляет 4,7 %, а достигнутая в настоящее время степень очистки ^{28}Si составляет около 99,98%, что практически уже может быть достаточным. При этом концентрация других элементов содержащих изотопы с ядерными спинами с распространенностью $P < 100\%$ не должна превышать $\sim 10^{-2}/P \%$.

Заключение:

1. Для инициализации спиновых состояний или необходимого первоначального охлаждения ядерной спиновой системы до спиновых температур менее 1 мК при сохранении температуры решетки в пределах 0,1 К в ансамблевых многокубитовых кремниевых ЯМР квантовых компьютерах с полосковыми затворами могут быть использованы *методы динамической поляризации* типа солид-эффекта.

2. Анализ предложенной планарной структуры кремниевого ансамблевого компьютера показал, что есть возможность создания многокубитового ЯМР квантового компьютера при *числе элементов ансамбля* $N \sim 10^6$ с использованием стандартной техники ЯМР для управления кубитами и измерения их состояний.

3. К основным механизмам декогерентизации квантовых состояний в кремниевых ансамблевых квантовых регистрах следует отнести *адиабатический процесс модуляция резонансной частоты*, обусловленный взаимодействием ядерных спинов-кубитов с флуктуирующими сверхтонкими полями, а также диполь-дипольными взаимодействиями с ядерными спинами примесных атомов.

4. Необходимый уровень подавления декогерентизации может быть достигнут при соблюдении условия для спиновых температур менее 1 мК и при уменьшении концентрации атомов изотопов, содержащих ядерные спины (для изотопа ^{29}Si менее $4,5 \cdot 10^{-2}\%$).

Основные недостатки рассмотренного ансамблевого варианта, как и модели Кейна, связаны с наличием системы затворов. Для реализации рассматриваемой структуры из полосковых затворов по-прежнему требуется нанотехнология с разрешением порядка 1 нм.

6. Многокубитовые ЯМР квантовые клеточные автоматы

6.1. Основные принципы работы ЯМР квантовых клеточных автоматов

Основные принципы твердотельного квантового компьютера, работающего по принципу *клеточного автомата*, были рассмотрены в ряде сообщений [2.47–2.50]. С. Ллойд [2.47, 2.49] рассмотрел *периодическую* структуру из двухуровневых квантовых элементов, в качестве которых могут быть использованы ядерные спины с $I = 1/2$, типа цепочки АВСАВСАВС..., где А, В, С — *три различных типа* ядерных спина с различающимися резонансными частотами. Подразумевается, что атомы с ядерными спинами внедрены в кристаллическую решетку некоторого бесспинового твердого тела. Предполагается также, что система ядерных спинов может быть инициализирована, то есть, переведена каким-либо способом в начальное основное состояние $|0\rangle$. Кроме того, спины располагаются на таком расстоянии друг от друга, которое обеспечивает наличие определенного взаимодействия между соседними спинами и, как следствие этого, наличие зависимости резонансной частоты каждого спина от состояния соседних спинов. Так, например, резонансная частота ω_A спина А принимает значение ω_{01}^A , если спин С слева находится в основном состоянии 0, а спин В справа — в перевернутом состоянии 1. Резонансный π -импульс на частоте ω_{01}^A будет переворачивать *одновременно все спины А* в периодической структуре, у которых спины слева и справа находятся, соответственно, в состояниях 0 и 1. При этом такой процесс является обратимым. Заметим, что в отличие от схем, в которых предполагается включение или выключение взаимодействия для кубитов, участвующих в двухкубитовых операциях, в квантовых автоматах *взаимодействие между любыми соседними кубитами всегда существует* и не предполагает никакого локального контроля.

Каждая ячейка АВС описанной структуры может использоваться для записи информации путем изменения состояния одного спина. В состоянии *логического кубита «0»* все ядерные спины ячейки из *трех* спинов находятся в основном состоянии, а в состоянии логического кубита «1» — один из спинов ячейки находится в метастабильном возбужденном (перевернутом) состоянии. Отметим имеющуюся здесь характерную особенность: когерентные суперпозиции состояний *логических кубитов* выражаются через когерентную суперпозицию только одного из трех

ядерных спинов ячейки. Скорость декогерентизации логического кубита определяется скоростью декогерентизации этого ядерного спина.

Записанная информация далее распространяется посредством сдвигового механизма клеточного автомата. Для этого предлагается использовать каскад унитарных операций обмена SWAP: $A \Rightarrow B$, $B \Rightarrow C$, $C \Rightarrow A$, $A \Rightarrow B \dots$, действующих одновременно на все спины в цепочке. Например, последовательность из π -импульсов с резонансными частотами ω_{10}^B , ω_{11}^B , ω_{01}^A , ω_{11}^A , ω_{10}^B , ω_{11}^B , производит передачу информации записанной на спине А (состояние «1») в некоторой ячейке ABC путем обмена состояниями между примыкающими спинами А и В (для спина А на конце цепочки используется π -импульс на другой частоте) по всей одномерной цепочке. В зависимости от того, в каком состоянии находятся спины С, из шести импульсов работают только одна из троек [2.49].

В такой системе оказывается возможным с помощью соответствующей последовательности импульсов выполнить любую цифровую и квантовую логическую операцию. В этом смысле такой квантовый компьютер является *универсальным*.

Более общая модель твердотельного ансамблевого ЯМР квантового клеточного автомата была описана в сообщении [2.48], где рассматривалась периодическая структура типа ABCABCABC... в двух- и трехмерных структурах с ядерными спинами трех различных типов. Предполагается, что атомы с ядрами $I = 1/2$ внедрены в кристаллическую решетку некоторого соединения с бесспиновыми ядрами. Кроме того, кристалл содержит вспомогательные примесные атомы D с ядерным спином $1/2$, располагающиеся вблизи некоторых спинов А и имеющие отличную от всех других ядерных спинов резонансную частоту. Им может быть, в частности, один из трех атомов основного состава, если находится на конце одномерной структуры, где он имеет только одного соседа с одной стороны. Этот примесный атом будет служить *портom* для ввода и вывода информации, а малое окружение его из десятков ABC-единиц будет образовывать одну искусственную «молекулу» с десятками кубитов в одномерном случае, состояние которых кодируется только на трех различных типах спинов. Информация в такую систему вводится путем установления соответствующего состояния для D-спинов, с которых она передается с помощью операции SWAP соседним А-спинам. Все операции будут выполняться селективным образом с помощью радиочастотных импульсов, если резонансные частоты соседних спинов достаточно различимы. После передачи информации D-спин возвращается в свое исходное основное состояние. Считывание состояния любого кубита

в этом случае предполагается осуществлять путем передачи информации о его состоянии ближайшему D-спину и последующего измерения его состояния.

Если перейти к трехмерным легированным структурам, то ближайшее окружение каждого примесного атома D во всех трех измерениях, которое будет представлять собой своего рода искусственную молекулу-компьютер, может содержать *более тысячи* кубитов. Независимые ЯМР квантовые компьютеры на таких трехмерных «молекулах» при выполнении всех операций будут работать параллельно, осуществляя тем самым *ансамблевый принцип* работы квантового компьютера.

При достаточно низких температурах, когда все спины находятся в начальный момент в основном состоянии (инициализированы), в таком ЯМР квантовом компьютере не возникает трудностей, связанных с экспоненциальным уменьшением измеряемого сигнала с ростом числа кубитов в «молекуле». Даже при более высоких температурах ЯМР квантовый автомат является хорошим кандидатом для создания многокубитового квантового компьютера при использовании методов динамической поляризации ядерных спинов, поскольку не потребуются концентрации соответствующих воздействий в малых областях нанометровых размеров, как в вариантах компьютеров с индивидуальным обращением к кубитам.

Детектирование состояния D-спинов в достаточно большом ансамбле искусственных «молекул» можно также производить с помощью методов ЯМР.

Позднее С. Бенжамин [2.50] показал, что для построения квантового компьютера, работающего на принципе клеточного автомата, достаточно *только двух* разных типов двухуровневых элементов — физических кубитов A и B, в частности, ядерных спинов, отличающихся резонансными частотами. Пусть каждый спин имеет основное $|\downarrow\rangle$ и перевернутое возбужденное $|\uparrow\rangle$ состояния, которые могут образовывать и квантовую суперпозицию. В исходном состоянии состояния всех спинов инициализированы, то есть вся структура находится в состоянии $|\downarrow_A \downarrow_B \downarrow_A \dots \downarrow_B\rangle$, подобном двухподрешеточному ферромагнетику. Для кодирования битов квантовой информации здесь предлагается использовать состояние не трех, а четырех примыкающих спинов. Так, логические состояния «0» и «1» представляются состояниями ячейки из *двух пар* спинов, соответственно, $|\uparrow_A \uparrow_B \downarrow_A \downarrow_B\rangle$ и $|\downarrow_A \downarrow_B \uparrow_A \uparrow_B\rangle$. Использование операций SWAP на основе соответствующих последовательностей радиочастотных импульсов позволяет и в этом случае выполнять над ними как однокубитовые так и двухкубитовые операции.

В качестве порта, где вводится и выводится информация, может быть использован некоторый донорный атом с отличающейся резонансной частотой или затвор над соответствующим исходным донором, с помощью которого контролируется его резонансная частота.

Таким образом, легирование примесями трехмерной сверхрешетки из ядерных спинов позволяет создать твердотельные *квантовые автоматы с высокой интеграцией*, в которых весь кристалл будет представлять собой большой ансамбль идентичных параллельно работающих квантовых компьютеров.

Заметим, однако, что вариант с *чередующимися резонансными частотами, но с одинаковым направлением* ядерных спинов, на наш взгляд, мало пригоден в качестве ансамблевого ЯМР квантового клеточного автомата. Из-за наличия отличной от нуля полной намагниченности система в основном состоянии будет *чувствительна* как к случайным внешним магнитным полям, так и к граничным условиям. Предпочтительнее представляются системы с антиферромагнитным упорядочением спинов в основном состоянии.

В рассмотренных вариантах основным технологическим процессом является выращивание соответствующих кристаллических структур. Роль нанотехнологии сводится к минимуму, например, для создания только затворов над атомами, играющими роль портов или для внедрения атомов с отличающейся ядерной резонансной частотой, служащих портами для ансамблевого ввода и вывода информации.

Преимущества ансамблевого квантового клеточного автомата по сравнению с ансамблевым вариантом с полосковыми затворами состоит в следующем:

а) Отсутствие системы управляющих затворов существенно упрощает технологию изготовления структуры компьютера и исключает один из связанных с ними существенных источников декогерентизации.

б) Кодирование логических кубитов на группе физических кубитов обеспечивает более высокую степень помехозащищенности проводимых логических операций.

К недостаткам квантовых автоматов можно отнести сравнительно сложную организацию логических операций над логическими кубитами.

Заключение: Предложенные варианты твердотельного ЯМР ансамблевого квантового компьютера для создания соответствующих структур требует, как правило, использования сверхточной нанотехнологии, а варианты на естественных кристаллах, свободные от подобных технологических проблем, имеют другую трудность, поскольку предполагают ис-

пользовать слишком большие градиенты магнитного поля для получения необходимого различия резонансных частот у соседних спинов.

В связи с этим весьма перспективным представляется направление по разработке ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров с использованием *принципов квантового клеточного автомата*, что позволяет избежать создания сложных структур нанометрового масштаба, а также не требует больших градиентов магнитного поля.

Переход к схеме квантовых клеточных автоматов, возможно, позволит преодолеть *четвертую, пятую и шестую* трудности схемы Кейна.

6.2. ЯМР квантовый клеточный автомат на основе одномерного изинговского антиферромагнетика

В качестве одного из альтернативных вариантов ансамблевого квантового клеточного автомата может быть предложен вариант, использующий структуры с антиферромагнитно упорядоченными электронными спинами [2, 2.51, 2.52].

Рассмотрим здесь простую модель одномерного антиферромагнетика, в которой каждый элемент представляется магнитным атомом, имеющим один электронный и один ядерный спин $I = 1/2$, связанные сверхтонким взаимодействием. Примером такой структуры является рассмотренная выше цепочка донорных атомов ^{31}P Кейна без затворов с расстоянием между атомами l_x , при котором волновые функции основных электронных состояний доноров перекрываются (рис. 2.3).

Если постоянная обменного взаимодействия $J(l_x)/2\pi \geq \gamma_B/2\pi \sim 538$ ГГц ($B \sim 3$ Тл), что соответствует расстоянию между донорами $l_x \sim 20$ нм, то критическая температура Нееля для антиферромагнитного упорядочения электронов $T_N \sim \hbar J/k > 4$ К ($\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с/рад, $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К). В то же время, как для ядерного спинового упорядочения необходимы исключительно низкие спиновые температуры $T_1 < \hbar I_x/k \sim \hbar A^2/Jk \sim 10^{-5}$ К ($I_1 \sim A^2/J$ – постоянная косвенного взаимодействия двух ядерных спинов). Различие резонансных частот по-разному ориентированных соседних ядерных спинов составляет $\Delta\omega/2\pi \sim I_x/2\pi \sim 0,5$ МГц, тогда как резонансная частота $\omega/2\pi \sim 120$ МГц.

В магнитных полях $B < A/(2\gamma_B) \sim 3$ Тл и при температурах $T \sim 10^{-3}$ К ядерные спины атомов в каждой из подрешеток А и В антиферромагнитной цепочки будут ориентироваться в своем локальном поле в соответствии с ориентацией электронных спинов и образовывать в основном со-

стоянии периодическую структуру типа АВАВ...: $\begin{matrix} \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \dots \\ \text{В} & \text{А} & \text{В} & \text{А} & \text{В} & \text{А} & \text{В} & \end{matrix}$,

где $|\uparrow\rangle$ обозначает основное инициализированное состояние ядерного спина в положении А, а $|\downarrow\rangle$ — основное состояние ядерного спина в положении В, то есть мы получаем *гомоядерную* систему спинов с *двумя различными основными состояниями*.

Электронные спины S : $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$

Ядерные спины I : $\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$

Отличие такого состояния от антиферромагнитно упорядоченного состояния ядерных спинов состоит в том, что оно возникает благодаря чередующимся по направлению значениям локальных полей, создаваемых внешним полем и электронными магнитными моментами атомов, а не в результате взаимодействия между спинами.

Соответственно, ядерные спины в одномерной цепочке АВАВ... будут иметь *чередующиеся значения ядерных резонансных частот* $\omega_{\text{А,В}}$, которые, кроме того, зависят от магнитных квантовых чисел $\pm 1/2$ для состояний *соседних ядерных спинов слева* m_{\leftarrow} *и справа* m_{\rightarrow} . Предполагая далее, что взаимодействие между ядерными спинами имеет *изинговский вид*, запишем для этих частот выражение (знаки + и – соответствуют частотам $\omega_{\text{А}}$ и $\omega_{\text{В}}$)

$$\omega_{\text{А,В}}(m_{\leftarrow} + m_{\rightarrow}) \approx \left| -\gamma_{\text{I}} B \pm A/2 - I_{\text{А,В}}(m_{\leftarrow} + m_{\rightarrow}) \right|, \quad (6.1)$$

где $I_{\text{А,В}}$ — постоянная изинговского спин-спинового взаимодействия (см. далее подраздел 6.6.2).

Ядерные спины в положениях А и В в этой схеме помимо основного состояния имеют, соответственно, перевернутые состояния $|\downarrow\rangle$ и $|\uparrow\rangle$. Как уже отмечалось, время жизни (спин-решеточное время релаксации T_1) таких состояний при низких температурах очень велико, и, тем самым обеспечивается их хорошая метастабильность.

Для организации ЯМР вычислительных операций в рассматриваемой структуре воспользуемся способом обращения к кубитам, аналогичным первоначально предложенному С. Бенжамином для цепочки из двух типов кубитов с чередующимися резонансными частотами в [2.50].

Каждый *логический кубит* информации будем представлять состояниями *четырёх* элементов. Основное состояние логического кубита «0»

представим ячейкой $\overline{\overline{\begin{matrix} \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow \\ \text{А} & \text{В} & \text{А} & \text{В} \end{matrix}}}$, тогда как состояние «1» — ячейкой

$\overline{\overline{\begin{matrix} \uparrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow \\ \text{А} & \text{В} & \text{А} & \text{В} \end{matrix}}}$ [2,51]. Заметим, что оба состояния содержат два возбужденных состояния и имеют *нулевую проекцию* полного ядерного спина.

Ввод и вывод информации из цепочки ядерных спинов должен производиться на конце цепочки, где ядерный спин имеет только один соседний спин (пусть это будет спин в положении А на левом конце). Этот спин имеет резонансную частоту $\omega_A(-1/2)$ ($m_z + m_z = -1/2$) (см. таблицу), отличающуюся от резонансных частот других спинов в положении А.

Таблица. π -импульсы для спинов в состояниях А и В

Соседние спиновые состояния для спина А	А ↓	↓ А ↓	↓ А ↑	↑ А ↓	↑ А ↑
Резонансная частота $\omega_A(m_z + m_z)$	$\omega_A(-1/2)$	$\omega_A(-1)$	$\omega_A(0)$	$\omega_A(0)$	$\omega_A(1)$
$\pi_{A, m_z + m_z}$ -импульсы	$\pi_{A, -1/2}$	$\pi_{A, -1}$	$\pi_{A, 0}$	$\pi_{A, 0}$	$\pi_{A, 1}$
Соседние спиновые состояния для спина В	В ↑	↑ В ↑	↑ В ↓	↓ В ↑	↓ В ↓
Резонансная частота $\omega_B(m_z + m_z)$	$\omega_B(1/2)$	$\omega_B(1)$	$\omega_B(0)$	$\omega_B(0)$	$\omega_B(-1)$
$\pi_{B, m_z + m_z}$ -импульсы	$\pi_{B, 1/2}$	$\pi_{B, 1}$	$\pi_{B, 0}$	$\pi_{B, 0}$	$\pi_{B, -1}$

Соответствующий селективный резонансный радиочастотный $\pi_{A, m_z + m_z} = \pi_{A, -1/2}$ -импульс будет переворачивать только этот один ядерный спин на конце цепочки (в положении А), не влияя на все другие. Затем подается новый селективный радиочастотный $\pi_{B, 0}$ -импульс, который переворачивает следующий ядерный спин (в положении В), с противоположными ориентациями соседних ядерных спинов ($m_z + m_z = 0$) и, соответственно, с другой резонансной частотой, отличной от частоты спинов, соседние ядерные спины которых в это время находятся в основном состоянии ($m_z + m_z = \pm 1$).

Таким образом, состояние логического кубита «0», то есть "0"

$\overline{\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow}$, формируется следующим образом (π_A -импульсы действуют слева на один раз подчеркнутые спины, затем действуют π_B -импульсы на дважды подчеркнутые):

$$\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \pi_{A, -1/2} \\ \underline{A} \quad \underline{B} \quad \underline{A} \quad \underline{B} \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \pi_{B, 0} \\ \underline{\underline{A}} \quad \underline{\underline{B}} \quad \underline{\underline{A}} \quad \underline{\underline{B}} \end{array} \Rightarrow \overline{\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots} \quad (6.2)$$

Состояние логического кубита «1» на краю цепочки формируется с помощью еще трех радиочастотных импульсов: сначала $\pi_{A,0}$, затем $\pi_{A,1/2}$ и $\pi_{B,0}$ -импульсов:

$$\overline{\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots \pi_{A, 0}} \Rightarrow \begin{array}{c} \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \dots \pi_{A, 1/2} \\ \underline{\underline{A}} \quad \underline{\underline{B}} \quad \underline{\underline{A}} \quad \underline{\underline{B}} \end{array}, \pi_{B, 0} \Rightarrow \overline{\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \dots} \quad (6.3)$$

Заметим, что для образования грубой ошибки в записанной информации, например, типа «0» \Rightarrow «1», следует перевернуть одновременно все четыре спина. Это значит, что рассмотренный способ кодирования состояний логических кубитов обладает *повышенной помехозащищенностью* по отношению к ошибкам такого типа.

Дальнейшее перемещение состояний кубитов по цепочке осуществляется с помощью последовательности пар импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \dots$, представляющих операции **SWAP**:

$$\overline{\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \dots \pi_{A, 0}, \pi_{B, 0}} \Rightarrow \overline{\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \dots \pi_{A, 0}, \pi_{B, 0}} \Rightarrow (6.4)$$

Роль атомов-портов на конце цепочки могут играть, как в случае, рассматривавшемся в [2.48], примесные атомы D в некоторых местах цепочки с отличающейся резонансной частотой. В полностью инициализированное состояние ядерных спинов информация вводится переводом ядерного спина атома D в требуемое состояние с помощью импульса на его резонансной частоте. Состояние ядерного спина ближайшего к примесному атому создается затем с помощью операции **SWAP**.

При использовании ансамбля достаточно большого числа параллельно работающих линейных цепочек состояние ядерных спинов может быть измерено методами ЯМР. Реально линейные одномерные цепочки даже при низких температурах имеют конечную длину и могут содержать ограниченное число логических кубитов. Поэтому для увеличения числа логических кубитов в отдельной «искусственной молекуле», подходящихся на один порт до $> 10^3$, можно перейти к двумерным и трехмерным структурам.

Такие структуры можно рассматривать как систему антиферромагнитно упорядоченных цепочек. В рассматриваемом случае при $J(l_y) \neq J(l_x) > \gamma_S B$ электронные спины будут образовывать двухмерную антиферромагнитную структуру с шахматным порядком в ориентации электронных спинов и, соответственно, ориентированных ядерных спинов. Резонансные частоты соседних ядерных спинов будут различаться в зависимости от ориентации соседних спинов и значений постоянных взаимодействия внутри цепочек и между цепочками.

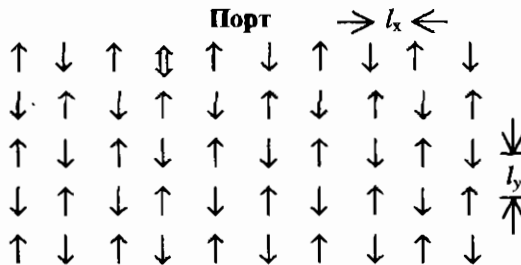


Рис. 2.8. Двухмерная структура с шахматным порядком ориентации электронных спинов.

В результате открывается возможность с помощью соответствующей последовательности импульсов перемещать логические кубиты в любое место этой двухмерной структуры.

Далее, в разделе 6.6, рассматриваются варианты с естественными кристаллическими антиферромагнитными структурами.

6.3. Организация логических операций в квантовом ЯМР клеточном автомате

Рассмотрим часть одномерной цепочки спинов (рис. 2.9), которая содержит три логических кубита в состояниях «1», «0» и «1». Кроме

логических кубитов, представляемых четырьмя спинами, как и в [2.50], введем вспомогательную *контрольную единицу* **CU**, представляемую

шестью спинами в следующих состояниях $\begin{array}{c} \text{CU} \\ \hline \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow \\ \text{B A B A B A} \end{array}$. Отдельные

логические кубиты в цепочке должны быть пространственно отделены друг от друга на число состояний ядерных спинов в основном состоянии, *кратное четырем* (по два для каждого типа).

Поэтому на каждый кубит в цепочке приходится минимум восемь основных спиновых состояний (четыре для кодирования и четыре для пространственного разделения). Контрольная единица располагается в определенном месте цепочки и отделена от ближайшего кубита *нечетным числом* спинов, находящихся в основном состоянии.

В результате под действием последовательности пар импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \dots$ логические кубиты перемещаются вправо, а контрольная единица **CU** влево. После стадии, отмеченной на рис. 2.9 одной звездочкой *, в результате действия дальнейшей обменной последовательности пар импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{B,0}$ контрольная единица проходит логические кубиты в состояниях «1» и «0», оставляя их после взаимодействия *неизменными*, и продолжает двигаться влево.

В тот момент, когда **CU** достигает середины пути при прохождении рассматриваемого кубита «1» (этап, отмеченный звездочкой* на рис. 2.9), операции **SWAP** прерываются и включается другая *последовательность* (не **SWAP**) из *шести* импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,-1}, \pi_{B,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}$ (рис. 2.10), подготавливающая выполнение однокубитовой унитарной операции.

Для выполнения *однокубитовых операций* используются унитарные операторы $U_{A,1}$ и $U_{B,-1}$, действующие только на отдельный спин в положении A и B с резонансными частотами, соответствующими *одинаковым перевернутым состояниям* обоих соседних ядерных спинов.

Знак «+» относится к случаю, когда в перевернутых состояниях $|\uparrow\rangle$ находятся оба соседних спина B, и знак «-», когда в перевернутом состоянии $|\downarrow\rangle$ находятся соседние спины A (см. таблицу). Заметим, что если оператор **U** является простой инверсией состояния (оператор **iNOT**), то действие $U_{A,1}$ и $U_{B,-1}$ будет идентично действию импульсов $\pi_{A,1}$ и $\pi_{B,-1}$.

После подготовительной последовательности импульсов, представленной на рис. 2.10, выполняется операция $U_{A,1}$, осуществляющая поворот в двумерном гильбертовом пространстве вектора основного состояния спина в положении A, находящегося между перевернутыми спинами

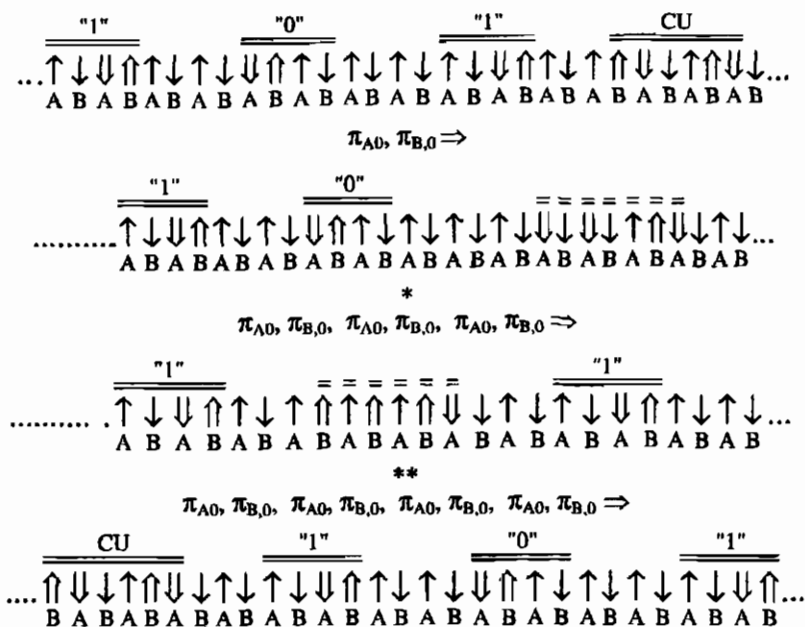


Рис. 2.9. Схема действия последовательности импульсов, осуществляющих обменные операции **SWAP** над логическими кубитами. Штриховые черты сверху обозначают область, где происходит пересечение логических кубитов «1» и «0» и контрольной единицы **CU**.

В ($m_< + m_> = 1$). В результате образуется суперпозиция:

$$\begin{matrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \text{В} & \text{А} & \text{В} \\ \text{U} \end{matrix} = \text{U}_{A,1} |\uparrow\rangle = a |\uparrow\rangle + b |\downarrow\rangle, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (6.5)$$

Далее, за унитарной операцией $\text{U}_{A,1}$, выполняется та же полная последовательность импульсов, но в *обратном порядке*. При этом контрольная единица **CU** возвращается в исходное начальное состояние (первая строка на рис. 2.9), а начальное состояние логического кубита «1» переходит в суперпозицию состояний:

$$\begin{matrix} \uparrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow \\ \text{А} & \text{В} & \text{А} & \text{В} \end{matrix} \Rightarrow |\psi\rangle = a \begin{matrix} \uparrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow \\ \text{А} & \text{В} & \text{А} & \text{В} \end{matrix} + b \begin{matrix} \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow \\ \text{А} & \text{В} & \text{А} & \text{В} \end{matrix}, \quad (6.6)$$

которая перемещается влево.

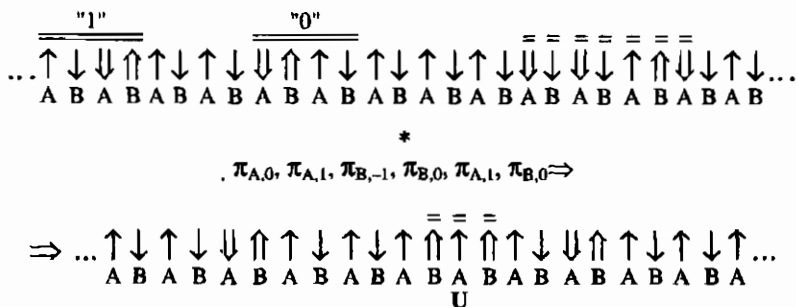


Рис. 2.10 Схема дополнительной вычислительной импульсной последовательности после стадии *. Унитарная операция $U_{A,1} | \uparrow \rangle$ обозначается как

$$\begin{array}{c} \uparrow \uparrow \uparrow \\ \text{B A B} \\ \text{U} \end{array}$$

Таким образом, контрольная единица **SU** вместе с дополнительной вычислительной последовательностью импульсов осуществляет однокубитовую операцию образования суперпозиции двух состояний логического кубита. Заметим, что в целом такая операция потребовала применения *семнадцати* элементарных π -импульсов.

Для выполнения *двухкубитовой операции* потребуется применение другой более длительной последовательности импульсов.

Так, при выполнении операции **CNOT** она должна быть такой, чтобы, проходя контролирующий логический кубит в состоянии «0», контрольная единица **SU** изменяла свою форму таким образом, что после последующего прохождения контролируемого кубита, последний не изменял своего состояния, а проходя контролирующий логический кубит в состоянии «1» **SU** по-другому изменяла свою форму и производила инверсию его состояния при последующем прохождении контролируемого кубита (пример последовательности импульсов, выполняющих операцию **CNOT**, приведен в **Приложении ПЗ**).

6.4. ЯМР квантовый клеточный автомат с несимметричным взаимодействием ядерного спина с соседними спинами

Вместо системы искусственных молекул в виде цепочек из донорных атомов можно рассмотреть также органические кристаллы с диэлектрическими свойствами при низких температурах, состоящие из слабо взаимодействующих между собой *квазидномерных цепочек*.

Например, ими могут быть сравнительно хорошо изученные цепочки полиацетилена [2.53] с химической структурой (изотопы ^{12}C со спином $I = 0$), изображенной на рис. 2.11 и с *антиферромагнитным* упорядочением спинов электронов, осуществляющих связь атомов водорода с атомами углерода. При достаточно сильном сверхтонком взаимодействии спинов протонов с собственными электронами и низких температурах в такой системе возможно образование чередующейся начальной поляризации протонов.

Особенность такой структуры состоит в *несимметрии косвенного взаимодействия* отдельного ядерного спина А с правым I_{AB} и левым I_{BA} соседним ядерным спином, возникающей за счет одинарных и двойных химических связей.

В этом случае, даже при наличии недиагонального в вычислительном базисе взаимодействия между спинами, приводящему к неконтролируемости базисных состояний, организация квантовых вычислений *существенно упрощается*, если воспользоваться схемой, также недавно предложенной С. Бенжамином [2.54]. Им была рассмотрена одномерная цепочка из двух разных типов кубитов типа АВАВАВ... с чередующимися по величине взаимодействиями между кубитами А–В и В–А в цепочке. Согласно этой схеме, производится попеременное выключение и включение правых (А–В) *или* левых (В–А) взаимодействий *одновременно у всех кубитов цепочки*. В результате в системе образуется либо фаза α из развязанных А–В, либо фаза β из развязанных В–А пар.

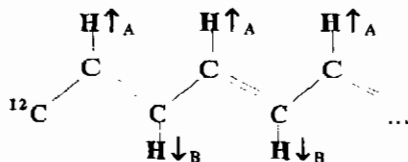


Рис. 2.11. Химическая структура полиацетилена.

На всех парах каждой фазы одновременно могут выполняться любые двухкубитовые операции. При этом роль как логических кубитов, так и контрольной единицы **SU** играют, в отличие от предыдущего случая, не группы, а отдельные кубиты. В парах А–В только кубиты в положении А представляют логические кубиты, а контрольную единицу **SU** кубит в состоянии «1» в положении В одной из пар. После проведения операции $\text{SWAP}_{\text{A-B}}$ для каждой взаимодействующей пары, например А–В, производится переключение правых и левых взаимодействий, а затем

операция SWAP_{B-A} производится для $B-A$ пар. При этом состояние логического кубита перемещается по регистру направо, а контрольная единица CU налево (рис. 2.12).

$$\begin{aligned}
 \alpha &: \underline{0_A 0_B} \quad \underline{0_A 0_B} \quad \overset{\text{"1"}}{\underline{1_A 0_B}} \quad \underline{0_A 0_B} \quad \overset{\text{CU}}{\underline{0_A 1_B}} \quad \underline{0_A 0_B} \Rightarrow \text{SWAP in AB} \Rightarrow \\
 \beta &: \underline{0_A} \quad \underline{0_B 0_A} \quad \underline{0_B 0_A} \quad \underline{1_B 0_A} \quad \underline{0_B 1_A} \quad \underline{0_B 0_A} \quad 0_B \Rightarrow \text{SWAP in BA} \Rightarrow \\
 \alpha &: \underline{0_A 0_B} \quad \underline{0_A 0_B} \quad \underline{0_A 0_B} \quad \underbrace{1_A 1_B} \quad \underline{0_A 0_B} \quad \underline{0_A 0_B} \Rightarrow U(\text{"1"}) = U1_A
 \end{aligned}$$

Рис. 2.12. Схема выполнения операций перемещения состояния логического кубита «1» и контрольной единицы CU под действием операций SWAP и чередующихся операций развязки пар кубитов до момента выполнения логической операции $U1$.

Последовательность таких операций приведет, в конце концов, к тому, что CU достигает логического кубита, и тогда с логическим кубитом проводится требуемая контролируемая однокубитовая операция U . Затем производится обратная последовательность операций, кроме U . Преобразованный кубит и CU возвращаются на первоначальные места в регистре. Несколько более сложной оказывается двухкубитовая контролируемая операция. Такая схема позволяет значительно уменьшить число резонансных импульсов по сравнению с рассмотренным случаем в предыдущем разделе. Для выполнения однокубитовых операций, например, теперь достаточно *шести* импульсов.

Усложнение здесь связано с необходимостью переключения левых и правых взаимодействий. В качестве одного из способов переключений взаимодействий в таких системах автор, в частности, предлагает использовать общие электрические электроды, которые бы изменяли степень перекрытия волновых функций электронов одновременно у соответствующих пар кубитов.

Очевидно, что предложенная в [2.54] схема, непосредственно переносится и на рассматриваемые нами антиферромагнитные гомоядерные структуры.

Введем обозначения для логических кубитов и контрольной единицы в этом случае «0»: $0_A 0_B \equiv \uparrow_A \downarrow_B$, «1»: $1_A 0_B \equiv \downarrow_A \downarrow_B$, CU : $0_A 1_B \equiv \uparrow_A \uparrow_B$. Резонансные частоты ядерных спинов, соответствующие положениям A и B в парах AB и BA , определяются теперь выражением

$$\omega_{A,B} (AB (BA)) \approx \left| \gamma_B \pm A/2 - I_{AB (BA)} m_B \right|, \quad (6.7)$$

где знаки + и – относятся к положениям А и В. Кроме того, резонансные частоты зависят от того в какой из развязанных пар находятся ядерные спины.

Однако в этой схеме квантового автомата для выключения и включения указанных взаимодействий можно было бы, как нам представляется, *обойтись и без электрических электродов*. Для этого можно было бы, учитывая различие частот в разных парах, воспользоваться известным в ЯМР *методом развязки (decoupling)* состояний ядерных спинов [2.55].

Роль элементарной ячейки в двухподрешеточной периодической структуре играет пара ячеек из двух спинов, принадлежащих разным подрешеткам, связанных между собой взаимодействием, отличающимся от косвенного обменного взаимодействия внутри пары. Это взаимодействие, приводит к снятию вырождения четырех уровней у пары двухспиновых систем. При переходе к периодической квазиодномерной цепочке соответствующие уровни превращаются в зоны с шириной, определяемой взаимодействием между ядерными спинами соседних ячеек [2.56].

Для окончательной оценки перспективности использования методов развязки в системах с таким сложным характером спинового спектра потребуется проведение детальных как теоретических, так и экспериментальных исследований по определению спектра ЯМР, ширины отдельных линий и времен релаксации подобных органических структур с антиферромагнитным упорядочением электронных спинов.

6.5. ЯМР квантовый клеточный автомат на периодической структуре из эндоэдрально легированных фуллеренов

Вариант квантового ЯМР клеточного автомата на линейных цепочках типа АВ АВ... из двух типов чередующихся эндоэдрально легированных изотопами ^{15}N и ^{31}P , имеющими, соответственно, ядерный спин $I = 1/2$, фуллеренах C_{60} был предложен Дж. Твамли [2.57]. Эндоатомы располагаются в геометрическом центре клетки фуллерена, их основное электронное состояние является кваттетом $S = 3/2$. Предполагается разместить такие клетки на некоторой поверхности кремния вплотную друг к другу на расстоянии между атомами ~ 1 нм. Электронные волновые функции сильно сжаты внутри клеток C_{60} , поэтому электронное обменное взаимодействие между эндоатомами отсутствует. Отдельные клетки хорошо экранированы от внешних электрических полей и, следовательно, защищены от электрических помех. Очень резкие ЭПР спектры этих

молекул показывают, что продольные времена релаксации при $T \sim 7\text{K}$ составляют $\sim 1\text{ с}$, а поперечные, независимо от температуры, $\sim 20\text{ мкс}$.

Однако клетки C_{60} не ограничивают магнитных диполь-дипольных взаимодействий между электронными спинами эндоатомов. Предполагая их слабыми и пренебрегая диполь-дипольными взаимодействиями ядерных спинов, запишем модельный гамильтониан электрон-ядерной спиновой системы пары АВ ($A = {}^{15}\text{N}@C_{60}$, $B = {}^{31}\text{P}@C_{60}$) в виде (знак \otimes опущен)

$$\mathbf{H} = \omega_S \mathbf{S}_{Az} - \omega_A \mathbf{I}_{Az} + A_A \mathbf{S}_{Az} \mathbf{I}_{Az} + \omega_S \mathbf{S}_{Bz} - \omega_B \mathbf{I}_{Bz} + A_B \mathbf{S}_{Bz} \mathbf{I}_{Bz} + J \mathbf{S}_{Az} \mathbf{S}_{Bz}, \quad (6.8)$$

где $J/2\pi \sim 50/r^3\text{ МГц}$, постоянные сверхтонкого взаимодействия для эндоатомов $A_A/2\pi = 21,2\text{ МГц}$ и $A_B/2\pi = 136,4\text{ МГц}$ (для ${}^{31}\text{P}$ в кремнии $A/2\pi = 116\text{ МГц}$).

Из четырех электронных спиновых состояний эндоатомов выделяются два состояния с $M_S = \pm 1/2$ «внутренний электронный кубит», не запутываемые с другими двумя с $M_S = \pm 3/2$ в приближении (6.8). В статье [2.57] рассматривается вариант, когда в цепочке АВ АВ... квантовая информация записывается на состояниях ядерных спинов. Поскольку ядерные спины связаны только с электронными спинами собственных атомов посредством сверхтонкого взаимодействия, то это позволяет сохранять информацию на состояниях ядерных спинов в течение очень большого времени между логическими операциями.

При выполнении логической квантовой операции \mathbf{U} внутренние электронные кубиты используются в качестве локальной «шины», по которой передается квантовая информация, записанная на ядерных спинах.

Алгоритм выполнения квантовых операций в общих чертах состоит в следующем [2.57]:

а) Квантовая информация записывается на состояниях ядерных спинов молекул А и В при сохранении основных электронных состояний.

б) Производится обмен квантовой информации (электрон-ядерная операция **SWAP**), записанной во всех молекулах В от их ядер к их электронным внутренним кубитам.

в) Для выполнения унитарной операции \mathbf{U} над некоторыми выделенными молекулами А производится инверсия состояний электронных кубитов у всех молекул А при условии сохранения имеющихся состояний соседних электронных кубитов В.

г) Производится обратный обмен информацией от электронов к ядерным спинам (операция **SWAP**) молекул В. В этот момент все внутренние электронные кубиты возвращаются в свое основное состояние, за исключением выделенных молекул А.

д) Производится операция контролируемое U (например, электрон-ядерная операция **CNOT**) над ядерными спинами всех молекул, внутренние электронные состояния которых используются как контролируемые.

е) Наконец, выполняются в обратном порядке операции г), в), б). Все внутренние электронные кубиты возвращаются в исходное состояние, а состояния ядерных спинов теперь соответствуют проведенной операции U . Система готова к следующим операциям.

Мы видим, что число резонансных импульсов остается большим.

Преимущество рассматриваемого варианта клеточного автомата состоит в том, что выходной сигнал можно выразить через состояния электронных спинов. Поэтому считываемый сигнал будет в ~ 1000 раз интенсивнее, чем от состояний ядерных спинов. Для измерения состояний отдельных кубитов при индивидуальном подходе в [2.57] предлагаются различные высокочувствительные методы.

При наличии несомненных преимуществ рассмотренного варианта квантового клеточного автомата на фуллеренах он не свободен от недостатков, связанных с наличием ряда трудностей, в частности :

а) Организация отдельных вычислительных операций требует использования большого числа селективных радиочастотных и СВЧ резонансных импульсов.

б) Гетероядерные структуры с двумя типами, содержащими ядерные спины эндоатомов, содержат изотоп ^{15}N , который имеет распространенность в природе 0,366 %, а бесспиновый изотоп ^{12}C имеет распространенность 98,9 %. Это может привести к процессам декогерентизации ядерных спиновых состояний, если не прибегать к глубокой очистке материалов от нежелательных изотопов.

в) Наличие отличной от нуля полной намагниченности электронных и ядерных спинов инициализированного состояния приводит к чувствительности всей системы к внешним магнитным полям и граничным условиям и появлению неконтролируемых фазовых множителей.

г) Однако, к главному недостатку следует отнести предполагаемое *индивидуальное обращение* к кубитам, играющим роль портов, через которые вводится и выводится информация.

Для преодоления последних трех трудностей, как нам представляется, перспективным является переход к *гомоядерной схеме*, когда все фуллерены содержат только атомы фосфора, а диполь-дипольное взаимодействие между электронными спинами способно обеспечить *антиферромагнитное упорядочение* электронных спинов, подобно тому, как это обсуждалось выше для донорных атомов фосфора. В этом случае ре-

зонансные частоты ядерных спинов эндоатомов могут чередоваться в соответствии с ориентацией электронных спинов. Намагниченность инициализированного состояния всей системы будет отсутствовать.

Кроме того, перспективным представляется также использование *ансамблевого подхода* для того, чтобы можно было не прибегать к исключительно тонким методам измерения состояний индивидуальных кубитов.

Заключение: К преимуществам квантовых клеточных автоматов, независимо от предлагаемых конкретных схем, можно отнести следующее:

а) Глобальное обращение ко всем элементам цепочки кубитов позволяет исключить многочисленные металлические шины, затворы и многочастотные генераторы импульсов, требуемые для локального управления кубитами, в результате чего существенно упрощается конструкция квантового регистра, исчезает механизм декогерентизации, связанный с электрическими шумами.

б) Сложности, связанные с конструированием компьютера и организацией квантовых операций, переносятся на программное обеспечение квантового клеточного автомата.

в) Квантовые клеточные автоматы, возможно, будут способны выполнять программы, которые не доступны обычным квантовым схемам. Например, как утверждается в статье [2.58], операции, построенные из определенного числа двухкубитовых операций **CNOT** и однокубитовых операций Адамара, относящиеся к группе Клиффорда, на квантовом автомате типа одностороннего (*one-way*) квантового компьютера могут быть выполнены за *один шаг*.

г) Важным свойством квантовых автоматов является возможность запараллелить квантовые вычислительные операции при использовании ансамблевого подхода, что может также существенно упростить и считывание информации.

6.6. ЯМР квантовые клеточные автоматы на антиферромагнитных кристаллах*

В качестве основы для создания будущих ансамблевых ЯМР квантовых автоматов могут рассматриваться не только искусственно созданные твердотельные наноструктуры, но и некоторые *естественные кристаллы* с ядерными спинами $I = 1/2$ у основных атомов. В частности, это могут быть одноосные антиферромагнетики на основе диэлектрических *соединений редкоземельных и переходных элементов*.

Основные физические свойства электрон-ядерной спиновой системы в таких антиферромагнетиках существенно отличаются от свойств, рассмотренных выше простых одномерных моделей, поэтому требуется более детальное их рассмотрение.

6.6.1. Гамильтониан электрон-ядерной системы спинов для одноосного антиферромагнетика

В общем случае *исходный гамильтониан* имеет следующую структуру:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_Z + \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}_{dd} + \mathbf{H}_B + \Delta\mathbf{H}_I = \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B + \Delta\mathbf{H}_I. \quad (6.9)$$

Подсистема, описываемая в нем гамильтонианом \mathbf{H}_S , учитывает *зеемановское* взаимодействие электронных спинов \mathbf{H}_Z с внешним полем \mathbf{B} , направленным по оси z , *косвенное обменное* взаимодействие \mathbf{H}_{ex} и *диполь-дипольное магнитное* взаимодействие \mathbf{H}_{dd} электронных спинов. Гамильтониан \mathbf{H}_B определяется степенями свободы кристаллической решетки (фононы). Будем предполагать здесь, что электроны проводимости и примесные магнитные атомы без ядерных спинов отсутствуют, а вклад спин-орбитального взаимодействия в отдельном атоме пренебрежимо мал.

Диполь-дипольное магнитное взаимодействие электронных спинов \mathbf{H}_{dd} обычно разделяют на *близкодействующую* (в пределах ближайших соседей) и *дальнодействующую* части. Дальнодействующая часть *диполь-дипольного* взаимодействия между электронными спинами ответственна за размагничивающее поле и описывается с помощью *размагничивающих факторов*, зависящих от формы образца. Во внешних полях порядка нескольких тесла это поле может играть роль лишь при достаточно больших концентрациях ферромагнитно упорядоченных электронных спинов $N \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$. В случае образца сферической формы, а также при антиферромагнитном характере упорядочения спинов эта часть взаимодействия *практически не играет роли*.

Близкодействующая часть диполь-дипольного взаимодействия определяет *анизотропную поправку* в выражении для *изотропного обменного* взаимодействия с электронными спинами ближайших соседних атомов (другой подрешетки) антиферромагнитного типа \mathbf{H}_{ex} .

В качестве модели для антиферромагнетика выберем систему из *двух* магнитных подрешеток A и B с числом узлов в каждой подрешетке, равном $L/2$ (предполагается, что L – четное число). Положение узлов в подрешетках будем номеровать, соответственно, числами i и j .

Далее мы ограничимся рассмотрением симметричной антиферромагнитной одноосной структуры (ромбоэдрический, тетрагональный или гексагональный кристалл).

Гамильтониан электронной спиновой ($S = 1/2$) подсистемы такой структуры в операторных обозначениях (без использования символов \otimes) представим в виде:

$$\begin{aligned} H_S = \omega_S \cdot \left(\sum_i^{L/2} S_{Az}(i) + \sum_j^{L/2} S_{Bz}(j) \right) + \\ + \sum_i^{L/2} \sum_{\delta \neq 0} (J_{\perp}/2)(S_A^+(i) \cdot S_B^-(i+\delta) + S_A^-(i) \cdot S_B^+(i+\delta)) + J S_{Az}(i) \cdot S_{Bz}(i+\delta), \end{aligned} \quad (6.10)$$

где операторы электронных спинов $S_A^{\pm} = S_{Ax} \pm iS_{Ay}$, $0 \leq J - J_{\perp} = J_A$ — постоянная анизотропии, $\delta = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm Z/2$, Z — число ближайших соседних атомов в близкодействующем (будем называть его «обменным») анизотропном взаимодействии. Случай $J_{\perp}/J < 1$ соответствует наличию легкой оси антиферромагнетизма, параллельной оси z (направление внешнего поля \mathbf{B}).

Принятые здесь обозначения переходят в используемые также обозначения [2.60, 2.61] путем замены в выражении (6.10) $J_{\perp} \Rightarrow \gamma_S \mu_0 H_E/Z$, $J - J_{\perp} \Rightarrow \gamma_S \mu_0 H_A/Z$, где H_E и H_A — так называемые эффективные *поля обмена и анизотропии*.

В условиях рассматриваемых нами низких температур электронные спины находятся преимущественно в основном состоянии, а их отклонения от основного состояния малы и могут рассматриваться в приближении *спиновых волн*. Далее воспользуемся этим приближением и перейдем от операторов спина к *операторам рождения $a^+(\mathbf{q})$ и уничтожения $a(\mathbf{q})$* спиновых волн (антиферромагнонов) с волновым вектором \mathbf{q} для подрешетки А со спинами, ориентированными вдоль оси квантования z , и, соответственно, $b^+(\mathbf{q})$ и $b(\mathbf{q})$ для подрешетки В с противоположным направлением намагниченности (**Приложение П4**).

Гамильтониан антиферромагнетика типа «легкая ось» в представлении спиновых волн принимает вид [2.62]:

$$\begin{aligned} H_S = -LJZ/8 + \sum_{\mathbf{q}} \{ J^+ a^+(\mathbf{q}) a(\mathbf{q}) + J^- b^+(-\mathbf{q}) b(-\mathbf{q}) + \\ + Z\gamma_{\mathbf{q}} J_{\perp}/2 (a^+(\mathbf{q}) b^+(-\mathbf{q}) + a(\mathbf{q}) b(-\mathbf{q})) \}, \end{aligned} \quad (6.11)$$

где для решетки с центром инверсии имеем

$$J^{\pm} = (JZ/2 \pm \omega_S), \quad \gamma_{\mathbf{q}} = \gamma_{-\mathbf{q}} = 1/Z \sum_{\delta \neq 0} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}), \quad \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} = 0. \quad (6.12)$$

В частности, для простой тетрагональной решетки (a, c — постоянные решетки)

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \gamma_{-\mathbf{q}} = \cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z c / 3, \quad Z = 6. \quad (6.13)$$

Для диагонализации гамильтониана (6.11) перейдем к новым двухкомпонентным операторам рождения и уничтожения $\xi_{\pm}^+(\mathbf{q})$ и $\xi_{\pm}^-(\mathbf{q})$ с помощью унитарного преобразования Боголюбова-Тябликова, которое для рассматриваемого случая запишем в виде [2.62]

$$a(\mathbf{q}) = u_{\mathbf{q}} \xi_{+}^+(\mathbf{q}) + v_{\mathbf{q}} \xi_{-}^+(-\mathbf{q}), \quad b(-\mathbf{q}) = v_{\mathbf{q}} \xi_{+}^+(\mathbf{q}) + u_{\mathbf{q}} \xi_{-}^+(-\mathbf{q}), \quad (6.14)$$

где для новых бозевских операторов имеют место перестановочные соотношения

$$[\xi_{\pm}^{\pm}(\mathbf{q}), \xi_{\pm}^{\pm}(\mathbf{q}')] = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'},$$

$$[\xi_{\pm}^{\pm}(\mathbf{q}), \xi_{\pm}^{\mp}(\mathbf{q}')] = [\xi_{\pm}^{\pm}(\mathbf{q}), \xi_{\pm}^{\mp}(\mathbf{q}')] = [\xi_{\pm}^{\pm}(\mathbf{q}), \xi_{\mp}^{\pm}(\mathbf{q}')] = [\xi_{\pm}^{\pm}(\mathbf{q}), \xi_{\mp}^{\mp}(\mathbf{q}')] = 0. \quad (6.15)$$

Для коэффициентов преобразования получим [2.62]

$$u_{\mathbf{q}}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (J_{\perp}/J)^2 \gamma_{\mathbf{q}}^2}} + 1 \right), \quad v_{\mathbf{q}}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (J_{\perp}/J)^2 \gamma_{\mathbf{q}}^2}} - 1 \right), \quad (6.16)$$

а для гамильтониана электронных спинов в новом базисе теперь найдем

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_S = & -LJZ/8 - \sum_{\mathbf{q}} (JZ/2) (1 - \sqrt{1 - (J_{\perp}/J)^2 \gamma_{\mathbf{q}}^2}) + \\ & + \sum_{\mathbf{q}} (E_{+}(\mathbf{q}, B) N_{+}(\mathbf{q}) + E_{-}(\mathbf{q}, B) N_{-}(\mathbf{q})). \end{aligned} \quad (6.17)$$

Из четырех, полученных в результате диагонализации, собственных значений оператора \mathbf{H}_S условию устойчивости основного состояния спиновой системы антиферромагнетика с легкой осью соответствуют только **два положительных** собственных значения энергии спиновых волн [2.59]

$$E_{\pm}(\mathbf{q}, B) = E(\mathbf{q}, 0) \pm \omega_S > 0, \quad E(\mathbf{q}, 0) = JZ/2 \sqrt{1 - (J_{\perp}/J)^2 \gamma_{\mathbf{q}}^2}. \quad (6.18)$$

Операторы чисел заполнения магнонных состояний $N_{\pm}(\mathbf{q}) = \xi_{\pm}^{+}(\mathbf{q})\xi_{\pm}(\mathbf{q})$ имеют собственные значения 0 и 1. Их средние значения $\langle N_{\pm}(\mathbf{q}) \rangle = (\exp(E_{\pm}(\mathbf{q}, B)/T) - 1)^{-1}$. (Напомним, что предыдущее рассмотрение справедливо для низких температур $E_{\pm}(\mathbf{q}, B)/T \gg 1$, когда $\langle N_{\pm}(\mathbf{q}) \rangle \ll 1$).

При $\mathbf{q} \Rightarrow 0$ $\gamma_{\mathbf{q}} \Rightarrow 1$ значения

$$\begin{aligned} E_{\pm}(0, B) &= E(0, 0) \pm \omega_{\mathbf{S}} = (JZ/2)\sqrt{1 - (J_{\perp}/J)^2} \pm \omega_{\mathbf{S}} = \\ &= (\gamma_{\mathbf{S}}\mu_0/2)\sqrt{(2H_{\mathbf{E}} + H_{\mathbf{A}})H_{\mathbf{A}}} \pm \omega_{\mathbf{S}} \end{aligned} \quad (6.19)$$

сохраняют положительное значение, то есть однородное состояние антиферромагнетика с легкой осью антиферромагнетизма имеет *цель в энергетическом спектре* $E_{+}(0, B) > 0$, в условиях, когда поле B не превосходит критического значения $B_{st} \equiv \gamma_{\mathbf{S}}\mu_0\sqrt{(2H_{\mathbf{E}} + H_{\mathbf{A}})H_{\mathbf{A}}}$, при котором теряется устойчивость этого состояния и происходит *ориентационный фазовый переход* во флон-фазу.

Среднее значение проекции электронного спина подрешетки А (аналогично и для подрешетки В), обусловленное взаимодействием электронного спина со спиновыми волнами, определяется выражением [2.59, 2.62]

$$\begin{aligned} \langle S_{Az} \rangle &= 1/2 - \langle n_{\Lambda} \rangle = 1/2 - (2/L) \sum_{\mathbf{q}} \langle a^{+}(\mathbf{q})a(\mathbf{q}) \rangle = \\ &= 1/2 - (2/L) \sum_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{q}}^2 N_{+}(\mathbf{q}) + v_{\mathbf{q}}^2 (1 + N_{-}(\mathbf{q}))) = 1/2 - P(T) - \psi, \end{aligned} \quad (6.20)$$

где

$$\psi = (2/L) \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}^2 = (1/L) \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (J_{\perp}/J)^2 \gamma_{\mathbf{q}}^2}} - 1 \right) < (1/L) \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{q}}^2}} - 1 \right) \quad (6.21)$$

– так называемое *квантовое сокращение* электронного спина.

Для оценки последней суммы воспользуемся результатом, полученным Андерсоном для простой кубической решетки [2.59]. Получим, что квантовое сокращение лежит в пределах:

$$0 \text{ (для } J_{\perp} = 0) < \psi < 0,078. \quad (6.22)$$

Для *теплового сокращения спина* при $B = 0$ будем иметь

$$P(T) = (2/L) \sum_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{q}}^2 + v_{\mathbf{q}}^2) (N_+(\mathbf{q}) + N_-(\mathbf{q})), \quad (6.23)$$

откуда при низких температурах, учитывая (6.18), получим

$$P(T) = (1/L) \sum_{\mathbf{q}} \frac{JZ}{E(\mathbf{q}, 0)} 2\text{ch}(\alpha_{\mathbf{q}}/T) \exp(-E(0, 0)/T). \quad (6.24)$$

Мы видим, что для антиферромагнетика типа *легкой оси*, когда гамильтониан электронных спинов для одноосного кристалла имеет вид (6.10) при $T \ll E(0, 0)$, *тепловое сокращение* $P(T) \rightarrow 0$, то есть в основном электронном спиновом состоянии тепловые флуктуации практически *отсутствуют*. При этом квантовое сокращение электронного спина ψ , определяемое только квантовыми флуктуациями, как это следует из (6.22), оказывается *достаточно малым*. Оно строго отсутствует при $J_{\perp} = 0$ (модель Изинга).

Релаксационные процессы в спиновой системе антиферромагнетика проявляются в виде затухания спиновых волн, которые при низких температурах определяются рассеянием магнонов на примесях и других дефектах и в чистых кристаллах. Времена релаксации, определяющие ширину линии антиферромагнитного, как и ферромагнитного резонанса при низких температурах обычно лежат в диапазоне от 10^{-6} до 10^{-10} с [2.63]. Если фазовую скорость спиновой волны оценить, как Ja , где постоянная обменного взаимодействия $J \sim 10^{12} \text{с}^{-1}$, a — постоянная решетки, то такая существенная характеристика электронной спиновой системы, как длина когерентности спиновых волн в антиферромагнетике, будет соответствовать диапазону $10^6 a - 10^2 a$, то есть достаточно велика.

6.6.2. Косвенное взаимодействие между ядерными спинами в антиферромагнетике

Гамильтониан ΔH_{\perp} в (6.9) определяется *зеemanовским* взаимодействием ядерных спинов с внешним полем, анизотропным *сверхтонким* взаимодействием ядер со своими электронами в магнитных атомах и магнитным *диполь-дипольным взаимодействием* с электронными спинами других атомов. Анизотропия сверхтонкого взаимодействия обуславливается вкладом диполь-дипольного взаимодействия ядерного спина со своим электроном, состояние которого содержит примесь состояний, отличных от S-состояния.

Далее учтем, что предполагаемая антиферромагнитная среда трансляционно-инвариантна и Z ближайших соседних атомов расположены симметричным образом. Для составляющих тензора диполь-дипольного взаимодействия ядерного спина с электронным спином соседнего атома с номером δ запишем (в единицах круговой частоты)

$$D_{\alpha\beta\delta} = (\mu_0/4\pi) \gamma_s \gamma_h (\delta_{\alpha\beta} (r_\delta)^2 - 3 r_{\delta\alpha} r_{\delta\beta}) / (r_\delta)^5, \quad (6.25)$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Тл}^2 \text{ см}^3 / \text{Дж}$, векторы положений ближайших соседей $\mathbf{r}_\delta = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+\delta} = -\mathbf{r}_{-\delta}$, $r_\delta = |\mathbf{r}_\delta|$. Прямое диполь-дипольное магнитное взаимодействие *между ядерными спинами обычно мало* по сравнению с косвенным взаимодействием через электронные состояния атомов и учитывается не будет.

Полагая теперь, что магнитное поле направлено по оси симметрии *легкоосного антиферромагнетика* (ось z) и учитывая, что при низких температурах электронные спины подрешеток практически полностью поляризованы по ($\langle S_{Az} \rangle \approx 1/2$) и против поля ($\langle S_{Bz} \rangle \approx -1/2$), для исходного гамильтониана ядерной спиновой системы в *двухподрешеточном одномерном антиферромагнетике* получим:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{H}_I = & \sum_{i=1}^{L/2} (-\omega_1 + A_{\parallel} / 2 - Z D_{zz}) \cdot \mathbf{I}_{A_z}(i) + \sum_{j=1}^{L/2} (-\omega_1 - A_{\parallel} / 2 + Z D_{zz}) \cdot \mathbf{I}_{B_z}(j) + \\ & + \sum_{\alpha,\beta}^3 (1 - \delta_{\alpha z} \delta_{\beta z}) \cdot \{ A_{\alpha\beta} (\sum_{i=1}^{L/2} \mathbf{I}_{A_\alpha}(i) \cdot \mathbf{S}_{A_\beta}(i) + \sum_{j=1}^{L/2} \mathbf{I}_{B_\alpha}(j) \cdot \mathbf{S}_{B_\beta}(j)) + \\ & + \sum_{\delta} D_{\alpha\beta,\delta} (\sum_{i=1}^{L/2} \mathbf{I}_{A_\alpha}(i) \cdot \mathbf{S}_{B_\alpha}(i + \delta) + \sum_{j=1}^{L/2} \mathbf{S}_{A_\alpha}(j + \delta) \cdot \mathbf{I}_{B_\beta}(j)) \}, \quad (6.26) \end{aligned}$$

где для диагональных элементов тензора $A_{\alpha\beta}$ использованы обозначения $A_{zz} = A_{\parallel}$ и $A_{xx} = A_{yy} = A_{\perp}$.

Часть сверхтонкого поля, определяемая диагональными элементами тензора A_{\parallel} и тензора диполь-дипольного взаимодействия ядерных спинов с электронными спинами Z ближайших соседей $Z D_{zz} \equiv \sum_{\delta=\pm 1}^{\pm Z} D_{z,\delta}$, приводит к постоянному чередующемуся от узла к узлу сдвигу резонансных частот:

$$(\omega^{\pm} = -\omega_1 \pm A_{\parallel} / 2 \mp Z D_{zz}). \quad (6.27)$$

Как следует из соображений симметрии, у тензора $A_{\alpha\beta}$ одноосных кристаллов симметричные недиагональные элементы $A_{zx} = A_{zy} = 0$, но могут быть отличны от нуля антисимметричные недиагональные элементы $A_{xy} = -A_{yx}$. Однако их можно не учитывать, если анизотропия мала $|A_{\perp} - A_{\parallel}|$, $|A_{xy}| \ll A_{\parallel}$ [2.64].

Диагональные элементы тензора диполь-дипольного взаимодействия $D_{xx,\delta}$, $D_{yy,\delta}$ обычно малые по сравнению со сверхтонким взаимодействием с собственным электронным спином, не играют принципиальной роли и учитываться не будут. Тем не менее, отличные от нуля *недиагональные элементы* взаимодействия, содержащие параметры $D_{xz,\delta}$, $D_{yz,\delta}$ ответственные за адиабатическую декогерентизацию квантовых состояний ядерных спинов и за продольную часть *косвенного* взаимодействия, далее будут *сохранены*. Введем для них обозначения

$$D_{z,\delta}^+ = D_{z,-\delta}^+ = D_{xz,\delta} + iD_{yz,\delta} = -3(\mu_0 / 4\pi)\gamma_S\gamma_I\hbar \cos\theta_\delta \exp(i\varphi_\delta) / r_\delta^3, \quad (6.28)$$

где углы θ_δ и φ_δ определяют направление вектора \mathbf{r}_δ

Для гамильтониана ядерной спиновой системы в итоге получим

$$\Delta\mathbf{H}_I = \omega^+ \sum_{i=1}^{L/2} \mathbf{I}_{A_z}(i) + \omega^- \sum_{j=1}^{L/2} \mathbf{I}_{B_z}(j) + \Delta\mathbf{H}_{SI} + \text{эрмитово сопряж.}, \quad (6.29)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{H}_{SI} = & A_{\perp}/2 \left\{ \sum_{i=1}^{L/2} \mathbf{S}_A^+(i) \cdot \mathbf{I}_A^-(i) + \sum_{j=1}^{L/2} \mathbf{S}_B^+(j) \cdot \mathbf{I}_B^-(j) \right\} - \\ & - \sum_{\delta \neq 1} D_{z,\delta}^+ / 2 \left\{ \sum_{i=1}^{L/2} \mathbf{S}_B^-(i+\delta) \cdot \mathbf{I}_{A_z}(i) + \sum_{j=1}^{L/2} \mathbf{S}_A^-(j+\delta) \cdot \mathbf{I}_{B_z}(j) \right\} \quad (6.30) \end{aligned}$$

— гамильтониан взаимодействия ядерных спинов с электронами своих и соседних атомов.

Переходя в (6.30) в представление спиновых волн для электронной системы антиферромагнетика, получим

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{H}_{SI} = & (A_{\perp}/2) \cdot \sqrt{2/L} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{i=1}^{L/2} (u_{\mathbf{q}} \xi_+^{\pm}(\mathbf{q}) + v_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \xi_-^{\pm}(-\mathbf{q})) \mathbf{I}_A^-(i) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i) + \right. \\ & \left. + \sum_{j=1}^{L/2} (v_{\mathbf{q}} \xi_+^{\pm}(\mathbf{q}) + u_{\mathbf{q}} \xi_-^{\pm}(-\mathbf{q})) \mathbf{I}_B^-(j) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) \right\} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{\delta \neq 0} (D_{z,\delta}^+ / 2) \sqrt{2/L} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_{i=1}^{L/2} (v_{\mathbf{q}} \xi_{+}^+(\mathbf{q}) + u_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \xi_{-}^-(\mathbf{q})) \mathbf{I}_{Az}(i) \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_{\delta})) + \right. \\
 & \left. + \sum_{j=1}^{L/2} (u_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \xi_{+}^+(\mathbf{q}) + v_{\mathbf{q}} \xi_{-}^-(\mathbf{q})) \mathbf{I}_{Bz}(j) \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_{\delta})) \right). \quad (6.31)
 \end{aligned}$$

Косвенное взаимодействие между ядерными спинами, вообще говоря, осуществляется как через спиновые волны, так и через фононы. Из-за магнитоупругого взаимодействия собственными колебаниями системы являются связанные магнон-фононные моды [2.56]. Однако в условиях очень низких температур вклад этих мод не является существенным. В качестве окружения для ядерных спинов будем далее рассматривать только электронную систему и возбуждаемые в ней спиновые волны.

Рассматривая оператор $\Delta \mathbf{H}_{\text{SI}}$, как возмущение с недиагональными матричными элементами относительно электронных состояний, найдем выражение для эффективного гамильтониана ядерных спинов, производя вычисление среднего значения этого оператора по основному электронному состоянию во втором порядке теории возмущений.

Недиагональные матричные элементы этого оператора $\langle 0 | \Delta \mathbf{H}_{\text{SI}} | E_{\pm}(\mathbf{q}) \rangle$ выражаются через матричные элементы магнонных операторов

$$\xi_{\pm}(\mathbf{q}) = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \xi_{\pm}^+(\mathbf{q}) = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Энергии двух магнонных состояний определяется выражением (6.18).

В результате получим выражение для эффективного гамильтониана ядерных спинов в одноосной антиферромагнетике, который находится в основном электронном состоянии следующего вида:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H}_{\text{I,eff}} = & \omega^+ \sum_{i=1}^{L/2} \mathbf{I}_{Az}(i) + \omega^- \sum_{j=1}^{L/2} \mathbf{I}_{Bz}(j) - \\
 & - \sum_{\mathbf{q}} \left| \langle 0 | \Delta \mathbf{H}_{\text{I}\xi} | E_{-}(\mathbf{q}, 0) \rangle \right|^2 (1/E_{-}(\mathbf{q}, B) + 1/E_{+}(\mathbf{q}, B)). \quad (6.32)
 \end{aligned}$$

Как следует из выражения (6.32), основной вклад в суммы по \mathbf{q} дают слагаемые, при которых $E(\mathbf{q}, 0)^2 - \omega_{\xi}^2 \Rightarrow 0$. Вблизи антиферромагнитного резонанса это соответствует малым значениям \mathbf{q} . Для оценки характерных значений \mathbf{q} запишем для простой кубической решетки $\gamma_{\mathbf{q}} \approx 1 - 3q^2/2$,

где a — постоянная решетки. Характерный радиус косвенного взаимодействия ядерных спинов b_0 , принадлежащих различным атомам, в антиферромагнетике определяется через обратную величину волнового вектора q . В результате получим оценку

$$b_0 \approx a \frac{J_{\perp}}{\sqrt{2E(0,0)(E(0,0) - \omega_S^2)}}, \quad (6.33)$$

из которой следует, что эффективный радиус ядерных взаимодействий в антиферромагнетике вблизи антиферромагнитного резонанса может быть достаточно большим.

Однако при определенном подборе параметров эффективный радиус взаимодействия может быть сделан близким к постоянной решетке, и тогда можно будет учитывать взаимодействия ядерных спинов одной подрешетки А только с соседними спинами другой подрешетки В.

В этом случае будем иметь

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{i,\text{eff}} = & \sum_{i=1}^{L/2} (\omega^+ + b) \mathbf{I}_{A_z}(i) + \sum_{j=1}^{L/2} (\omega^- - b) \mathbf{I}_{B_z}(j) - d/2 \cdot \left(\sum_{i=1}^{L/2} \mathbf{I}_{A_z}^2 + \sum_{j=1}^{L/2} \mathbf{I}_{B_z}^2 \right) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{L/2} \{ C_{i,j} (\mathbf{I}_A^+(i) \mathbf{I}_B^-(j) + \mathbf{I}_A^-(i) \mathbf{I}_B^+(j)) + D_{i,j} \mathbf{I}_{A_z}(i) \mathbf{I}_{B_z}(j) \} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{L/2} F_{i,j}^+ (\mathbf{I}_A^-(i) \mathbf{I}_{B_z}(j) + \mathbf{I}_{A_z}(i) \mathbf{I}_B^-(j)) - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{L/2} F_{i,j}^- (\mathbf{I}_A^+(i) \mathbf{I}_{B_z}(j) + \mathbf{I}_{A_z}(i) \mathbf{I}_B^+(j)), \end{aligned} \quad (6.34)$$

где

$$\begin{aligned} b &= (A_{\perp}^2 / L) \sum_{\mathbf{q}} E(\mathbf{q}, 0) / (E(\mathbf{q}, 0)^2 - \omega_S^2), \\ d &= (1/L) \sum_{\mathbf{q}} \left| \sum_{\delta \neq 0} D_{z,\delta}^+ \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}) \right|^2 JZ / (E(\mathbf{q}, 0)^2 - \omega_S^2), \\ C_{i,i'} &= (A_{\perp} / 2L) \sum_{\mathbf{q}} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,i'}) J_{\perp} Z \gamma_{\mathbf{q}} / (E(\mathbf{q}, 0)^2 - \omega_S^2), \\ D_{i,j} &= (1/2L) \sum_{\mathbf{q}} \left| \sum_{\delta \neq 0} D_{z,\delta}^+ \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}) \right|^2 \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,i'}) J_{\perp} Z / (E(\mathbf{q}, 0)^2 - \omega_S^2), \\ F_{i,j}^{\pm} &= (A_{\perp} / 2L) \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\delta \neq 0} (D_{z,\delta}^{\pm} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}) JZ \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,i'})) / (E(\mathbf{q}, 0)^2 - \omega_S^2). \end{aligned} \quad (6.35)$$

Если не учитывать диполь-дипольное взаимодействие ядерных спинов с электронными спинами соседних атомов, то есть положить $d = D_{ij} = F_{ij} = 0$, то для одноосного кристалла косвенное взаимодействие через магны, называемое *сул-накамуровким*, имеет место между *поперечными* составляющими ядерных спинов и оказывается основным механизмом релаксации состояний ядерных спинов при низких температурах.

Выполненный выше учет недиагональных составляющих диполь-дипольного взаимодействия ядерных магнитных моментов с электронными спинами соседних атомов приводит к появлению, как следует из (6.32), и дополнительных составляющих косвенного взаимодействия между ядерными спинами.

Большое значение имеет *секулярная часть* гамильтониана (6.34), которую можно представить в виде:

$$\begin{aligned} H_{\text{Isec}} = & \sum_{i=1}^{L/2} (\omega^+ + b/2 - d/2 \cdot \mathbf{I}_{Az}(i)) \cdot \mathbf{I}_{Az}(i) + \sum_{j=1}^{L/2} (\omega^- - b/2 - d/2 \cdot \mathbf{I}_{Bz}(j)) \cdot \mathbf{I}_{Bz}(j) - \\ & - \sum_{i=1, \delta \neq 0}^{L/2} (1/3) \{ (D_{i,i+\delta} - 2C_{i,i+\delta}) (3\mathbf{I}_{Az}(i)\mathbf{I}_{Bz}(i+\delta) - \mathbf{I}_A(i)\mathbf{I}_B(i+\delta)) + \\ & + (D_{i,i+\delta} + 4C_{i,i+\delta}) \mathbf{I}_A(i) \cdot \mathbf{I}_B(i+\delta) \}. \end{aligned} \quad (6.36)$$

В этом выражении первое слагаемое в последней сумме («псевдодипольное» взаимодействие) определяет сдвиг резонансных частот и уширение резонансных линий. При определенном соотношении между параметрами J, J_{\perp} , при котором $B(D_{i,i+\delta} - 2C_{i,i+\delta}) \rightarrow 0$, можно ожидать существенного уменьшения этого взаимодействия.

Последнее слагаемое приводит к некоторому, так называемому «обменному» изотропному сужению резонансных линий [2.29].

Рассмотрим теперь в качестве частного случая линейную цепочку ядерных спинов в антиферромагнетике. Из выражения (6.34), вводя обозначения: $\delta = \pm 1$, $D_{i,i+\delta} = I_1$, $I_{zA(B)}(i-1) = m_{<}$, $I_{zA(B)}(i+1) = m_{>}$ и полагая $d \ll b$, $\omega_{\uparrow} \gg I_1$, выделим часть, определяющую только резонансные частоты ядерных спинов подрешеток А и В:

$$\begin{aligned} H_{\text{Isec}} = & \sum_{i=1}^{L/2} (-\omega_{\uparrow} + (A_{\uparrow} + b)/2 - ZD_{zz} - I_1(m_{<} + m_{>})) \cdot \mathbf{I}_{Az}(i) + \\ = & \sum_{i=1}^{L/2} (-\omega_{\uparrow} - (A_{\uparrow} + b)/2 + ZD_{zz} - I_1(m_{<} + m_{>})) \cdot \mathbf{I}_{Bz}(i). \end{aligned} \quad (6.37)$$

Мы видим, что с точностью до обозначений значения резонансных частот совпадают с использованными ранее $\omega_{A,B}(m_z + m_y)$ в (6.1).

6.6.3. Декогерентизация состояний ядерных спинов в легкоосных антиферромагнетиках

Процессы релаксации квантовых состояний ядерных спинов в антиферромагнетиках при низких температурах определяются активной ролью электронных спин-волновых процессов [2.56, 2.65]. Время продольной релаксации ядерных спинов в этом случае очень велико, поскольку из-за большой разности энергий ядерных переходов и антиферромагнотных одномагнитных диссипативных процессы запрещены законом сохранения энергии.

Поперечное время релаксации T_2 для ЯМР в легкоосном антиферромагнетике определяется действием флуктуационных локальных полей, приводящих к комбинационным процессам рассеяния электронных спиновых волн на отдельных ядерных спинах без их переворотов (адиабатическая релаксация). Эту часть поперечной скорости релаксации для низких температур ($T \ll E(0,0)$) с помощью известного выражения Морин (см. в [2.56]) запишем в наших обозначениях:

$$1/T_2 \sim (A_{\perp}^2/J_{\perp}) (T/J_{\perp})^3 E(0,0)/T \exp(-E(0,0)/T), \quad (6.38)$$

из которого следует, что величина T_2 в таком антиферромагнетике с уменьшением температуры экспоненциально *быстро растет*.

С другой стороны, ядерные косвенные спин-спиновые взаимодействия в естественном антиферромагнетике приводят к неоднородному уширению резонансных линий, которое выражается через второй момент резонансной линии M_2 , обычно определяемый сул-накамуровским взаимодействием. Для антиферромагнетика типа легкая ось для него имеем [2.56]

$$\sqrt{M_2} \sim (1/10) \frac{A_{\perp}^2}{(J - J_{\perp})^{1/2} J_{\perp}^{1/2}}, \quad (6.39)$$

откуда для $J/2\pi - J_{\perp}/2\pi \sim 10^{13}$ Гц, $A_{\perp}/2\pi \sim 10^8$ Гц, получим оценку $\sqrt{M_2} \sim 100$ Гц. Характерное поперечное время релаксации (то есть декогерентизации), определяемое этим механизмом, составит 10^{-2} с, что является недостаточно большой величиной.

Однако время декогерентизации в этом случае может быть увеличено, если учесть отмеченную выше возможность существенного уменьше-

ния секулярной части «псевдодипольного» взаимодействия путем выбора соответствующих параметров.

Существенного увеличения времени поперечной ядерной релаксации (однокубитовой декогерентизации), определяемой указанной частью секулярного гамильтониана (6.36), можно также добиться путем включения какого-либо механизма «сильного сужения», приводящего к быстрым флуктуациям локальных полей. В ансамблевом твердотельном ЯМР квантовом регистре это можно осуществить с помощью динамических методов когерентного усреднения, используемых в спектроскопии ЯМР высокого разрешения [2.40, 2.66].

При некоррелированных случайных воздействиях, как уже обсуждалось в подразделе 3.3.2, будет происходить декогерентизация запутанного состояния ядерных спинов кольца и переход его в незапутанное смешанное состояние с диагональной приведенной матрицей плотности. Необходимым и достаточным условием для свободной от декогерентизации динамики логических кубитов в некотором подпространстве является принадлежность всех базисных состояний к *одномерным* неприводимым представлениям группы Паули P_L . Иначе говоря, это *синглетные* базисные состояния [2.67].

Наименьшее число физических кубитов для кодирования двух логических состояний $|0\rangle_L$ и $|1\rangle_L$ в DFS в общем случае сильной декогерентизации равно *четырем*. Этими двумя состояниями логического кубита являются запутанные состояние четырех физических кубитов с *нулевым полным моментом* [2.68]:

$$\begin{aligned} |0\rangle_L &= (1/2) (|01\rangle - |10\rangle) \otimes (|01\rangle - |10\rangle) = \\ &= (1/2) (|0101\rangle + |1010\rangle - |1001\rangle - |0110\rangle), \end{aligned} \quad (6.40)$$

$$\begin{aligned} |1\rangle_L &= (1/3)^{1/2} (|11\rangle \otimes |00\rangle + |00\rangle \otimes |11\rangle - (1/2)(|01\rangle + |10\rangle) \otimes (|01\rangle + |10\rangle) = \\ &= (1/12)^{1/2} (2|1100\rangle + 2|0011\rangle - |0101\rangle - |1010\rangle - |0110\rangle - |1001\rangle). \end{aligned} \quad (6.41)$$

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

6.6.4 Основные требования к антиферромагнитным кристаллам

Основные общие требования к естественным антиферромагнитным структурам, которые, как можно ожидать, могут быть базовой средой для

создания ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров, работающих на принципах клеточного автомата, состоит в следующем:

1. Рабочая температура T антиферромагнитной структуры должна соответствовать полностью упорядоченному антиферромагнетику, то есть $T_N > T$, где T_N — температура Нееля для электронного антиферромагнитного упорядочения. Это условие для T удовлетворяется обычно уже при гелиевых температурах. Более жесткими могут быть требования к времени декогерентизации ядерных состояний в электрон-ядерной структуре, рассмотренные в подразделах 5.4.5 и 5.4.6, из которых следует, что рабочая температура T должна быть меньше 0,1 К. При этом инициализация состояний ядерных спинов требует обеспечить для них эффективную спиновую температуру $T_1 \leq 10^{-3}$ К.

2. Стабильные изотопы должны иметь ядерные спины $I = 1/2$ и желательна 100% распространенность в природе. Электронные спиновые состояния $S \geq 1/2$.

Например, ими могут быть редкоземельные соединения стабильного изотопа тулия ^{169}Tm , который имеет ядерный спин $I = 1/2$, $\gamma/2\pi = -21,8$ МГц/Тл и 100% относительную распространенность в природе. Такими соединениями, возможно, могут быть: Tm_2O_3 , TmSi_2 , TmGe_2 , TmSe . В этих соединениях естественные стабильные элементы O, Si, Ge и Se имеют, соответственно, изотопы, содержащие ядерные спины (в скобках приведена их распространенность [2.46]) ^{17}O $I = 5/2$ (0.04%), ^{29}Si $I = 1/2$ (4.7%), ^{73}Ge $I = 9/2$ (7.76%), ^{77}Se $I = 1/2$ (7.78%), от которых требуется очистка антиферромагнетика. По-видимому, в качестве вариантов систем могут рассматриваться и некоторые соединения с ядерными спинами изотопов ^{19}F , ^{31}P со 100% распространенностью ($^{56}\text{FeF}_2$, $^{56}\text{FePO}_4$).

3. Для организации квантовых операций клеточного типа в двух- и трехмерных ЯМР квантовых клеточных автоматах наиболее предпочтительными являются коллинеарные антиферромагнитные структуры *шахматного типа*, описываемые двумя магнитными подрешетками (два магнитных момента в магнитной элементарной ячейке, схематически изображенные на рис. 2.8).

4. Для обеспечения больших поперечных времен ядерной релаксации при низких температурах следует использовать *одноосный* (ромбоэдрический, тетрагональный или гексагональный) кристалл с *легкой осью* антиферромагнетизма.

5. Соединения с *ферромагнитным* или *ферримангнитным упорядочением* электронных спинов *мало пригодны* из-за их высокой чувстви-

тельности к воздействию случайных внешних полей и влиянию формы образца.

Для окончательного же выбора материала следует провести детальные экспериментальные и теоретические исследования указанных выше и других кристаллов с антиферромагнитной структурой.

Заключение: Вариант ЯМР квантового клеточного автомата на антиферромагнитных кристаллах имеет целый ряд *преимуществ*:

1. Он содержит только один тип атомов с ядерным спином $1/2$ (гомоядерная структура). Если удастся подобрать соответствующий естественный антиферромагнитный материал, то существенно снижается роль высокоточной нанотехнологии.

2. Для упорядочения электронных спинов достаточно перейти к температурам ниже температур фазового перехода в антиферромагнитное состояние T_N , которое обычно больше, чем $0,1$ К, и не потребуются сильные внешние магнитные поля.

3. Вариант допускает использование ансамблевых способов управления кубитами и считывание информации на выходе автомата.

4. Для инициализации большого ансамбля ядерных спинов могут быть использованы динамические методы поляризации ядерных спинов.

5. Способ кодирования логических состояний на нескольких физических спинах-кубитах обеспечивает более высокую помехоустойчивость по отношению к случайным генерациям ошибочных кубитов.

Заключение

В настоящее время бурно развивается интерес к квантовым компьютерам вообще и к ЯМР квантовым компьютерам в частности. Твердотельные ЯМР квантовые компьютеры имеют важные преимущества, среди которых можно указать на следующие:

1. Ядерные спины сами по себе являются кубитами.

2. При низких температурах их состояния характеризуются очень большими временами релаксации (и, соответственно, временами декогерентизации) по сравнению с электронными спиновыми и орбитальными состояниями.

3. Технологические структуры нанометрового масштаба в полупроводниковых ЯМР квантовых компьютерах предназначаются не для создания самих кубитов, как в случае сверхпроводниковых устройств,

а лишь для задач управления спинами-кубитами и измерения их состояний.

4. Определенные преимущества могут иметь ЯМР квантовые компьютеры, работающие на принципе клеточного автомата.

Состояние современной высокоточной технологии и технологии высокочистых материалов позволяют приступить к экспериментальным работам по созданию элементов полупроводниковых ЯМР квантовых компьютеров. Уже созданы простейшие фрагменты или прототипы такого компьютера. Однако создание многокубитовых твердотельных структур — более далекая перспектива. Это потребует привлечения многих технологических и схемотехнических достижений современной микро- и нанoeлектроники, а также разработки программ математического моделирования физических процессов и в частности, процессов декогерентизации в многокубитовых квантовых системах.

В связи с работами по ЯМР квантовым компьютерам, в новом качестве оказались востребованы многие хорошо разработанные методы ядерного магнитного резонанса и, более того, потребовалась развитие ряда еще недостаточно или совсем неизученных направлений в теории и практике ЯМР, существенных с точки зрения их приложения для квантовых компьютеров и квантовых вычислений.

Одним из наиболее важных требований к квантовым системам, выполнение которых необходимо для построения квантовых компьютеров, является *подавление процессов декогерентизации*. В связи с этим возникла необходимость адекватного описания этих процессов для состояний ядерной спиновой системы в твердом теле.

По поводу возможности реализации полномасштабных квантовых компьютеров существуют как оптимистические, так и пессимистические соображения.

Достаточно обнадеживающим может быть использование ансамблевого подхода при реализации ЯМР квантового компьютера. В книге проанализированы известные варианты возможных твердотельных ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров и ЯМР квантовых автоматов.

Использование ансамблевого подхода позволяет решить ряд проблем, а именно:

1. В результате ансамблевого усреднения снижается влияние неконтролируемых фазовых множителей в инициализированном состоянии многокубитового квантового регистра.

2. Необходимое для инициализации квантового состояния охлаждение спиновой системы до микрокельвиновых температур может быть

достигнута при значительно более высоких рабочих температурах путем использования метода динамической поляризации ядерных спинов.

3. При использовании ансамблевого подхода открывается возможность контроля и измерения квантовых состояний кубитов с помощью стандартной техники ЯМР, исключающей использование высокочувствительных измерений состояний отдельных спинов.

4. Ансамблевые ЯМР квантовые клеточные автоматы позволяют в значительной мере отказаться от сложной системы затворов нанометрового масштаба, представляющей большие трудности для современной нанотехнологии. К тому же система затворов порождает дополнительные проблемы, связанные с декогерентизацией квантовых состояний кубитов.

5. Для подавления декогерентизации в ансамблевом квантовом компьютере, кроме других методов, могут быть использованы динамические методы когерентного усреднения, используемые в ЯМР спектроскопии высокого разрешения.

6. Можно ожидать, что в будущем появятся также комбинированные варианты ансамблевых твердотельных квантовых компьютеров, использующих, например, в одной структуре, как ядерные спины, так и квантовые точки с электронными спинами, а также комбинированные методы обращения к кубитам, такие как двойной электрон-ядерный магнитный резонанс, оптическая динамическая поляризация ядерных спинов и оптическое детектирование ядерного магнитного резонанса.

Приложение П2.

Сигнал ЯМР от ансамбля ядерных спинов

Рассмотрим образец, содержащий $N = n p N_0$ ядерных спинов, расположенных в плоскости $z = 0$ кремниевой пластины с регулярным интервалом вдоль параллельно включенных полосковых затворов в блоках (рис. 2.7). Это число равно числу независимых «молекул» в ансамбле. Пусть спины, которые соответствуют цепочкам под полосковыми затворами при резонансе в каждом блоке, ориентированы вдоль оси x (ось солениоида) и находятся в одинаковых состояниях. Считываемый ЯМР сигнал будет определяться выражением:

$$|V_{\max}| = Q\omega_A \frac{K}{X} \int_{-X/2A}^{X/2} | \int B_{x,\max}(x, y, z) dy dz | dx, \quad (\text{П2.1})$$

где $X = n L l_x$ — приблизительно соответствует длине соленоида, а

$$B_{x, \max}(x, y, z) = \frac{\mu_0 \gamma_1 \hbar}{16\pi} \sum_{n_i = -n/2}^{n/2} \sum_{p_i = -pN_0/2}^{pN_0/2} \frac{-2(x - Ll_x n_i)^2 + (y - l_y p_i)^2 + z^2}{[(x - Ll_x n_i)^2 + (y - l_y p_i)^2 + z^2]^{5/2}} \quad (\text{П2.2})$$

— максимальное значение магнитного поля, создаваемого резонансными спинами в соленоиде. Для простоты предположим, что $n, p, N_0, L \gg 1$ — четные числа. Для площади витка соленоида запишем $A = D \cdot \delta$ ($D = l_y p N_0$, $\delta \ll D$).

Для выполнения суммирования как по n_i , так и p_i воспользуемся *формулой суммирования Пуассона* в форме :

$$\sum_{p_i = -pN_0/2}^{pN_0/2} f(l_y p_i) = \frac{pN_0}{D} \sum_{v=-\infty}^{\infty} \int_{-D/2}^{D/2} f(\xi) \exp(iv2\pi\xi/l_y) d\xi. \quad (\text{П2.3})$$

Предполагая, что осциллирующие слагаемые с $v \neq 0$ при последующем интегрировании по x, y усредняются до нуля, опустим их в (П2.3) и запишем

$$|V_{\max}| = \frac{\mu_0 Q K \omega_A \gamma_1 \hbar n p N_0}{8\pi X^2 D} \int_{-X/2}^{X/2} dx \int_{-X/2}^{X/2} d\eta \int_0^{\delta/2} dz \left| \int_{-D/2}^{D/2} \int_{-D/2}^{D/2} \frac{-2(x-\eta)^2 + (y-\xi)^2 + z^2}{[(x-\eta)^2 + (y-\xi)^2 + z^2]^{5/2}} dy d\xi \right|. \quad (\text{П2.4})$$

Учитывая далее, что $D^2 \gg z^2$, после интегрирования (П2.4) по y, ξ , получим

$$|V_{\max}| = \frac{\mu_0 Q K \omega_A \gamma_1 \hbar n p N_0}{8\pi X^2 D} \int_{-X/2}^{X/2} dx \int_{-X/2}^{X/2} d\eta \int_0^{\delta/2} dz \left\{ \frac{-2[(x-\eta)^2 - z^2] D^2}{[(x-\eta)^2 + z^2]^2 [D^2 + (x-\eta)^2]^{1/2}} + \frac{2z^2}{[(x-\eta)^2 + z^2]^{3/2}} \right\}. \quad (\text{П2.5})$$

Интегрируя теперь по z и сохраняя только логарифмически растущее при $2lx - \eta \rightarrow 0$ слагаемое, найдем

$$|V_{\max}| \approx \frac{\mu_0 Q K \omega_A \gamma_1 \hbar n p N_0}{4\pi X^2 D}$$

$$\int_{-X/2}^{X/2} dx \int_{-X/2}^{X/2} d\eta \ln(\delta / |x - \eta|) = (\mu_0 / 4) Q K A \omega_A \frac{N}{V_S} \gamma_1 \hbar \cdot \frac{X}{\pi D} \cdot \ln \frac{X}{\delta \sqrt{e}}, \quad (\text{П2.6})$$

где $V_S = AX$, $N = npN_0$, $e = 2,716\dots$

Мы видим, что выражение (П2.6) отличается от (5.37) при $\varepsilon(L) = 1$ несущественным множителем $\frac{X}{\pi D} \cdot \ln \frac{X}{\delta \sqrt{e}}$ порядка нескольких единиц.

Приложение П3. Двухкубитовая операция CNOT в одномерном ЯМР квантовом клеточном автомате*

Рассмотрим здесь, как можно произвести двухкубитовую операцию контролируемое НЕ (CNOT). Унитарное преобразование, соответствующее CNOT, действует в четырехмерном гильбертовом пространстве состояний двух логических кубитов. Операция CNOT сохраняет состояние контролируемого кубита или инвертирует его, соответственно, при состояниях контролирующего кубита «0» или «1».

Обратимся к исходному состоянию квантового регистра, показанному на первой строке рис. 2.9, и приложим после достижения стадии ** отличную от SWAP импульсную последовательность $\pi_{A,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}$. Результат представлен на рис. П3.1.

Можно видеть, что контрольная единица CU сначала проходит через первый кубит «1», не изменяя его состояние, и продолжает движение до пересечения с кубитом «0». Затем после действия импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}$ CU сама подвергается преобразованию, а кубит «0» при этом разрушается. При дальнейшем продвижении влево под действием операций SWAP

контрольная единица изменяет форму от $\begin{matrix} \text{CU} \\ \hline \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \\ \text{B A B A B A} \end{matrix}$ до $\begin{matrix} \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \\ \text{B A B A B A} \end{matrix}$

и продолжат движение влево (рис. ПЗ.1), проходя последующие кубиты, которые движутся вправо, без изменений.

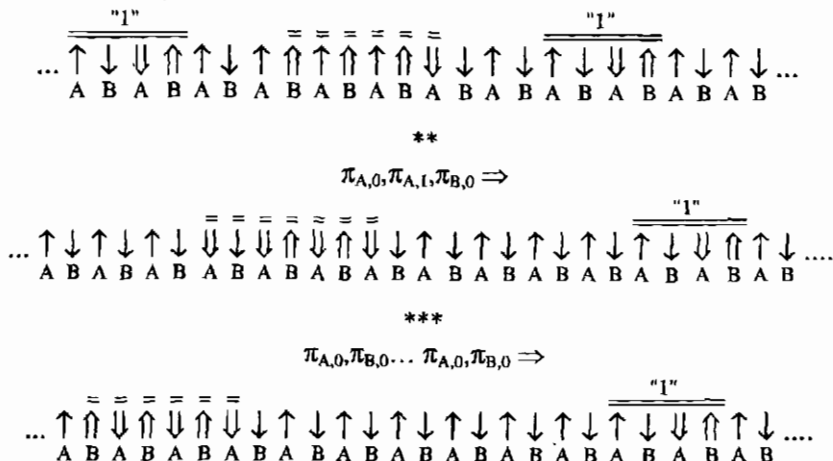


Рис. ПЗ.1. Результат действия импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}$ и последующих **SWAP** операций после стадии **

Если кубит «0» играет роль контролирующего кубита, то операции **SWAP** прерываются и на стадии прохождения контролирующего кубита «0», отмеченной на рис. ПЗ1 двумя звездочками **, взамен импульсной последовательности $\pi_{A,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}$ выполняется последовательность из 10 импульсов: $\pi_{A,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,-1}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,-1}, \pi_{A,1}$. В результате преобразованная контрольная единица, проходя кубит «1» производит его преобразование. Результат представлен на рис. ПЗ.2.



Рис. ПЗ.2. Схема действия импульсной последовательности, следующей за стадией **

Сама контрольная единица принимает новую структуру. При этом последний импульс $\pi_{A,1}$ в этом случае не производит никакого преобразования состояний. В результате обратная последовательность возвращает **CU** и кубиты в их начальные состояния, в котором контролируемый кубит остается в состоянии «1», как и должно быть для вентиля **CNOT**, если контролирующий кубит находится в состоянии «0».

Возвратимся теперь к рис. 2.9 и продолжим после стадии *, когда **CU** проходит кубит в состоянии «1», играющий теперь роль контролирующего кубита, приведенную выше последовательность импульсов (рис. ПЗ.3).

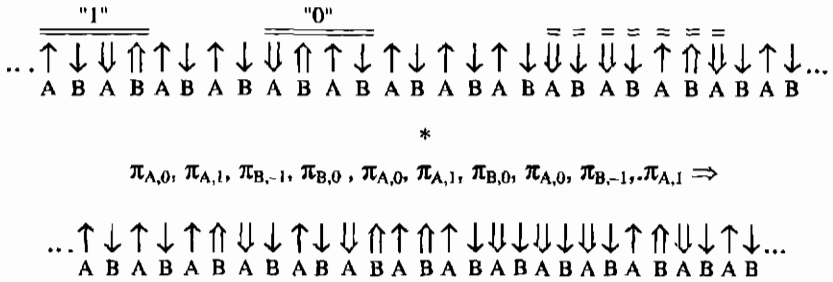


Рис. ПЗ.3. Схема действия импульсной последовательности после стадии *, когда **CU** проходит кубит «1»

Последний импульс $\pi_{A,1}$ в этом случае производит инверсию состояния спина A в структуре состояний $\begin{matrix} \uparrow\downarrow\uparrow \\ B\ A\ B \end{matrix} \xrightarrow{\pi_{A,1}} \begin{matrix} \uparrow\uparrow\uparrow \\ B\ A\ B \end{matrix}$. Если выполнить теперь обратную импульсную последовательность $\pi_{B,-1}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,1}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,1}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}$, то в результате получим следующее состояние регистра



которое отличается от исходного состояния на рис. 2.9 заменой логического кубита «0» на кубит «0». Таким образом, после приложения указанной обратной импульсной последовательности состояние контролируемого кубита инвертируется, как и должно быть для вентиля **CNOT**, если состояние контролирующего кубита «1».

Приложение П4.

Спин-волновое приближение для подсистемы электронных спинов в антиферромагнетике и приближение Тябликова

Введены операторы рождения $a^+(\mathbf{q})$ и уничтожения $a(\mathbf{q})$ спиновых волн — антиферромагнонов с волновым вектором \mathbf{q} для подрешетки, ориентированной вдоль оси квантования z , и, соответственно, $b^+(\mathbf{q})$ и $b(\mathbf{q})$ для подрешетки с противоположным направлением намагниченности. Для подрешетки А, в частности, их связь с операторами спина имеет вид

$$a_i^+ = S_A^-(i) = S_{Ax}(i) - iS_{Ay}(i) = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = \sqrt{2/L} \sum_{\mathbf{q}} a^+(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i),$$

$$a_i = S_A^+(i) = S_{Ax}(i) + iS_{Ay}(i) = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = \sqrt{2/L} \sum_{\mathbf{q}} a(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_i). \quad (\text{П4.1})$$

В условиях низких температур они аналогичны бозевским операторам, за исключением того, что числа заполнения $n_A(i) = a_i^+ a_i$, в отличие от бозонов, принимают только два значения 0 и 1 (как для фермиевских частиц).

Учитывая трансляционную инвариантность в пределах каждой подрешетки с числом узлов $L/2$, перейдем в импульсное \mathbf{q} -представление. Правила коммутации для операторов в этом представлении имеют вид

$$[a(\mathbf{q}), a^+(\mathbf{q}')] = 2S_{Az} = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - 2\sqrt{2/L} \rho(\mathbf{q} - \mathbf{q}'),$$

$$[b(\mathbf{q}), b^+(\mathbf{q}')] = 2S_{Bz} = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - 2\sqrt{2/L} \tau(\mathbf{q} - \mathbf{q}'),$$

$$[a(\mathbf{q}), a(\mathbf{q}')] = [a(\mathbf{q}), b(\mathbf{q}')] = 0, \quad [a(\mathbf{q}), b^+(\mathbf{q}')] = [b(\mathbf{q}), a^+(\mathbf{q}')] = 0, \quad (\text{П4.2})$$

$$\rho(\mathbf{q}) = \sqrt{2/L} \sum_{\mathbf{k}} a^+(\mathbf{k}) a(\mathbf{q} + \mathbf{k}) = \rho^*(-\mathbf{q}),$$

$$\tau(\mathbf{q}) = \sqrt{2/L} \sum_{\mathbf{k}} b^+(\mathbf{k}) b(\mathbf{q} + \mathbf{k}) = \tau^*(-\mathbf{q}), \quad (\text{П4.3})$$

при этом

$$n_A^2(i) = n_A(i), \quad \sqrt{2/L} \sum_{\mathbf{k}} \rho^+(\mathbf{k}) \rho(\mathbf{q} + \mathbf{k}) = \rho(\mathbf{q}). \quad (\text{П4.4})$$

Здесь учтено, что при $L \gg 1$ сумма

$$(2/L) \sum_i \exp(ikr_i) = \delta_{k0}. \quad (\text{П4.5})$$

Для среднего значения оператора S_{Az} , в частности, получим

$$\langle S_{Az} \rangle = 1/2 - (2/L) \sum_{\mathbf{q}} \langle a^+(\mathbf{q})a(\mathbf{q}) \rangle = 1/2 - \langle n_A \rangle = 1/2 - \sqrt{2/L} \langle \rho(0) \rangle, \quad (\text{П4.6})$$

где $\langle n_A \rangle = \langle a^+a \rangle = \sqrt{2/L} \langle \rho(0) \rangle$ — среднее *сокращение спина* на узле подрешетки \mathbf{A} в спин-волновом приближении.

Приближение Тябликова [2.59] состоит в пренебрежении флуктуациями параметров дальнего порядка, описываемых операторами S_{Az} и S_{Bz} , то есть в замене правых частей коммутаторов (П4.2) их средними значениями

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - 2\sqrt{1/L} \rho(\mathbf{q} - \mathbf{q}') &\Rightarrow 2\langle S_{Az} \rangle \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = (1 - 2\langle n_A \rangle) \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \\ \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - 2\sqrt{1/L} \alpha(\mathbf{q} - \mathbf{q}') &\Rightarrow -2\langle S_{Bz} \rangle \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = (1 - 2\langle n_B \rangle) \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}. \end{aligned} \quad (\text{П4.7})$$

В этом случае перестановочные соотношения приобретают квазибозевский вид, то есть отличаются от чисто бозевских соотношений постоянными множителями при $\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$.

Низкотемпературному спин-волновому приближению, которым далее ограничимся, соответствует малое значение среднего сокращения спина, приходящееся на узел подрешетки \mathbf{A} и \mathbf{B} $\langle n_{A(B)} \rangle \ll 1$.

В этом приближении спиновая волна создается лишь поперечными составляющими спина, то есть представляет собой волну фазового угла прецессии спинов вокруг оси квантования. Приближение Тябликова позволяет перейти к рассмотрению конечных температур, которое справедливо для $\langle n_{A(B)} \rangle \leq 1$.

С точностью до квадратичных относительно операторов $a(\mathbf{q})$ и $b(-\mathbf{q})$ гамильтониан симметричной модели антиферромагнетика типа «легкая ось» (6.9) принимает вид [2.59]:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_S = -LJz/8 + \sum_{\mathbf{q}} \{ J^+ a^+(\mathbf{q})a(\mathbf{q}) + J^- b^+(-\mathbf{q})b(-\mathbf{q}) + \\ + Z\gamma_{\perp} J_{\perp} / 2 (a^+(\mathbf{q})b^+(-\mathbf{q}) + a(\mathbf{q})b(-\mathbf{q})) \}, \end{aligned} \quad (\text{П4.8})$$

где для решетки с центром инверсии имеем

$$f^{\pm} = (JZ/2 \pm \omega_S), \quad \gamma_{\mathbf{q}} = \gamma_{-\mathbf{q}} = 1/Z \sum_{\delta \neq 0} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}), \quad \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} = 0. \quad (\text{П4.9})$$

В частности, для простой тетрагональной решетки (a, c — постоянные решетки) получим

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \gamma_{-\mathbf{q}} = (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z c)/3, \quad Z = 6. \quad (\text{П4.10})$$

Литература к части 2

1. Jones J. A. NMR Quantum Computation: a Critical Evaluation // 2000, Fortschr der Phys., 2000, v. 48, № 9–11, pp. 909–924.
2. Валеев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность, 2-ое издание, — Москва–Ижевск: НИЦ РХД, 2002, 320 с.
3. Knill E., Chuang I., Laflamme R. Effective Pure States for Bulk Quantum Computation // Phys. Rev., 1998, v. A57, № 5, pp. 3348–3363.
4. Menicucci N. C., Caves C. M. Local Realistic Model for the Dynamics of Bulk-Ensemble NMP Information Processing // E-print LANL, 2001, arXiv: quant-ph/0111152.
5. Dür W., Cirac C. I., Tarrach R. Separability and Distillability of Multiparticle Quantum Systems // Phys. Rev. Lett., 1999, v. 83, № 17, pp. 3562–3565.
6. Preskill J. Reliable Quantum Computers // Proc. Roy. Soc. Lond., 1998, v. A454, N.1969, pp. 385–410. /Прескилл Дж. Квантовые вычисления: за и против. Перевод с англ. под ред. В. А. Садовниченко: Сборн. «Квантовый компьютер & квантовые вычисления» I. — Ижевск: НИЦ РХД, 1999, с.71–100.
7. Kak S. The Initialization Problem in Quantum Computing // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0010109 v2.
8. Kak S. Statistical Constraints on State Preparation for a Quantum Computer // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0010109 v2.
9. Kak S. Are Quantum Computing Models Realistic? // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0110040 v3.

10. *Kak S.* Uncertainty in Quantum Computation // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0206006.
11. *Kak S.* General Qubit Errors Cannot Be Corrected // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0206144.
12. *Nielsen M. A., Chuang I. I.* Quantum Computation and Quantum Information. — Cambridge Univ. Press, 2000, 676 p.
13. *Goodman J. W.* Statistical Optics — N.Y.: John Wiley & Sons, 1985, 550 p. / Гудмен Дж. Статистическая оптика. / Перев. с англ. А. А. Кокина, под ред. Г. В. Скороцкого. — М: Мир, 1988, 528 с.
14. *Dyakonov M. I.* Quantum computing: A View from the Enemy Camp // E-print LANL, 2001, arXiv: cond-mat/0110326.
15. *Berman G. P., Doolen G. D., Kamenev D. I., López G. V., Tsifronovich V. I.*, Perturbation Theory and Numerical Modeling of Quantum Logic Operations with a Large Number of Qubits. // 2001, arXiv: quant-ph/0107038.
16. *Kane B. E.* A silicon-based nuclear spin quantum computer // Nature, 1998, v. 393, N.5, pp. 133–137.
17. *O'Brien J. L., Schofield S. R., Simmons V. Y., Clark R. G., Dzurak A. S., Curson N. J., Kane B. E., McAlpine N. S., Hawley M. E., Brown G. W.* Towards the Fabrication of Phosphorus Qubits for a Silicon Quantum Computer // Phys. Rev., 2001, v. B64, pp. 161401(R).
18. *Buehler T. M., McKinnon R. P., Lumpkin N. T., Brenner R., Reilly D. J., Macks L. D., Hamilton A. R., Dzurak A. S., Clark R. G.* Self-Aligned Fabrication Process for Quantum Computer Devices // LANL E-print, 2002, quant-ph/0208374.
19. *Buehler T. M., Reilly D. J., Brenner R., Hamilton A. R., Dzurak A. S., Clark R. G.* Correlated Charge Detection for Read-out of a Solid State Quantum Computer // LANL E-print, 2002, quant-ph/0207597.
20. *Fehér G.* Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. I. Electron Structure of Donors by the Electron Nuclear Double Resonance Technique // Phys. Rev., 1959, v. 114, №5, pp. 1219–1244.
21. *Kane B. E., McFlpine N. S., Dzurak A. S., Clark R. G., Milburn G. J., Sun H. B., Wiseman H.* Single Spin Measurement Using Single

- Electron Transistors to Probe Two Electron Systems // *Phys. Rev.*, 2000, v. B61, p. 2961.
22. *Fehér G, Gere E. A.* Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. III/ Electron Spin Relaxation Effects // *Phys.Rev.*, 1959, v. 114, №5, pp. 1245–1256.
 23. *Kane B. E.* Silicon-Based Quantum Computation // *Fortschr. der Phys.*, 2001, v. 48, № 9–11, pp. 1023–1041.
 24. *Валиев К. А., Кокин А. А.* Полупроводниковые ЯМР квантовые компьютеры с индивидуальным и ансамблевым обращением к кубитам // *Микроэлектроника*, 1999, т.28, № 5, с. 325–336.
 25. *Valiev K. A., Kokin A. A.* Solid-State NMR Quantum Computer with Individual Access to Qubits and Some Their Ensemble Developments // LANL E-print, 1999, quant-ph/9909008.
 26. *Валиев К. А., Кокин А. А., Ларионова А. А., Федичкин Л. Е.* Сверхтонкая структура энергетического спектра донорных атомов ^{31}P в кремниевом ЯМР квантовом компьютере // *Микроэлектроника*, 2000, т. 29, № 5, с. 323–332.
 27. *Larionov A. A., Fedichkin L. E., Kokin A. A., Valiev K. A.* The Nuclear Magnetic Resonance Spectrum of ^{31}P Donors in a Silicon Quantum Computer // *Nanotechnology*, 2000, v. 11, N.4, Spec. Issue, pp. 392–396.
 28. *Kokin A. A., Valiev K. A.* Problems in Realization of Large-Scale Ensemble Silicon-Based NMR Quantum Computers // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0201083.
 29. *Abragam A.* The Principles of Nuclear Magnetism. — Oxford: Clarendon Press, 1961. / *А. Абрагам.* Ядерный магнетизм. / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скроцкого. — М.: ИИЛ, 1963, 552 с.
 30. *Валиев К. А.* Магнитный резонанс на ядрах парамагнитных атомов // *ЖЭТФ*, 1957, т.33, вып. 4 (10), с. 1045–1047.
 31. *Лаврентьев М. А., Шабат Б. В.* Методы теории функций комплексного переменного — М.: Гос. Изд. Физматлит, 1958, с. 678.
 32. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М: Наука, 1974, с. 752.

33. *Berman G. P., Campell D. K., Doolen G. D., Nagaev K.E.* Dynamics of the Measurement of Nuclear Spins in a Solid-State Quantum Computer // E-print LANL, 1999, cond-mat/9905200.
34. *Kettle L. M., Goan H.-S., Smith S. C., Wellard C. J., Hollenberg L.C./L., Pakes C. I.* Numerical Study of Hydrogenic Effective Mass Theory for an Impurity P Donor in Si in Presence of an Electric Field and Interfaces // E-print LANL, 2003, arXiv: quant-ph/0308124.
35. *Koiller B., Hu X., Das Sarma S.* Strain Effects on Silicon Donor Exchange: Quantum Computer Architecture Considerations // E-print LANL, 2001, arXiv: quant-ph/0112078.
36. *Skinner A. J., Davenport M. E., Kane B. E.* Hydrogenic Spin Quantum Computing in Silicon: a Digital Approach // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0206159.
37. *Privman V., Vagner I. D., Kventsel G.* Quantum Computation in Quantum-Hall Systems // Phys. Lett., 1998, v. A239, 2 March, pp. 141–146.
38. *Mozyrsky D., Privman V., Glasser M. L.* Indirect Interaction of Solid-State Qubits via Two-Dimensional Electron // Phys. Rev. Lett., 2001, v. 22, № 22, pp. 5112–5115.
39. *Ladd T. D., Goldman J. R., Dâna A., Yamaguchi F., Yamamoto Y.* Quantum Computation in a One-Dimensional Crystal Lattice with NMR Force Microscopy // E-print LANL, 2000, arXiv: quant-ph/0009122.
40. *Haeberelen U.* High Resolution NMR in Solids. Selective Averaging. — N.Y.: Acad. Press: 1976. / Хеберлен У., Меринг М. ЯМР высокого разрешения в твердых телах / Перевод с англ. под ред. Г. В. Скродцкого и Э. Т. Липпмаа. — М.: Мир, 1980, 504 с.
41. *Ladd T. D., Goldman J. R., Dâna A., Yamaguchi F., Yamamoto Y., Abe E., Itoh R. M.* An All Silicon Quantum Computer // E-print LANL, 2001, arXiv:quant-ph/0109039; Phys.Rev.Lett., 2002, v. 89, pp. 017901.
42. *Fel'man E. B., Lacelle S.* Perspectives on a Solid State NMR Quantum Computer // E-print LANL, 2001, arXiv:quant-ph/0108106.
43. *Wellard C. J., Hollenberg L. C. L.* Stochastic Noise as Source of Decoherence in a Solid State Quantum Computer // E-print LANL, 2001, arXiv:quant-ph/0104055.

44. *Kokin A. A.* Decoherence of Quantum States and Its Suppression in Ensemble Large-Scale Solid State NMR Quantum Computers // Proceeding. of SPIE 2003, v. 5128, p.182-189 // E-print LANL, 2002, arXiv:quant-ph/0211096.
45. *Kokin A. A., Valiev K. A.* Some Prospects for Ensemble Solid-State NMR Quantum Computers // E-print LANL, 2003, arXiv: quant-ph/0306005.
46. Физические величины. Справочник. Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова — М.: Энергоатомиздат, 1991, 1232 с.
47. *Lloyd S.*, A Potentially Realizable Quantum Computer, *Science*, 1993, vol. 261, pp. 1569–1571.
48. *Wei H., Xue X., Morgera S. D.*, NMR Quantum Automata in Doped Crystals, 1998, E-print LANL: quant-ph/9805059.
49. *Lloyd S.*, Programming Pulse Driven Quantum Computers. E-print LANL: quant-ph/9912086.
50. *Benjamin S. C.* Schemes for Parallel Quantum Computation Without Local Control of Qubits // *Phys.Rev.*, 2000, v. A61, pp. 020301(R).
51. *Kokin A. A.* A Model for NMR Quantum Cellular Automata Using Antiferromagnetic Structure // *Quantum Computers & Computing*, 2001, v. 2, N.1, pp. 54–67.
52. *Kokin A. A.* An Antiferromagnet-Based NMR Quantum Computer // *Phys. Metal. Metallogr.*, 2001, v. 92, Suppl.1, pp. S150–S156.
53. *Brasovskii S. A., Kirova N. N.* Electron Selflocalization and Superstructures in Quasi-One-Dimensional Dielectrics. *Physics Reviews, Soviet Scientific Reviews*, 1984, Sec.A, v. 5, pp. 99–265.
54. *Benjamin S. C.* Quantum Computing Without Local Control of Qubit-Qubit Interactions // *Phys. Rev. Lett.*, 2002, v. 88, № 1, pp. 017904-1–017904-4.
55. *Ernst R. R., Bodenhausen G., Wokaun A.* Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions. — Oxford: Univ. Press, 1994, 650 p. / Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. / Перевод с англ. 1-го издания 1987 г. под ред. К. М. Салихова. — М.: Мир, 1990, 710 с.
56. *Туров Е. А., Петров М. А.* Ядерный магнитный резонанс в ферро- и антиферромагнетиках. — М.: Наука 1969, 260 с.

57. *Twamley J.* Quantum Cellular Automata Quantum Computing with Endohedral Fullerenes // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0210202.
58. *Raussendorf R., Briegel H. J.* Computational Model Underlying the One-Way Quantum Computer // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0108067 v. 2.
59. *Тябликов С. В.* Методы квантовой теории магнетизма. — М.: Наука, 1975, 528 с.
60. *Туров Е. А.* Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов. — М.: АН СССР, 1963, 224 с.
61. *Туров Е. А., Колчанов А. В., Меньшиков В. В., Мирсаев И. Ф., Николаев В. В.* Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. — М.: Физматлит, 2001, 560 с.
62. *Лымарь В. М., Рудой Ю. Г.* Обобщенное приближение Хартри-Фока для антиферромагнетика (антиферромагнитная фаза). Глава 4. Дополнения к книге [2.59].
63. *Туров Е. А.* Ширина линии ферромагнитного резонансного поглощения. Сборник Ферромагнитный резонанс — М.: Гос. Изд. Физматлит, 1961, с. 215.
64. *Куркин М. И., Туров Е. А.* ЯМР в магнито-упорядоченных веществах и его применение. — М.: Наука, 1990, 246 с.
65. *Куркин М. И., Иванов С. В., Куневич А. В.* Ядерная магнитная релаксация в магнитоупорядоченных веществах // Препринт, ИФМ УНЦ АН СССР — Свердловск, 1984, с. 45.
66. *Viola L., Lloyd S.* Dynamical Suppression of Decoherence in Two-State Quantum Systems // *Phys. Rev.*, 1998, v. A58, pp. 2733–2745.
67. *Bacon D., Kempe J., Lidar D. A., Whaley K. B.* Universal Fault-Tolerant Quantum Computation on Decoherence-Free Subspaces // *Phys. Rev. Lett.*, 2000, v. 85, p. 2594–2599.
68. *Kempe J., Bacon D., Lidar D. A., Whaley K. B.* Theory of Decoherence-Free Fault-Tolerant Universal Quantum Computation // *Phys. Rev.*, 2001, v. A63, pp. 042307.

Предметный указатель

- алгоритм факторизации Шора 93
- ансамбль двухкубитовый 47
 - многокубитовый 59
 - однокубитовый 20
- антипересечение 129
- антиферромагнитный кристалл 173, 185
- базис вычислительный 28, 48, 53
 - ортогональный 29
- вектор Блоха 17
 - состояния 16, 28
- взаимодействие косвенное 122, 137, 168, 178
 - диполь-дипольное 153, 174, 178
 - обменное 174, 175
 - сверхтонкое 120, 178
 - сул-накамуровское 183
- время декогерентизации 22, 40, 79
 - корреляции 70
 - релаксации поперечное 22, 85
 - — продольное 22
- декогерентизация 10, 22, 63, 184
 - адиабатическая 68, 72, 77, 80, 88, 150, 153
- диссипация 22
- инициализация 28
- запутанность 32
 - максимальная 42
 - частичная 47
- квантовое дискретное фурье-преобразование 35
- квантовый клеточный автомат 156, 160
 - регистр 27, 39, 106
 - фазовый переход 50
- когерентность 17, 18
- коэффициент усиления 124
- кубит 9, 5
 - логический 113, 156, 161
 - физический 113
- кубитовое кольцо 46
- марковский процесс 23
- матрица плотности 16, 20
 - приведенная 20, 24, 59
 - релаксионная 61
- матрицы Паули 15
- оператор Линдблада 60
- оператор рождения спиновой волны 175, 194
 - уничтожения спиновой волны 175, 194
- операция Адамара 31
 - двухкубитовая 32, 40
 - инверсии 30
 - контролируемого изменения фазы 34
 - контролируемое НЕ (CNOT) 32
 - логическая 30
 - однокубитовая 30, 40
- отношение сигнал-шум 142, 148
- ошибка амплитудная 108
 - амплитудно-фазовая 108
 - фазовая 108
- преобразование унитарное 29, 30
- приближение Тябликова 194
- согласованность запутанного состояния 32, 48

- состояние квантовое квазичистое 21
- — когерентное 18
 - — максимально запутанное 42
 - — частично запутанное 47
 - — смешанное 20
 - — чистое 18
 - — синглетное 33, 42, 122, 131
 - — триплетное 42, 122, 131
- спиновое кольцо 46
- спиновые волны 175, 180, 194
- спиновый гамильтониан 174
- — секулярный 68, 150, 183
- суперпозиция 29
- сфера Блоха 18
- схема Кейна 119, 123
- тензор квантовых корреляций 43
- точность воспроизведения 67, 107
- упорядочение антиферромагнитное 141, 159, 160, 168
- ферромагнитное 168
- уравнение Блоха 22, 62
- — обобщенное 24, 26
 - Линдблада 60, 61
- формула Брейга–Раби 120
- фуллерены 170
- функция памяти 23
- частота Раби 124
- эффект усиления 124
- ядерный магнитный резонанс (ЯМР) 102
- спин 15
- ЯМР квантовый компьютер ансамблевый 102, 136
- — — полномасштабный 39, 102

Интересующие Вас книги нашего издательства можно заказать почтой или электронной почтой:

subscribe@rcd.ru

Внимание: дешевле и быстрее всего книги можно приобрести через наш Интернет-магазин:

http://shop.rcd.ru

Книги также можно приобрести:

1. Москва, ФТИАН, Нахимовский проспект, д. 36/1, к. 307, тел.: 332-48-92
(почтовый адрес: Нахимовский проспект, д. 34)
2. Москва, ИМАИШ, ул. Бардина, д. 4, корп. 3, к. 414, тел. 135-54-37
3. МГУ им. Ломоносова (ГЗ, 1 этаж)
4. Магазины:

Москва: «Дом научно-технической книги» (Ленинский пр., 40)
«Московский дом книги» (ул. Новый Арбат, 8)
«Библиоглобус» (м. Лубянка, ул. Мясницкая, 6)
Книжный магазин «ФИЗМАТКНИГА» (г. Долгопрудный,
Новый корпус МФТИ, 1 этаж, тел. 409-93-28)

С.-Пб.: «С.-Пб. дом книги» (Невский пр., 28)

Кокин Александр Александрович

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ НА ЯДЕРНЫХ СПИНАХ

Дизайнер М. В. Ботя

Технический редактор Л. В. Щиробоков

Корректор З. Ю. Соболев

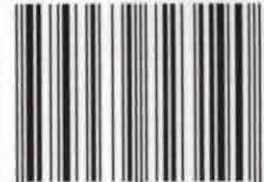
Подписано в печать 7.06.2004. Формат 60 x 84¹/₁₆.
Гарнитура Таймс. Усл. печ. л. 11,86. Уч. изд. л. 11,46.
Печать офсетная. Бумага офсетная №1. Заказ №210.

АНО «Институт компьютерных исследований»

г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

<http://rcd.ru> E-mail: borisov@rcd.ru

ISBN 5-93972-319-5



9 785939 723190