

ФИЗИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

КОКИН Александр Александрович

**ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ ЯДЕРНЫЕ МАГНИТО-РЕЗОНАНСНЫЕ (ЯМР)
АНСАМБЛЕВЫЕ КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ
(ИССЛЕДОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ И ПРОБЛЕМ РЕАЛИЗАЦИИ)**

Специальность 05.27.01 — твердотельная электроника,
радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника,
приборы на квантовых эффектах

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва 2003

СОДЕРЖАНИЕ

Содержание.....	2
Введение	5
Литература к Введению	13
Глава I. Физические основы ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров.....	15
1.1. Квантовые двухуровневые информационные ячейки-кубиты — основные элементы квантового компьютера.....	15
1.2. Релаксационные процессы в однокубитовом ансамбле. Уравнение Блоха и его обобщение.....	19
1.3. Принципиальная схема квантового компьютера.....	23
1.4. Чистые состояния отдельной двухкубитовой системы	26
1.5. Смешанные состояния ансамбля двухкубитовых систем	31
1.6. Состояния многокубитовых квантовых регистров — одномерных цепочек спинов	35
1.7. Динамические процессы в ансамбле двухкубитовых систем. Основные уравнения	42
1.8. Декогерентизация состояний кубитов и способы ее описания.....	46
1.9. Точно решаемая квантовая модель адиабатической декогерентизации состояния кубита и ее трудности	51
1.10. Двухбозонная модель адиабатической декогерентизации состояния ядерного спина-кубита.....	57
1.11. Полуклассическая модель адиабатической декогерентизации в однокубитовом ансамбле.....	60
1.11.1. Адиабатическая декогерентизация в однокубитовом ансамбле.....	60
1.11.2. Адиабатическая декогерентизация в многокубитовом ансамбле.	63
1.12. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, взаимодействующих с магнитными моментами примесных атомов	67
1.13. Квантовое дискретное фурье-преобразование и трудности его реализации на ЯМР квантовых компьютерах.....	69
1.14. Алгоритм факторизации Шора на основе квантового фурье-преобразования.....	73
1.15. Квантовое вейвлет-преобразование в алгоритме факторизации	76
Приложение П1. Обобщенное уравнение Блоха для немарковского случайного процесса	84
Приложение П2. Основные одно– и двухкубитовые квантовые операции.....	86
Литература к Главе I.....	89

Глава II. Ансамблевые твердотельные ЯМР квантовые компьютеры	93
2.1. Общие проблемы реализации полномасштабного ЯМР квантового компьютера. 93	
2.2. Проблемы приготовления базисных состояний многокубитового квантового регистра и решение их в ансамблевом подходе	97
2.3. Проблема уменьшения вероятности вычислительной ошибки для состояний квантового регистра, представляющих высшие разряды	104
2.4. Проблемы, связанные с выполнением вычислительных операций и измерениями состояний кубитов.....	105
2.5. Кремниевый многокубитовый ЯМР квантовый компьютер по схеме Кейна и проблемы его реализации.....	109
2.6. Исследование и развитие схемы Кейна ЯМР квантовых	113
компьютеров	113
2.6.1. Эффект усиления сигнала ЯМР	113
2.6.2. Энергетический спектр электронно-ядерной спиновой системы двух доноров	116
2.6.3. Электрический контроль состояний кубитов	120
2.7. Варианты многокубитовых ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров	123
2.7.1. Ансамблевый твердотельный ЯМР квантовый компьютер с двухмерным электронным газом	123
2.7.2. Ансамблевый ЯМР квантовый компьютер на естественных кристаллах	125
2.7.3. Ансамблевый ЯМР квантовый клеточный автомат	126
2.8. Проблемы реализации ансамблевого кремниевого ЯМР квантового компьютера с полосковыми затворами.....	130
2.8.1. Кремниевый ансамблевый ЯМР квантовый компьютер с полосковыми затворами.....	130
2.8.2. Отношение сигнал-шум в ансамблевом жидкостном ЯМР квантовом компьютере	134
2.8.3. Охлаждение ядерных спиновых систем и инициализация ядерных спиновых состояний путем динамической поляризации	137
2.8.4. Отношение сигнал-шум для ансамблевого кремниевого квантового компьютера	140
2.8.4. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, обусловленная модуляцией секулярной части сверхтонкого взаимодействия	142
2.8.5. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, обусловленная взаимодействием с ядерными спинами примесных атомов.....	144

2.9. Ансамблевый многокубитовый ЯМР квантовый клеточный автомат на структурах с антиферромагнитным упорядочением.....	147
2.9.1. ЯМР квантовый клеточный автомат на основе изинговского антиферромагнетика	147
2.9.2. Организация логических операций в квантовом ЯМР клеточном автомате..	151
2.9.3. ЯМР квантовый клеточный автомат с несимметричным взаимодействием ядерного спина с соседними спинами.....	153
2.9.4. ЯМР квантовый клеточный автомат на периодической структуре из эндоэдрально легированных фуллеренов	156
2.10. ЯМР квантовые клеточные автоматы на антиферромагнитных кристаллах	159
2.10.1. Гамильтониан электрон-ядерной системы спинов в антиферромагнетике..	159
2.10.2. Косвенное взаимодействие между ядерными спинами в антиферромагнетике	163
2.10.3. Декогерентизация состояний ядерных спинов в легкоосных антиферромагнетиках	168
2.10.4 Основные требования к антиферромагнитным кристаллам	171
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	174
Приложение П3. Сигнал ЯМР от ансамбля ядерных спинов.....	177
Приложение П4. Двухкубитовая операция CNOT в одномерном ЯМР квантовом клеточном автомате.....	178
Приложение П5. Спин-волновое приближение для подсистемы электронных спинов в антиферромагнетике и приближение Тябликова	181
Литература к Главе II.....	182

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 ряд других. Уже в середине века физика полупроводников стала научной базой быстроразвивающейся 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* [6]), в отличие от классической системы с тем же числом классических битов, может находиться в произвольной *когерентной суперпозиции* из 2^L булевых состояний, иначе говоря, 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, то есть понадобились бы *экспоненциально большие* вычислительные ресурсы. 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 недоступное классическим компьютерам, может эффективно осуществляться на основе использования *унитарных* квантовых операций, которые действуют в 2^L -мерном гильбертовом пространстве состояний.

Элементарной квантовой операцией в этом случае 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 в случае случайно неоднородной структуры ансамбля кубитов, имеет место процесс разрушения когерентных квантовых состояний или **декогерентизация** (decoherence), 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 относятся к классу **не вычисляемых** задач 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 со временем 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 неопределимое 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 **полномасштабный многокубитовый** квантовый компьютер является пока умозрительной конструкцией. К ним, в частности, относятся твердотельные ядерных магнито-резонансных (ЯМР) квантовые компьютеры, использующие в качестве кубитов **ядерные спины** со спиновым квантовым числом $I = 1/2$.

Однако пока созданы простейшие прототипы жидкостных **ЯМР** квантовых компьютеров на органических молекулах с числом ядерных спинов-кубитов $L \leq 7$, молекулы в котором представляют собой большой ансамбль независимо работающих молекул–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 [9]. 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* [10,11], что позволит реализовать надежную работу полномасштабных многокубитовых квантовых компьютеров и такие действия, которые до сих пор считались вообще неосуществимыми.

Количество публикаций по квантовым вычислениям и квантовой теории передачи информации в настоящее время приобрело лавинообразный 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 — этого нового направления в вычислительной технике, а также других совершенно новых квантовых технологий [12]. Детальный анализ состояния исследований в области квантовых компьютеров и квантовых вычислений на начало 2001 года был дан в монографиях [11, 13].

Полномасштабный квантовой компьютер, превосходящий по своим возможностям любой работающий на булевой логике классический компьютер, должен иметь квантовые регистры, включающий не менее 1000 кубитов, а также удовлетворять ряду других требований, в частности, вытекающих из условия помехозащищенности квантовых вычислений [14,15]. Такого числа кубитов можно достигнуть, вероятнее всего, лишь в твердотельном исполнении при низких температурах [13].

Постоянно растущее число предложенных вариантов многокубитовых квантовых компьютеров и, в частности, предпринимаемые уже в этом направлении первые успешные экспериментальные шаги по созданию кремниевого многокубитового ЯМР квантового компьютера, основанные на использовании схемы Б.Кейна [16], в Австралийском Центре технологии квантовых компьютеров [17, 18], внушают оптимизм относительно возможности осуществления полномасштабного квантового компьютера.

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

Среди таких проблем выделим следующие:

1. Контроль и измерение состояний отдельных кубитов в многокубитовом ЯМР квантовом регистре является еще *не решенной в практическом плане задачей*.
2. Не исследована возможность использования *ансамблевого подхода* в твердотельных квантовых компьютерах.
3. Недостаточно изучены основные *механизмы декогерентизации состояний* в твердотельных квантовых регистрах и не разработаны практические способы *подавления* этих механизмов.
4. Не изучены возможности использования *для инициализации* состояния ЯМР квантового регистра *методов динамической поляризации* ядерных спинов.
5. Отсутствуют исследования возможности создания твердотельных квантовых компьютеров с архитектурой *квантового клеточного автомата*.

Решение отмеченных проблем *является актуальным*, прежде всего, с точки зрения разработки способов реализации *полномасштабных ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров*. Кроме того, их рассмотрение представляет также и значительный *общефизический интерес*.

Цель работы:

1. *Теоретическое изучение физических основ и обоснование* новых твердотельных вариантов ансамблевых многокубитовых ЯМР квантовых регистров, позволяющих преодолеть основные трудности, встречающиеся на пути осуществления известных вариантов.

2. *Разработка способов* реализации общих требований [5,6], предъявляемых к полномасштабным квантовым компьютерам, при использовании ансамблевого принципа обращения к кубитам квантового регистра.

Для решения поставленных задач были использованы методы физики полупроводниковых приборов микро- и наноэлектроники, физики ядерного магнитного резонанса, квантовые методы магнетизма, методы квантовой теории информации.

Диссертация состоит из введения двух глав, включающих, соответственно, 15 и 10 разделов, 5 приложений и заключения, содержит 22 рисунка и списки литературы по главам, всего 151 название. Общий объем диссертации 187 страниц.

Логическая структура диссертации:

В первой Главе «ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ АНСАМБЛЕВЫХ ЯМР КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ» представлены результаты теоретических исследований основных физических свойств многокубитовых квантовых регистров, имеющих существенное значение для создания твердотельных ЯМР ансамблевых квантовых компьютеров. Изложены основы квантового вейвлет-преобразования и продемонстрированы преимущества использования их для реализации алгоритма факторизации.

Новые результаты первой Главы:

1. Получено обобщение уравнения Блоха на случай сильных переменных магнитных полей при не различных значениях поперечного и продольного времен релаксации, а также на случай немарковского характера случайных воздействий со стороны окружения.

2. Выполнен анализ квантовых состояний двухкубитового ансамбля и сформулированы условия, при которых возможна полная инициализация состояний кубитов. Показано, что произвольное квантовое состояние не может быть преобразовано в квазичистое инициализированное состояние с помощью известных операций.

3. Выполнен анализ особенностей релаксационных процессов в многокубитовых системах с учетом парных запутанных состояний кубитов. Указан способ обобщения уравнения Линдблада на случай двухкубитового ансамбля с отличными от нуля равновесными значениями динамических параметров и сильных внешних полей, а также на случай немарковского характера случайных воздействий на спины.

4. Рассмотрены инвариантные относительно выбранного представления матрицы плотности способы описания процессов декогерентизации состояний многокубитовых систем в твердых телах. Продемонстрированы возможности полуклассической адиабатической модели декогерентизации однокубитового и двухкубитового состояния.

5. Показана неудовлетворительность широко известной точно решаемой адиабатической однобозонной квантовой модели декогерентизации однокубитового ансамбля. Предложена новая квантовая двухбозонная модель адиабатической декогерентизации состояний кубитов в твердом теле, свободная от недостатков однобозонной модели, и выполнен ее анализ.

6. Предложена адиабатическая квантовая модель декогерентизации ядерных спинов за счет взаимодействия с магнитными моментами случайно распределенных примесных атомов.

7. Проведен анализ трудностей алгоритма факторизации Шора, основанного на квантовом фурье-преобразовании и предложен альтернативный вариант алгоритма, использующий вейвлет-преобразование.

Во второй Главе «АНСАМБЛЕВЫЕ ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ ЯМР КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ» представлены исследования общих проблем реализации ансамблевых твердотельных квантовых компьютеров и анализируются предлагаемые ансамблевые схемы полупроводникового ЯМР квантового компьютера с полосковыми затворами и ЯМР квантового клеточного автомата на антиферромагнитной структуре.

Новые результаты второй Главы:

1. В результате анализа общих требований, выполнение которых необходимо для построения полномасштабного квантового компьютера сделан вывод о перспективности разработки твердотельных ЯМР ансамблевых вариантов, работающих, при достаточно низких спиновых температурах.

2. Показано, что трудности в реализации полномасштабных квантовых компьютеров, связанные с появлением в процессе инициализации и выполнения логических операций суперпозиций основных состояний с неконтролируемыми фазовыми множителями, преодолеваются в случае использования ансамблевых квантовых регистров.

2. Показано, что трудность, связанная с увеличением вероятности вычислительной ошибки для состояний квантового регистра, представляющих высшие разряды, может быть преодолена путем использования метода связанного кодирования.

3 Дан анализ схемы полномасштабного ЯМР квантового компьютера с индивидуальным обращением к кубитам, предложенного Б.Кейном и сформулированы ее трудности. Исследован эффект усиления сигнала ЯМР и показано, что сам по себе не позволяет превысить максимально возможное значение сигнала при использовании стандартных методов ЯМР. Однако он позволяет снизить мощность радиочастотных импульсов и при той же мощности импульсов уменьшить их длительность.

4. Проведен детальный анализ сверхтонкой структуры энергетического спектра электрон-ядерной системы из двух соседних донорных атомов ^{31}P . Показано, что помимо предложенной Кейном для организации квантовых операций и измерения состояния кубита пары антипересекающихся уровней, может быть использована другая пара антипересекающихся уровней. Ее преимущество заключается в возможности детектировать изменение состояний ядерных спинов резонансными методами, что имеет особенное значение при использовании ансамблевого метода обращения к спинам-кубитами.

5. Показано, что для обеспечения необходимой точности выполнения квантовых операций следует выполнить достаточно жесткие требования к геометрическим параметрам наноструктуры (ошибки в размерах затворов, положениях донорных атомов и т.д. не должны превышать 1 нм). Отмечено также, что трудность управления кубитами, связанная с нерегулярным осциллирующим характером зависимости постоянной взаимодействия электронных

спинов от расстояния между донорными атомами, может быть преодолена в предлагаемом ансамблевом квантовом регистре.

6. Проанализированы известные варианты многокубитовых ЯМР ансамблевых квантовых компьютеров и предложен и новый вариант кремневого ЯМР ансамблевого квантового компьютера с полосковыми затворами, позволяющий преодолеть ряд основных трудностей схемы Кейна.

7. Показано, что 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 могут быть использованы *методы динамической поляризации* типа солид-эффекта.

8. Анализ отношения ЯМР сигнала к шуму для предложенной планарной структуры кремневого ЯМР ансамблевого компьютера показал возможность детектировать сигнал с помощью стандартной техники ЯМР при *числе элементов ансамбля* $N \sim 10^6$.

9. Показано, что к основным механизмам декогерентизации квантовых состояний в кремневых ансамблевых квантовых регистрах следует отнести *адиабатические процессы модуляции резонансной частоты*, обусловленные флуктуирующими сверхтонкими полями, а также взаимодействиями с ядерными спинами примесный диамагнитных атомов. В результате для обеспечения необходимого уровня подавления декогерентизации получено условие $V/T > 30 \text{ Тл/К}$ и предельное значение концентрации примесный атомов.

10. Предложена модель ЯМР ансамблевого квантового клеточного автомата и дана схема вводы и вывода информации, а также схемы выполнения однокубитовых и двухкубитовых квантовых операций. К преимуществам такого автомата можно отнести:

а) Глобальное обращение ко всем элементам цепочки кубитов с двумя резонансными частотами позволяет исключить многочисленные металлические шины, затворы и многочастотные генераторы импульсов, требуемые для локального управления кубитами.

б) Сложности, связанные аппаратным обеспечением компьютера, в значительной степени переносятся на программное обеспечение квантового клеточного автомата.

в) Квантовые клеточные автоматы возможно способны выполнять программы, которые не доступны обычным квантовым схемам.

г) Важным свойством является возможность запараллелить квантовые вычислительные операции при использовании ансамблевого подхода, что может также существенно упростить и считывание информации.

11. Получено обобщенное выражение для гамильтониана системы ядерных спинов в антиферромагнетике с одноосной симметрией типа легкой оси, учитывающее их косвенное взаимодействие через спин волновые состояния электронных спинов с учетом как сверхтонкого, так и диполь-дипольного взаимодействия с электронными спинами соседних атомов.

12. Предложена схема ансамблевого ЯМР квантового клеточного автомата на антиферромагнитной структуре.

13. Сформулированы основные требования к естественным антиферромагнитным кристаллам, предназначенным для использования в качестве среды, содержащей ядерные спины-кубиты, для ЯМР ансамблевого клеточного автомата.

В **ЗАКЛЮЧЕНИИ** представлен анализ полученных результатов, формулируются выводы относительно перспективности использования ансамблевого подхода при создании твердотельных ЯМР квантовых компьютеров и квантовых автоматов.

Практическая значимость работы.

Результаты проведенных исследований показали ***преимущества предложенного ансамблевого подхода*** при решении многих из перечисленных проблем. Они позволяют сформулировать необходимые при проектировании и реализации конкретных схем полномасштабных ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров и квантовых клеточных автоматов ***технические и технологические требования***. Разработанные в результате теоретических исследований многокубитовых квантовых регистров модели, позволяющие описывать процессы инициализации и декогерентизации квантовых состояний, могут быть положены в основу общих ***методов моделирования*** многокубитовых квантовых компьютеров.

Апробация. Основные результаты в области физики ЯМР в твердых телах и ЯМР квантовых компьютеров, относящиеся к теме представленной диссертации, были получены и опубликованы автором в периоды с 1959 по 1970 годы и с 1999 по 2002 годы. Они изложены в кандидатской диссертации (1961 г.), в книге «Уширение резонансных линий и релаксация» (МФТИ, 1970 г.), в монографии Валиева К.А. и Кокина А.А. «Квантовые компьютеры: надежды и реальность» (2001, 2002), в 14 статьях (в том числе 7 без соавторов), представлены в сообщениях на 12 школах и конференциях, а также в 4-х электронных препринтах. В период 1998 по 2002 годы, отдельные результаты неоднократно докладывались и обсуждались в Физико-технологическом институте РАН на семинаре по квантовым компьютерам, руководимом К.А.Валиевым, а также семинаре по квантовой информатике в МГУ. Список научных работ автора и с его участием по теме диссертации составляет 32 названия (см. ниже).

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Обоснование перспективности ансамблевых принципов в схемах многокубитового полупроводникового ЯМР квантового компьютера с полосковыми затворами и многокубитового ЯМР квантового клеточного автомата на антиферромагнитной структуре.

2. Схема планарного кремниевого ансамблевого многокубитового ЯМР квантового регистра с числом элементов ансамбля $N \sim 10^6$, позволяющая использовать стандартную технику ЯМР или технику ENDOR для измерения и контроля состояний кубитов.

3. Обобщение уравнений Блоха и Линдблада на случай немарковского характера случайных полей, создаваемых окружением, имеющее существенное значение для моделирования процессов декогерентизации состояний кубитов в ансамблевом квантовом регистре.

4. Модели адиабатической декогерентизации состояния кубита в ЯМР квантовом регистре, учитывающие двухбозонные упругие процессы рассеяния и взаимодействия с магнитными моментами примесных атомов, а также модель адиабатической декогерентизации двухкубитового состояния ядерных спинов в структуре с антиферромагнитным взаимодействием между кубитами.

5. Обоснование возможности использования для инициализации состояний ядерных спинов в ансамблевом квантовом регистре динамических методов поляризации типа солид-эффекта Абрагама при сохранении рабочей температуры системы в пределах 0,1 К.

6. Схема выполнения однокубитовых и двухкубитовых операций в ЯМР квантовом автомате.

7. Обоснование возможности использования для реализации ансамблевого ЯМР квантового автомата как искусственных, так и естественных двумерных и трехмерных антиферромагнитных структур, атомы которых имеют ядерные спины $I = 1/2$.

8. Вывод о том, что проблема появления в процессе инициализации неконтролируемых фазовых множителей со случайными аналоговыми фазами у составляющих суперпозиции базисных состояний решается в ансамблевых квантовых регистрах.

9. Обоснование возможности использования квантового вейвлет-преобразования в алгоритме факторизации для решения проблемы возрастающей экспоненциально с числом квантовых ЯМР операций временной цены этого алгоритма.

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. *Vandersypen L.M.K.* Experimental Quantum Computation with Nuclear Spins in Liquid Solution. Dissertation. // 2002, LANL E-print arXiv:quant-ph/0205193.
10. *Кумаев А.Ю.* Квантовые вычисления: алгоритмы и исправление ошибок. // УМН, 1997, т.**52**, вып. 6(318), с.53–112.
11. *Nielsen M.A., Chuang I.I.* Quantum Computation and Quantum Information. — Cambridge: Univ. Press, 2000, 676 p.
12. *Dowling J.P., Milburn G.J.* Quantum Technology: The Second Quantum Revolution. // 2002, LANL E-print arXiv:quant-ph/0206092.
13. *Валиев К.А., Кокин А.А.* Квантовые компьютеры: надежды и реальность. 2-е изд. — Москва-Ижевск : НИЦ РХД, 2002, 320 с.
14. *DiVincenzo D.P.* The Physical Implementation of Quantum Computation. // Fortschr. der Phys., 2000, v.**48**, № 9-11, pp.771–783.
15. *Steane A.M.* Overhead and Noise Threshold of Fault-Tolerant Quantum Error Correction. // 2002, LANL E-print arXiv:quant-ph/0207119.
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.161401-1–161401-5
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. // LANL E-print, 2002, cond-mat/0208374.

ГЛАВА I. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ АНСАМБЛЕВЫХ ЯМР КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ

1.1. Квантовые двухуровневые информационные ячейки-кубиты — основные элементы квантового компьютера

В качестве информационных ячеек квантовых компьютеров были предложены различные квантовые двухуровневые системы, в частности это:

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 $I = 1/2$. Уровни энергии, соответствующие гамильтониану спинового момента с гироманнитным 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) изображены на Рис. 1.1.

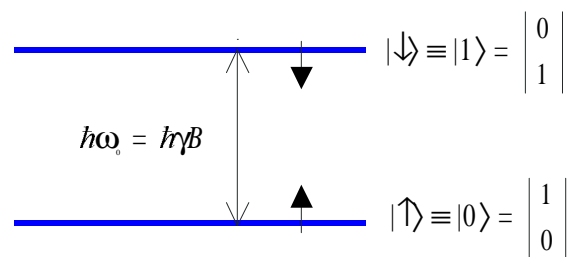


Рис. 1.1. Уровни энергии спина с $I = 1/2$ с $\gamma > 0$ в магнитном поле \mathbf{B}

Собственные состояния z -компоненты спинового момента (магнитное поле направлено по оси z) являются стандартным *ортгональным базисом* для описания спиновых квантовых состояний двухуровневой системы. При описании состояний квантовых двухуровневых элементов не спиновой природы часто пользуются аналогичным спину понятием *квасиспина*.

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 *когерент-*

ную суперпозицию базисных квантовых состояний, которая описывается в случае **чистого** (когерентного) **квантового состояния** одним из двух эквивалентных способов, а именно:

а) **Вектором состояния** (это спинор первого ранга в **двухмерном гильбертовом пространстве состояний**, в котором базисные вектора состояний играют роль единичных ортогональных векторов — ортов), представляемым двухрядной матрицей-столбцом

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

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 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).

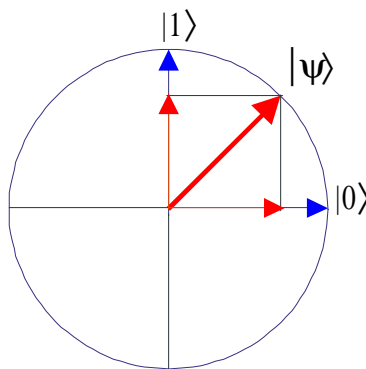


Рис. 1.2. Вектор состояния суперпозиции $|\psi\rangle = \sqrt{1/2} (|0\rangle + |1\rangle)$ и его проекции на направление базисных состояний в двухмерном гильбертовом пространстве

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

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

где $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$ — эрмитово-сопряженный вектор состояния, $P_x \pm i P_y \equiv P_\pm$, $\sigma_\pm = 1/2(\sigma_x \pm i\sigma_y)$, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — вектор с **матрицами Паули** в качестве компонент, $\mathbf{1}$ — единичная матрица 2×2 , $\mathbf{P} = \text{Sp } \rho \mathbf{r} = 2 \text{ Sp } \mathbf{I} \rho$ — классический трехмерный **единичный вектор Блоха**.

В выражении (1.2) общая фаза амплитуд выпадает, то есть является несущественной 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, чистое состояние квантового элемента определяется не только значениями вероятностей занять базисные 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*:

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

Двухуровневый квантовый элемент, способный находится в таком рассматриваемом состоянии, был назван Б.Шумахером *кубитом* (quantum bit \equiv qubit) [1.1]. Кубитом, аналогично классическому биту, стала называться также и единица количества квантовой информации. Понятие кубита является более общим, чем понятие бит, а система кубитов, кроме того, способна образовывать особого типа многокубитовые суперпозиции (запутанные состояния) (см. ниже), не имеющие аналогов в классических системах.

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. 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. Поэтому 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 $|\mathbf{P}| \equiv P = 1$ (Рис. 1.3.).

С помощью уравнения движения для матрицы плотности кубита $i\hbar\partial\rho/\partial t = [\mathbf{H}, \rho]$ и гамильтониана $\mathbf{H} = -\gamma\mathbf{I}\mathbf{B}$ для вектора Блоха получим уравнение движения:

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

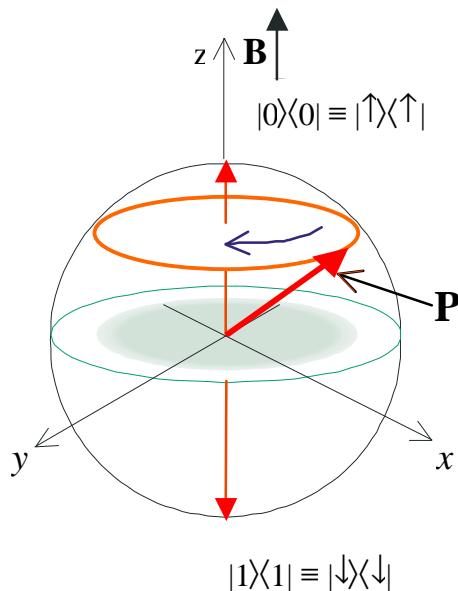


Рис. 1.3. Сфера Блоха, вектор Блоха в постоянном магнитном поле \mathbf{B} , $\gamma > 0$.

Эволюция матрицы плотности квантового двухуровневого элемента, в процессе которой возможно появление недиагональных элементов — когерентностей, полностью выражается через эволюцию составляющих вектора Блоха. Аналогичное уравнение описывает движение классического магнитного момента 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, 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 соответствуют значения $Z = 0, \infty$. Использование такого представления имеет определенное преимущество при рассмотрении многокубитовых когерентных состояний.

Всякой унитарной матрице второго порядка с детерминантом равным единице (такая матрица называется *унимодулярной*), действующей в комплексной плоскости Z соответствует определенный *унитарный оператор* $\mathbf{U} = (\mathbf{U}^+)^{-1}$, осуществляющий *поворот* вектора состояния $|\psi\rangle$ в двухмерном гильбертовом пространстве.

То, что такой поворот с точки зрения свойств симметрии эквивалентен определенному повороту вектора Блоха в трехмерном пространстве в строгой формулировке выражается следующим образом: *совокупность унитарных унимодулярных преобразований в двухмерном* гильбертовом пространстве образует комплексную *специальную группу унимодулярных унитарных матриц* SU_2 , эквивалентную (гомоморфную) группе вращения *в трехмерном* пространстве, преобразующей состояния кубита по двумерному *неприводимому представлению* $D_{1/2}$.

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

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

1.2. Релаксационные 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 $|\Psi\rangle\langle\Psi|$.

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 $\rho = 1/2 (\mathbf{1} + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, но с длиной вектора Блоха (степенью поляризации) $P < 1$ и, следовательно, характеризуется уже не двумя, а *тремя* ($2^2 - 1$) независимыми вещественными параметрами P_z, P_{\pm} .

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 с *два* собственными значениями, а ее определитель не равен нулю.

В случае, когда окружение характеризуется температурой T , населенности равны

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

Матрицу ρ_0 можно переписать в форме матрицы так называемого *квазичистого* (pseudo-pure) *состояния*, то есть в виде двух слагаемых — одного, пропорционального единичной матрице, а другого — пропорционального матрице плотности чистого основного состояния:

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

Процесс линейной релаксации неравновесного смешанного состояния однокубитового ансамбля к равновесному смешанному состоянию $\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P}_0$ обычно описывается независимой от времени *эрмитовой релаксационной матрицей* 3×3 , которая в общем случае содержит три вещественных и три комплексных параметра. Макроскопический ансамбль невзаимодействующих 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, квантовое описание ансамбля становится отличным от классического.

При *одноосной симметрии* ансамбля, задаваемой внешним полем \mathbf{V} (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 [1.2], Вещественная часть комплексного элемента релаксационной матрицы определяет обратное время декогерентизации T_D или характерное «поперечное» время релаксации T_\perp распада поперечных составляющих вектора Блоха $P_\pm \rightarrow 0$, а его мнимая часть определяет сдвиг резонансной частоты, сопровождающий этот процесс.

Диссипация — рассеяние энергии, соответствующее переходу продольной составляющей вектора Блоха в равновесное состояние $P_z \rightarrow P_0 < 1$ с характерным «продольным» временем релаксации T_\parallel .

Для описания динамики однокубитового ансамбля при наличии однородного переменного магнитного поля $\mathbf{V}(t) = B\mathbf{k} + \mathbf{b}(t)$, которая сводится к динамике вектора Блоха \mathbf{P} , *Ф.Блохом* еще в 1946 году [1.3] было предложено широко используемое в теории ЯМР феноменологическое уравнение, которое при $\mathbf{b}(t) \perp \mathbf{k}$, применительно к вектору Блоха, можно записать 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 установлены основные условия его применимости [1.4, 1.5], к которым, наряду с условиям малости параметра, характеризующего взаимодействие спиновой системы с окружением (борновское приближение) и марковского характера процессов случайных воздействий (быстро флуктуирующие случайные поля), относятся условия однородности постоянного магнитного поля, и малости переменных магнитных полей $B \gg b(t)$. Случай быстро флуктуирующих случайных полей, в частности, имеет место в жидкости с интенсивным вращательным и поступательным броуновским движением молекул.

Феноменологическое уравнение (1.10) обобщается на случай неоднородных постоянных полей путем добавления диффузионного слагаемого вида $D \cdot \Delta \mathbf{P}(\mathbf{r})$ [1.6].

Ф.Блохом было также показано, что в случае сильных переменных полей ($B \sim b(t)$) при тех же условиях, когда применимо уравнение (1.10) и при $T_{\perp} = T_{\parallel}$ его можно представить в виде [1.7, 1.8]:

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

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

Независимо, на основе квантовой теории Р.Кубы и К.Томиты [1.9], нами было получено линеаризованное по переменному полю $\mathbf{b}(t) \perp \mathbf{k}$ уравнение, справедливое также для $T_{\perp} \neq T_{\parallel}$, его структура указывает на то, что соответствующее феноменологическое уравнение, из которого оно может быть получено путем линеаризации, должно в отличие от (1.11) иметь следующий вид [1.10]:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} + \frac{(P - P_{x0}(\mathbf{b}(t))\mathbf{i} + (P - P_{y0}(\mathbf{b}(t))\mathbf{j} + (P - P_{z0}(\mathbf{B}(t))\mathbf{k}}{T_{\perp}} + \frac{(P - P_{z0}(\mathbf{B}(t))\mathbf{k}}{T_{\parallel}} = \gamma[\mathbf{P} \times \mathbf{B}(t)], \quad (1.12)$$

где $\mathbf{B}(t) = (B + b_z(t))\mathbf{k}$, $P_{x,y0}(\mathbf{b}(t))$ — равновесные поперечные составляющие вектора Блоха в мгновенном поле $\mathbf{b}(t)$. Здесь мы пренебрегли для простоты перекрестными релаксационными слагаемыми, возникающими из-за нарушения одноосной симметрии ансамбля в сильном поле $\mathbf{b}(t)$.

Уравнение (1.12) переходит в уравнение Блоха (1.11) при $T_{\perp} = T_{\parallel}$. В случае неоднородных внешних полей правую часть этого уравнения для $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$, как было показано нами в [1.11], следует дополнить еще и диффузионным слагаемым с анизотропным, вообще говоря, коэффициентом диффузии, а именно,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \frac{(P - P_{x0}(\mathbf{b}(t, \mathbf{r}))\mathbf{i} + (P - P_{y0}(\mathbf{b}(t, \mathbf{r}))\mathbf{j} + (P - P_{z0}(\mathbf{B}(t, \mathbf{r}))\mathbf{k})}{T_{\perp}} = \gamma[\mathbf{P} \times \mathbf{B}(t, \mathbf{r})] +, \\ + D_{\perp} \left[\frac{\partial^2 (P - P_{x0}(\mathbf{b}(t, \mathbf{r}))\mathbf{i}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 (P - P_{y0}(\mathbf{b}(t, \mathbf{r}))\mathbf{j}}{\partial y^2} \right] + D_{\parallel} \frac{\partial^2 (P - P_{z0}(\mathbf{B}(t, \mathbf{r}))\mathbf{k}}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Однако 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. Так из уравнения (1.10) при постоянном внешнем поле $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ для поперечных составляющих вектора Блоха $P_{\perp}(t)$ следует

$$\frac{dP_{\perp}(t)}{dt} - i\omega_0 P_{\perp}(t) + \frac{P_{\perp}(t)}{T_{\perp}} = 0. \quad (1.14)$$

Соответствующее обобщение уравнения (1.14) на случай немарковского характера случайных воздействий, рассматривалось нами, в [1.12]. Для этого была развита теория возмущений не для переменных $P_{\perp}(t)$, а для их изображений по Лапласу.

Полагая $P_{\perp}(t < 0) = 0$, для изображения по Лапласу запишем

$$P_{\perp}(p) = \int_0^{\infty} P_{\perp}(t) \exp(-pt) dt. \quad (1.15)$$

В [1.12] было показано, что в лапласовском представлении имеет место уравнение вида

$$(p - i\omega_0 + F(p))P_{\perp}(p) = P_{\perp}(t = 0), \quad (1.16)$$

где $F(p) = \int_0^{\infty} f(t) \exp(-(p - i\omega_0)t) dt$ — преобразование Лапласа некоторой функции $f(t)$, характеризующей динамику локальных полей, создаваемых окружением. В рамках теории возмущений для $F(p)$ может быть сформулировано уравнение, аналогичное (1.16), содержащее вместо изображения $P_{\perp}(p)$ 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 уравнений может быть оборвана на некотором звене, что приводит к замкнутой системе уравнений.

Для того, чтобы перейти от (1.16) обратно к временному представлению воспользуемся теоремой умножения Бореля для изображений по Лапласу. В результате последнее слагаемое в (1.14) заменится на свертку исходных функций, и мы получим вместо (1.14) для описания процесса декогерентизации уравнение

$$\frac{dP_{\perp}(t)}{dt} - i\omega_0 P_{\perp}(t) + \int_0^t f(\tau) \exp(i\omega_0 \tau) P_{\perp}(t - \tau) d\tau = 0, \quad (1.17)$$

в котором $f(\tau)$ отражает эффекты последствия для $P_{\perp}(t)$ и, следовательно, имеет смысл **функции памяти**. Для определения функции $f(t)$ можно использовать феноменологический подход, используя выбор ее вида из модельных соображений с небольшим числом постоянных параметров, например, в виде экспоненциально затухающей зависимости. Марковским процессам соответствуют функции вида $f(\tau) \approx T_{\perp}^{-1} \delta(\tau)$.

Обобщение уравнения Блоха на случай немарковских случайных процессов с использованием функции (в общем случае тензора) памяти было предложено нами в [1.13]. Подобное обобщение было выполнено позднее в работе Ф.Ладо с сотр. [1.14]. Вывод обобщенного уравнения Блоха выполнен в **Приложении П1**:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} + \int_0^t f(\tau) [(\cos(\omega_0\tau)P_x(t-\tau) + \sin(\omega_0\tau)P_y(t-\tau))\mathbf{i} + \\ + (-\sin(\omega_0\tau)P_x(t-\tau) + \cos(\omega_0\tau)P_y(t-\tau))\mathbf{j}] d\tau + \frac{(P_z(t) - P_0)\mathbf{k}}{T_{\parallel}} = \gamma_{\perp}[\mathbf{P}(t) \times \mathbf{V}]. \end{aligned} \quad (\text{П1.13})$$

Полуклассическая модель адиабатического процесса декогерентизации **немарковского типа**, рассматриваемая далее в разделе **1.9**, является простым следствием уравнения (1.17).

Заключение: Динамика однокубитового ансамбля в однородном поле в случае **марковского** характера воздействий на кубит со стороны изотропного окружения описывается дифференциальным уравнением для вектора Блоха.

Обобщенное уравнение Блоха (1.13) может быть использовано для адекватного **феноменологического описания** реальных квантовых процессов в **однокубитовом** ансамбле в неоднородных полях, при воздействии на них коротких и интенсивных радиочастотных импульсов, с учетом процессов декогерентизации, диссипации и диффузии, при том же предположении **марковского** характера случайных воздействий кубит.

Для описания процессов декогерентизации в твердотельных структурах при низких температурах предложено также обобщение уравнения Блоха, учитывающее **немарковский характер** случайных процессов (эффекты последствия).

1.3. Принципиальная схема квантового компьютера

При выборе конкретной схемы квантового компьютера необходимо решить три вопроса: **во-первых**, выбрать физическую систему — элементную базу, которая обеспечит возможность создать в компьютере достаточное число управляемых кубитов, **во вторых**, определить физический механизм, отвечающий за взаимодействие кубитов между собой и с окружением, **в третьих**, определить способ селективного управления кубитами и измерения их

состояния на выходе. Все это вместе взятое представляет собой "*аппаратное обеспечение*" (hardware) квантового компьютера.

Принципиальная схема работы любого квантового компьютера может быть представлена следующим образом [1.15] (Рис. 1.4). Основной его частью является *квантовый регистр*, представляющий собой некоторую совокупность из L , вообще говоря, взаимодействующих между собой, *кубитов*. 2^L -мерное гильбертово пространство, в котором могут быть представлены все возможные квантовые состояния квантового регистра, соответственно имеет 2^L *ортогональных базисных векторов состояния*

Перед тем, как вводить информацию в компьютер все кубиты регистра должны быть приведены в *исходные основные* базисные (булевые) чистые состояния, то есть в квантовые состояния (знак \otimes — прямое (тензорное) произведение матриц (столбцов))

$$\begin{aligned} |0\rangle &\equiv |\uparrow_{L-1}\rangle \otimes |\uparrow_{L-2}\rangle \otimes |\uparrow_{L-3}\rangle \otimes \dots \otimes |\uparrow_0\rangle \equiv |0_{L-1}\rangle, |0_{L-2}\rangle, |0_{L-3}\rangle, \dots |0_0\rangle \equiv \\ &\equiv |0_{L-1}, 0_{L-2}, 0_{L-3}, \dots 0_0\rangle. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Эта операцию называли подготовкой начального состояния или *инициализацией* (initializing) квантового регистра.

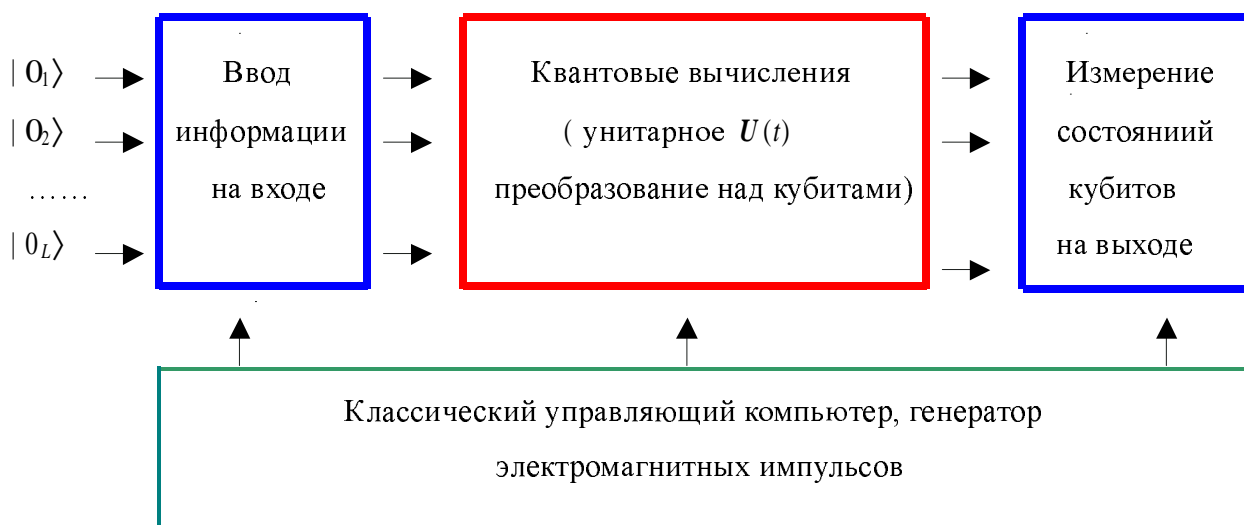


Рис. 1.4. Схематическая структура квантового компьютера

Далее, с помощью селективных электромагнитных импульсов, управляемых классическим компьютером, основные состояния определенных кубитов $|0\rangle$ переводятся в состояния $|1\rangle$. Базисные состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ будем далее называть *вычислительными*.

Начальное состояние всего регистра переводится в долгоживущие базисные состояния вида $|n\rangle \equiv |n_{L-1}, n_{L-2}, n_{L-3}, \dots, n_0\rangle$ ($n_i = 0, 1$), задающие *бинарное представление всех 2^L L разрядных чисел*

$$n = n_{L-1} 2^{(L-1)} + n_{L-2} 2^{(L-2)} + n_{L-3} 2^{(L-3)} + \dots + n_0 2^0. \quad (1.19)$$

Эти состояния и представляют собой систему ортогональных базисных векторов состояний для квантового регистра. Важно заметить, что в идеальном случае они не образуют никакой суперпозиции, то есть ортогональные *базисные состояния* $|n\rangle$ *не содержит когерентностей* и их релаксация к основному состоянию $|0\rangle$ происходит только за счет относительно *медленных диссипативных процессов*. Однако в реальной ситуации состояния отдельных кубитов как в исходном, так и в других базисных состояниях квантового регистра могут представлять собой некоторую суперпозицию чистых базисных состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ с непрерывными комплексными коэффициентами возникающую за счет не идеальности управляющих импульсов и внешних помех. 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 2.2.

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

$$\rho_{1,2,\dots,L} = \rho_{1,2,\dots,L}^\dagger = |\psi_{1,2,\dots,L}\rangle\langle\psi_{1,2,\dots,L}|, \quad \text{Sp } \rho_{1,2,\dots,L} = 1. \quad (1.20)$$

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

В идеальном случае квантовые логические операции в квантовом компьютере являются *логически и термодинамически обратимыми* и осуществляются с помощью *унитарных преобразований* $U(t)$ над состоянием регистра. Следовательно, на этом этапе важно, чтобы было обеспечено *подавление декогерентизации* когерентных квантовых состояний до необходимого уровня, и исправление случайных ошибок, вызываемых неидеальностью используемых импульсов и различными внешними помехами.

К моменту времени t в результате преобразований исходное квантовое состояние становится новой суперпозицией вида

$$|\psi_{1,2,\dots,L}(t)\rangle = \sum_{m,n} U_{mn}(t) c_n |m\rangle, \quad (1.21)$$

которая и определяет результат проведения вычислительных операций на выходе компьютера.

Отметим, что для формирования *произвольной* унитарной операции $U(t)$ над L кубитовым регистром достаточно использовать только *однокубитовые* и *двухкубитовые* преобразования [1.16] (см. **Приложение П2**). При этом квантовые алгоритмы, определяющие кван-

товые вычислительные процессы в полномасштабном квантовом компьютере, должны обеспечить их полиномиальную зависимость от числа кубитов, представляющих задачу.

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: Их изложенного здесь следует, что в квантовом компьютере должны быть обеспечены условия, при которых, чтобы, независимо от имеющегося взаимодействия между кубитами, его основное начальное (*инициализированное*) и другие квантовые *базисные состояния* квантового регистра с достаточной точностью *не образовывали когерентных суперпозиций базисных состояний*. *Декогерентизация* когерентных квантовых состояний в процессе выполнения логических унитарных преобразований должна быть *подавлена* до необходимого уровня (см. раздел 2.1)

1.4. Чистые состояния отдельной двухкубитовой системы

Рассмотрение начнем с двухкубитовой системы (квантовый регистр из двух кубитов). Для нее имеем *четыре* вычислительных *базисных состояний* в четырехмерном гильбертовом пространстве, построенных на однокубитовых состояниях, которые, вообще говоря, могут быть и пространственно разнесены:

$$|00\rangle = |0_1\rangle \otimes |0_2\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix}. \quad (1.22)$$

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

$$|\psi_{12}\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle = \begin{vmatrix} c_{00} \\ c_{01} \\ c_{10} \\ c_{11} \end{vmatrix}, \quad (1.23)$$

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* [1.17] или английский — *entanglement*), что означает наличие *особых нелокальных квантовых корреляций* между двумя спинами, не имеющих аналога в классических системах. Свойство запутанности квантовых состояний играет существенную роль в полномасштабных квантовых компьютерах.

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

Для чистого состояния он определяется выражением:

$$0 \leq C = 2 |c_{00} c_{11} - c_{01} c_{10}| \leq 1. \quad (1.24)$$

Для незапутанных (сепарабельных) состояний $C = 0$

$$|\psi_{12}\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle, \quad \rho_{12} = \rho_1 \otimes \rho_2. \quad (1.25)$$

Далее мы увидим, что инициализированное состояние квантового регистра может быть создано и при наличии взаимодействия между кубитами, если основные состояния этих пар кубитов являются незапутанными состояниями $|00\rangle$.

Рассмотрим сначала простейшую двухспиновую систему, гамильтониан которой в магнитном поле и с *изотропным гайзенберговским антиферромагнитным взаимодействием* (так называемая двухкубитовая ХХХ-модель) в форме матрицы 2×2 (в единицах $\hbar = 1$, при $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$, $\mathbf{I}_{1,2} = 1/2 \boldsymbol{\sigma}$) имеет вид:

$$\mathbf{H} = -\omega_0 (\mathbf{I}_{1z} \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{I}_{2z}) + J (\mathbf{I}_1 \otimes \mathbf{I}_2), \quad (1.26)$$

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

Его *четыре* собственных значения

$$E(I, M) = -\omega_0 M + J (I(I+1)/2 - 3/4) \quad (1.27)$$

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. 1.5).

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

Это одно *синглетное* (антисимметричное)

$$|0, 0\rangle = \sqrt{1/2} (|01\rangle - |10\rangle) \equiv \sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (1.28)$$

и три *триплетных* (симметричных) двухкубитовых состояния:

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad |1, 0\rangle = \sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle. \quad (1.29)$$

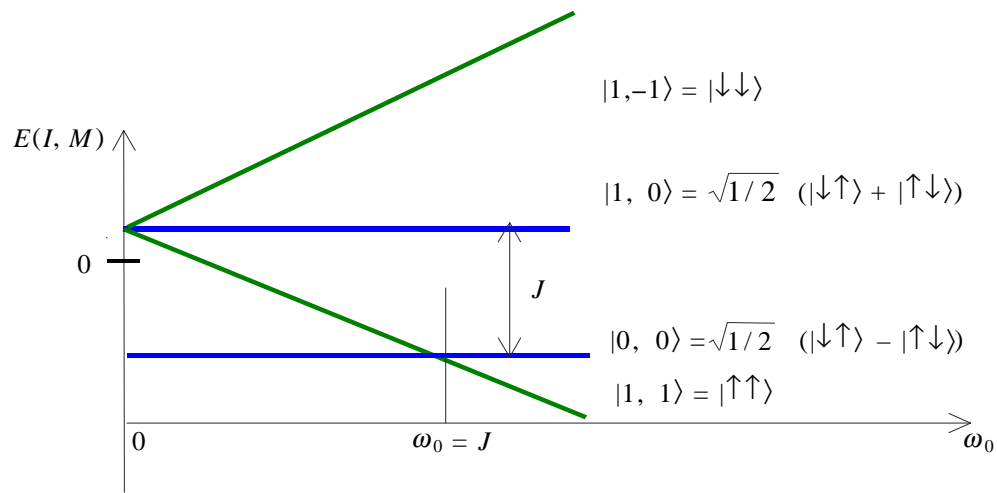


Рис. 1.5. Схема энергетических уровней двухспиновой системы, описываемой гамильтонианом (1.26).

В отличие от состояний $|\uparrow\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\downarrow\rangle$ состояния $|1, 0\rangle$ и $|0, 0\rangle$ – являются двухкубитовыми суперпозициями, называемыми когерентными **максимально запутанными** (entangled) ЭПР (Эйнштейна, Подольского, Розена) **состояниями** с $C = 1$. Оба запутанных состояния характеризуются значением проекции полного спина $M = 0$.

Заметим, что, как видно из Рис. 1.5, основное состояние рассматриваемой системы является синглетным запутанным состоянием $|0, 0\rangle$ при $\omega_0 < J$.

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

$$\rho(0, 0) = |00\rangle\langle 00| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

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 xu $P_{1x} = -P_{2x} = 1$, то есть движущихся **в противофазе** (Рис. 1.6):

$$\rho = 1/4 (\mathbf{1} + 1\sigma_{1x}) \otimes (\mathbf{1} - 1\sigma_{2x}) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

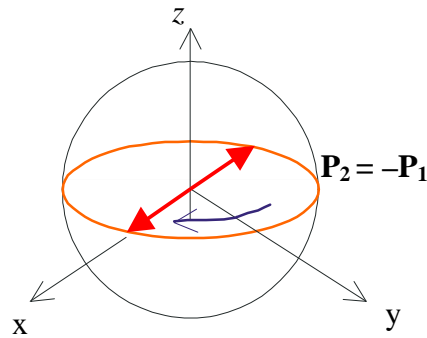


Рис. 1.6. Незапутанное двухкубитовое состояние, описываемое двумя противоположно направленными векторами Блоха в плоскости xy с $\varphi_1 = 0$ и $\varphi_2 = \pi$.

Она содержит 12 недиагональных матричных элементов, которые определяются длиной векторов Блоха. Это состояние не стационарно, поскольку не является собственным состоянием гамильтониана (1.26).

В отличие от состояния (1.31) максимально запутанное состояние (1.30) является собственным состоянием Гамильтониана (1.26), в котором **вектора Блоха** $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_2 = \text{Spp}(0,0)\boldsymbol{\sigma}_1 = \text{Spp}(0,0)\boldsymbol{\sigma}_2 = 0$. Отличными от нуля являются только составляющие эрмитового **тензора квантовых корреляций** двухкубитовых состояний

$$\text{Spp}(0,0)(\sigma_{1-}\otimes\sigma_{2+}) = -1/2, \quad \text{Spp}(0,0)(\sigma_{1z}\otimes\sigma_{2z}) = -1, \quad (1.32)$$

они отсутствуют в незапутанном состоянии (1.31). Эти корреляции имеют место, как между поперечными, так и между продольными спиновыми составляющими.

Таким образом, 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 корреляций

$$G_{1\rightarrow 2+} = G_{1\rightarrow 2-} = 4\text{Spp}(0,0)(\sigma_{1-}\otimes\sigma_{2+}) = -2, \quad G_{1z,2z} = \text{Spp}(0,0)(\sigma_{1z}\otimes\sigma_{2z}) = -1, \quad (1.33)$$

то вместо (1.31) получим (сравни с общим выражением для матрицы плотности произвольного состояния в разделе 1.5):

$$\begin{aligned} \rho(0,0) &= \frac{1}{4} \begin{vmatrix} 1+G_{1z,2z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-G_{1z,2z} & G_{1-,2+} & 0 \\ 0 & G_{1+,2-} & 1-G_{1z,2z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+G_{1z,2z} \end{vmatrix} = \\ &= 1/4 (\hat{\mathbf{I}} + G_{1z,2z}(\sigma_{1z}\otimes\sigma_{2z}) + G_{1\rightarrow 2-}(\sigma_{1-}\otimes\sigma_{2+}) + G_{1\rightarrow 2+}(\sigma_{1+}\otimes\sigma_{2-})). \end{aligned} \quad (1.34)$$

Из последнего выражения следует, что **геометрическим образом** рассматриваемого максимально запутанного двухкубитового состояния, характеризующегося составляющими тензора второго ранга, является **не вектор, а поверхность второго порядка** в трехмерном пространстве (x, y, z) , которая описывается уравнением вида

$$x^2 + y^2 - z^2 = \text{Const.} \quad (1.35)$$

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

Матрица плотности второго полностью запутанного состояния $|1, 0\rangle$ отличается от (1.34) знаком недиагональных элементов и соответствующая поверхность второго порядка будет описываться уравнением

$$x^2 + y^2 + z^2 = \text{Const.}, \quad (1.36)$$

то есть сферой ($\text{Const.} > 0$), мнимой сферой ($\text{Const.} < 0$) или точкой ($\text{Const.} = 0$).

Два чистых запутанных ЭПР состояния в рассматриваемом случае представляют собой *два типа* квантовой корреляции (*два класса запутанности*).

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.

Все 16 элементов эрмитовой матрицы плотности 4×4 *чистого* двухкубитового состояния $\rho_{12} = |\psi_{12}\rangle\langle\psi_{12}|$ в общем случае выражаются через *шесть* ($2 \cdot 4 - 2$) независимых *вещественных* параметров, которыми являются 4 составляющих векторов Блоха, так и 2 элемента тензора корреляции. Соответственно, процесс релаксации к основному равновесному состоянию будет определяться эрмитовой *релаксационной матрицей* 6×6 , содержащей в общем случае **36** элементов.

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 обменного 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 тензором 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.

1.5. Смешанные состояния ансамбля двухкубитовых систем

В результате релаксационных процессов, обусловленных взаимодействием с окружающей средой, в чистом ансамбле независимых двухкубитовых систем устанавливается *равновесное смешанное состояние*.

Приведенная к двум кубитам матрица плотности ансамбля в результате принимает в энергетическом базисе $|I, M\rangle$ *диагональный* вид, характерный для смешанного состояния

$$\rho = \begin{pmatrix} p_{0,0} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{1,0} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{1,-1} \end{pmatrix}, \quad (1.37)$$

которое содержит *два чистых запутанных* ЭПР состояния $|0, 0\rangle\langle 0, 0|$ и $|1, 0\rangle\langle 1, 0|$ с населенностями $p_{0,0}$ и $p_{1,0}$.

Равновесные населенности состояний в этом представлении (в единицах, где постоянные Планка и Больцмана $\hbar = 1$, $k = 1$):

$$p_{I,M} = \frac{\exp(-E(I,M)/T)}{\sum_{I,M} \exp(-E(I,M)/T)}, \quad (1.38)$$

или

$$\begin{aligned} p_{0,0} &= \frac{\exp(J/T)}{1 + \exp(\omega_0/T) + \exp(-\omega_0/T) + \exp(J/T)}, \\ p_{1,1} &= \frac{\exp(-\omega_0/T)}{1 + \exp(\omega_0/T) + \exp(-\omega_0/T) + \exp(J/T)}, \\ p_{1,0} &= \frac{1}{1 + \exp(\omega_0/T) + \exp(-\omega_0/T) + \exp(J/T)}, \\ p_{1,-1} &= \frac{\exp(\omega_0/T)}{1 + \exp(\omega_0/T) + \exp(-\omega_0/T) + \exp(J/T)}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

При переходе к вычислительному базисному представлению $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ благодаря наличию запутанности состояний матрица плотности (1.37) перестает быть *диагональной*:

$$\rho = \begin{pmatrix} p_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{p_{0,0} + p_{1,0}}{2} & \frac{p_{1,0} - p_{0,0}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p_{1,0} - p_{0,0}}{2} & \frac{p_{0,0} + p_{1,0}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{1,-1} \end{pmatrix}. \quad (1.40)$$

Для смешанного состояния параметр, характеризующий степень запутанности – согласованность, определяется выражением, отличающимся от выражения для чистого состояния [1.18]:

$$C = \max \{ \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4; 0 \}, \quad (1.41)$$

где положительные вещественные параметры $\lambda_i = (r_i)^{1/2}$ нумеруются в порядке $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_4$, а $r_i > 0$ — собственные значения (неотрицательные вещественные числа) неэрмитовой матрицы

$$\mathbf{R} = \rho (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}. \quad (1.42)$$

В качестве меры запутанности смешанного состояния используется также такая характеристика, как *запутанность формирования* E_F , которая однозначно выражается через согласованность C [1.18]:

$$E_F = H \left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \right), \quad (1.43)$$

где

$$H(x) = -x \log_2 x - (1-x) \log_2 (1-x) \quad (1.44)$$

функция энтропии Шеннона для двух кубитов.

Для рассматриваемого смешанного состояния согласованность принимает вид [1.19]

$$C = 2 \max \left\{ \left(\frac{P_{1,0} - P_{0,0}}{2} \right) - \sqrt{P_{1,1} P_{1,-1}}; 0 \right\}. \quad (1.45)$$

Для теплового равновесного состояния двухкубитового ансамбля согласованность (запутанность в этом случае называется *тепловой*) определяется выражением:

$$C = \max \left\{ \frac{\exp(J/T) - 3}{1 + \exp(\omega_0/T) + \exp(-\omega_0/T) + \exp(J/T)}; 0 \right\} \quad (1.46)$$

или

$$C = \frac{\exp(J/T) - 3}{1 + \exp(\omega_0/T) + \exp(-\omega_0/T) + \exp(J/T)}, \quad \text{при } \exp(J/T) > 3, \\ C = 0, \quad \text{при } \exp(J/T) \leq 3. \quad (1.47)$$

Следовательно, запутанность отсутствует при температурах $T > T_c = J/\ln 3$ независимо от величины внешнего поля.

В отсутствии внешнего поля $\omega_0 = 0$ ($B = 0$) согласованность выражается через внутреннюю энергию E , приходящуюся на пару кубитов:

$$C = -2E/J - 1/2, \quad E = -3J/4 \frac{\exp(J/T) - 1}{\exp(J/T) + 3}. \quad (1.48)$$

В этом случае максимальная запутанность $C = 1$ достигается при $T \ll J$, когда $E = -3J/4$ и соответствует синглетному основному состоянию пары кубитов. С ростом T она уменьшается за счет примешивания вышележащих триплетных состояний и *исчезает* при $T = T_c = J/\ln 3$, когда $E = -J/4$.

С другой стороны, с увеличением поля B при $T = 0$ запутанность *исчезает скачком* при значении поля $\omega_0 = J$, когда синглетное состояние перестает быть основным (точка так называемого *квантового фазового перехода*).

Таким образом, наличие взаимодействия, хотя оно и приводит к появлению определенных классических корреляций, не всегда сопровождается запутыванием квантовых состояний.

Преобразование смешанного равновесного состояния ансамбля двухкубитовых систем к форме *квазичистого состояния*, то есть к двум слагаемым — одного пропорционального единичной матрице и другого пропорционального матрице плотности чистого основного состояния, в отличие от однокубитового состояния требует выполнения некоторых неунитарных операций. Рассмотрим один из таких способов, основанный на «*временном усреднении*» трех результатов, полученных в результате унитарных операций по времени над диагональной в вычислительном базисе матрицей [1.20].

В качестве примера произведем над диагональной матрицей плотности смешанного состояния, которая в вычислительном базисе имеет вид

$$\rho = \begin{pmatrix} p_{\uparrow\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{\uparrow\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{\downarrow\uparrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (1.49)$$

унитарные преобразования, описываемые в этом же базисе матрицами

$$\mathbf{P}_0 = \hat{\mathbf{I}} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_2 = \mathbf{P}_1^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$

где $\hat{\mathbf{I}} \equiv \mathbf{1} \times \mathbf{1}$ — единичная матрица 4×4 . В результате получим три результата:

$$\begin{pmatrix} p_{\uparrow\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{\uparrow\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{\downarrow\uparrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} p_{\uparrow\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{\downarrow\uparrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{\downarrow\downarrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{\uparrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} p_{\uparrow\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{\downarrow\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{\uparrow\downarrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{\downarrow\uparrow} \end{pmatrix} \quad (1.51)$$

Квазичистое состояние получается в результате следующего усреднения трех результатов:

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle &= 1/3 (\rho + \mathbf{P}_1 \rho \mathbf{P}_1^+ + \mathbf{P}_2 \rho \mathbf{P}_2^+) = \\ &= (1 - \varepsilon) / 4 \hat{\mathbf{I}} + \varepsilon \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \varepsilon = (4p_{\uparrow\uparrow} - 1)/3. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Матрица плотности такого состояния не имеет недиагональных элементов и, следовательно, *квазичистое состояние является незапутанным* состоянием при любой температуре. При этом число независимых параметров квазичистого состояния уменьшается на два и равно единице (в (1.52) это населенность основного уровня $p_{00,00}$).

Если матрица плотности смешанного состояния имеет в вычислительном базисе недиагональные элементы (например, матрица (1.40)), то легко увидеть, что рассмотренные операции (1.52), хотя и уменьшают число независимых элементов матрицы плотности, *не приводят к квазичистому состоянию*.

Произвольное смешанное состояние ансамбля одинаковых двухкубитовых систем *полностью* описывается приведенной матрицей плотности ρ , с $4^2 = 16$ *вещественными параметрами*

$$Q_\alpha = \text{Sp } F_\alpha \rho, \quad (1.53)$$

где $F_\alpha (\alpha = 1, 2, \dots, 16)$ — базис 16-мерного векторного пространства спиновых операторов, действующих в 4-мерном гильбертовом пространстве. В рассматриваемом случае это 16 матриц 4×4 , включая и единичную матрицу:

$$F_\alpha \equiv \{ \sigma_{1i} \otimes \mathbf{1}_2, \mathbf{1}_1 \otimes \sigma_{2j}, (\sigma_{1i} \otimes \sigma_{2j}), \hat{\mathbf{I}} = \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \}, \quad \sigma_i = \sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2, \sigma_z. \quad (1.54)$$

Параметрами являются: единица, *шесть* составляющих векторов Блоха \mathbf{P}_1 и \mathbf{P}_2 , и *девять* вещественных параметров, описывающих как классическую, так и квантовую корреляцию их состояний (когерентность 2-го порядка), выражающихся составляющими *трехмерных тензоров корреляции* второго ранга $G_{1i, 2j}$:

$$\begin{aligned} Q_{\alpha=1 \dots 15} &\equiv \{ P_{1i} = P_{1\pm} = P_{1x} \pm iP_{1y}, P_{1z}, P_{2j} = P_{2\pm}, P_{2z}, \\ P_{1i} P_{2j} + G_{1i, 2j} &= \text{Sp } \rho (\sigma_{1i} \otimes \sigma_{2j}) = 4 \text{Sp } \rho (I_{1,i} \otimes I_{2,j}) \}, \quad Q_{16} = 1. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Матрицу плотности ансамбля двухспиновых систем представим здесь в двухмерном *вычислительном базисе* $|1i, 2j\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \equiv (|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle)$:

$$\begin{aligned} \rho &= 1/4 \sum_{\alpha=1}^{16} F_\alpha Q_\alpha = 1/4 [(\mathbf{1}_1 + \mathbf{P}_1 \boldsymbol{\sigma}_1) \otimes (\mathbf{1}_2 + \mathbf{P}_2 \boldsymbol{\sigma}_2) + \sum_{i,j} G_{1i, 2j} (\sigma_{1i} \otimes \sigma_{2j})] = \\ &= 1/4 \begin{vmatrix} P_{00,00} & P_{00,01} & P_{00,10} & P_{00,11} \\ P_{01,00} & P_{01,01} & P_{01,10} & P_{01,11} \\ P_{10,00} & P_{10,01} & P_{10,10} & P_{10,11} \\ P_{11,00} & P_{11,01} & P_{11,10} & P_{11,11} \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (1.56)$$

Диагональные элементы матрицы (1.56)

$$\begin{aligned}
 P_{00,00} &= (1 + P_{1,z})(1 + P_{2,z}) + G_{1z,2z} , \\
 P_{01,01} &= (1 + P_{1,z})(1 - P_{2,z}) - G_{1z,2z} , \\
 P_{10,10} &= (1 - P_{1,z})(1 + P_{2,z}) - G_{1z,2z} , \\
 P_{11,11} &= (1 - P_{1,z})(1 - P_{2,z}) + G_{1z,2z} .
 \end{aligned} \tag{1.57}$$

удовлетворяют условию нормировки

$$P_{00,00} + P_{01,01} + P_{10,10} + P_{11,11} = 4 . \tag{1.58}$$

Поэтому из 4 диагональных элементов независимыми являются только 3.

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

$$\begin{aligned}
 P_{00,01} &= P_{2+} + P_{1z}P_{2+} + G_{1z,2x} + iG_{1z,2y} = (P_{01,00})^* , \\
 P_{10,11} &= P_{2+} - P_{1z}P_{2+} - G_{1z,2x} - iG_{1z,2y} = (P_{11,10})^* , \\
 P_{00,10} &= P_{1+} + P_{1+}P_{2z} + G_{1x,2z} + iG_{1y,2z} = (P_{10,00})^* , \\
 P_{01,11} &= P_{1+} - P_{1+}P_{2z} - G_{1x,2z} - iG_{1y,2z} = (P_{11,01})^* , \\
 P_{00,11} &= P_{1+}P_{2+} + G_{1+,2+} = (P_{11,00})^* , \\
 P_{01,10} &= P_{1+}P_{2-} + G_{1+,2-} = (P_{10,01})^* .
 \end{aligned} \tag{1.59}$$

Заключение: Равновесные запутанные *когерентные смешанные состояния* в двухкубитовом ансамбле при изотропном гайзенберговском антиферромагнитном взаимодействии между кубитами *не возникают* при температуре выше критической ($T > T_c = J/\ln 3$), а при $T = 0$ они не образуются при $\omega_0 > J$.

Показано, что преобразование равновесного смешанного состояния ансамбля *в квази-чистое* с помощью «временного усреднения», используемого в жидкостных квантовых компьютерах, может быть выполнено только для диагональной в вычислительном базисе матрицы плотности, то есть для *некогерентного незапутанного смешанного состояния*.

Показано, что для описания матрицы плотности произвольного смешанного состояния двухкубитового ансамбля в качестве динамических параметров помимо двух векторов Блоха $\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2$ необходимо ввести еще *девять* компонентов тензора корреляции $G_{1i, 2j}$ (всего 15 *независимых вещественных параметров*).

1.6. Состояния многокубитовых квантовых регистров — одномерных цепочек спинов

В идеальном случае квантовый регистр это линейная цепочка из отдельных спинов-кубитов, достаточно надежно изолированных от окружения. Все кубиты регистра при определенных условиях должны быть способны достаточно долго находиться с своих ос-

новых базисных состояниях. При этом ориентация различных ядерных спинов, определяемая значением гиромагнитного отношения отдельного кубита и локального магнитного поля, не обязательно должна быть одинаковой.

Реальный квантовый регистр является *открытой системой*, обменивающейся с окружением, как энергией, так и энтропией, и его квантовое состояние является смешанным. Кроме того, в результате взаимодействия между спинами основное состояние квантового регистра может стать *запутанным*, то есть не будет иметь необходимый для инициализации вид (1.18).

Рассмотрим здесь в качестве достаточно общей модели квантового регистра одномерную *двухподрешеточную цепочку* из L ядерных спинов-кубитов в однородном поле, с одинаковым антиферромагнитным анизотропным взаимодействием только между ближайшими соседями и с различными гиромагнитными отношениями для спинов подрешеток **1** и **2**. Гамильтониан рассматриваемой системы (так называемой XXZ-модели) запишем в виде:

$$\mathbf{H} = \sum_{k=1}^L \{ \mathbf{H}_k \} = \sum_{k=1}^L \{ -\omega_k \mathbf{I}_k \otimes \mathbf{1}_{k+1} - \omega_{k+1} \mathbf{1}_k \otimes \mathbf{I}_{k+1,z} + J_{\perp} (\mathbf{I}_{k,x} \otimes \mathbf{I}_{k+1,x} + \mathbf{I}_{k,y} \otimes \mathbf{I}_{k+1,y}) + J \mathbf{I}_{k,z} \otimes \mathbf{I}_{k+1,z} \}, \quad (1.60)$$

где $J > J_{\perp} > 0$, $J_A = J - J_{\perp}$ — константа анизотропии взаимодействия (легкая ось намагничивания z), $\omega_k = \omega_1$ — для нечетных узлов и $\omega_{k+1} = \omega_2$ — для четных узлов. Случай $J = 0$ принято называть XX0-моделью (или двухмерной изотропной XY-моделью), а случай $J_{\perp} = 0$ — моделью Изинга (00Z). Спиновые операторы \mathbf{I}_k , действующие в 2^L -гильбертовом пространстве, в форме прямого произведения двухмерных матриц имеют вид:

$$\mathbf{I}_k \equiv \mathbf{1}_1 \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{k-1} \otimes \mathbf{I}_k \otimes \mathbf{1}_{k+1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_L. \quad (1.61)$$

Будем далее предполагать, что выполняются периодические граничные условия, при которых последний спин снова взаимодействует с первым, то есть $\mathbf{I}_{L+1} \equiv \mathbf{I}_1$. Такую систему назовем *кубитовым кольцом*. В этом случае гамильтониан взаимодействия будет инвариантен относительно операции сдвига \mathbf{T} базисных состояний ($m = \uparrow, \downarrow$):

$$\mathbf{T} |m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, \dots, m_{L-1}, m_L\rangle = |m_L, m_1, m_2, m_3, m_4, \dots, m_{L-1}\rangle. \quad (1.62)$$

Если ограничиться рассмотрением состояний кольцевой цепочки, для которых [1.21, 1.22]

а) z -составляющие полного спина которые коммутируют с гамильтонианом,

б) соседние спины находятся в разных базисных состояниях,

то свойство (1.62) позволяет перейти от равновесной матрицы плотности всего кольца к *двухспиновой приведенной матрице плотности*. При этом следует учесть, что в кольце гамильтониан взаимодействия промежуточного i -го спина с *двумя* соседями в узлах $i - 1$ и $i + 1$, находящихся в одинаковых состояниях, сводится к *удвоенному*, по сравнению с рассмотренным в разделе 1.5, гамильтониану взаимодействия спинов только в соседних узлах i

и $i + 1$ [1.19]. Вычисляя след от полной матрицы плотности по состояниям всех остальных кубитов, кроме этих двух, получим:

$$\rho = \exp(-\mathbf{H}/T) / \text{Sp}(\exp(-\mathbf{H}/T)), \quad (1.63)$$

где

$$\mathbf{H} = -\omega_1 \mathbf{I}_{1z} \otimes \mathbf{1} - \omega_2 \mathbf{1} \otimes \mathbf{I}_{2z} + 2J_{\perp} (\mathbf{I}_{1x} \otimes \mathbf{I}_{2x} + \mathbf{I}_{1y} \otimes \mathbf{I}_{2y}) + 2J (\mathbf{I}_{1z} \otimes \mathbf{I}_{2z}). \quad (1.64)$$

Собственные значения гамильтониана (1.64):

$$E_{1,2} = J/2 \pm (\omega_1 + \omega_2)/2, \quad E_{3,4} = -J/2 \pm J_{\perp} \sqrt{1 + X^2} \quad (1.65)$$

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

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{X}{\sqrt{1+X^2}} \right), \quad X = \frac{\omega_1 - \omega_2}{2J_{\perp}}, \quad (1.66)$$

с согласованностью

$$C = 2\sqrt{(1-\varepsilon)\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{1+X^2}} \leq 1. \quad (1.67)$$

В отличие от максимально запутанных состояний переходы между ними не являются запрещенными.

При $\omega_1 = \omega_2$ ($X = 0$) эти два состояния максимально запутаны с $C = 1$ и характеризуются значениями полного спина $I = 1, 0$ и его проекции $M = 0$.

Для населенностей смешанного равновесного состояния при $T \neq 0$ будем иметь:

$$p_{1,2} = \frac{\exp[\pm(\omega_1 + \omega_2)/2T]}{2\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + 2\exp(J/T)\text{ch}(J_{\perp}\sqrt{1+X^2}/T)},$$

$$p_{3,4} = \frac{\exp[(J \pm J_{\perp}\sqrt{1+X^2})/T]}{2\text{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + 2\exp(J/T)\text{ch}(J_{\perp}\sqrt{1+X^2}/T)}, \quad (1.68)$$

Приведенная матрица плотности в вычислительном базисе имеет вид

$$\rho = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{p_3 + p_4}{2} & \frac{p_3 - p_4}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p_3 - p_4}{2} & \frac{p_3 + p_4}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_2 \end{pmatrix}. \quad (1.40)$$

Согласованность, соответствующая тепловой запутанности, принимает значение

$$C = 2 \max \left\{ \left(\left| \frac{p_3 - p_4}{2} \right| - \sqrt{p_1 p_2} \right); 0 \right\} =$$

$$= \max \left\{ \frac{\exp(J/T) \left| \operatorname{sh}(J_{\perp} \sqrt{1 + X^2}/T) \right| - 1}{\operatorname{ch}[(\omega_1 + \omega_2)/2T] + \exp(J/T) \operatorname{ch}(J_{\perp} \sqrt{1 + X^2}/T)}, 0 \right\}. \quad (1.69)$$

Откуда следует, что парная тепловая запутанность при $T = 0$ и $(\omega_1 + \omega_2)/2 < J + J_{\perp} \sqrt{1 + X^2}$ равна единице (максимальная запутанность). Она отсутствует при конечной температуре $T > T_c$, определяемой из

$$\exp(J/T) \left| \operatorname{sh}(J_{\perp} \sqrt{1 + X^2}/T) \right| \leq 1. \quad (1.70)$$

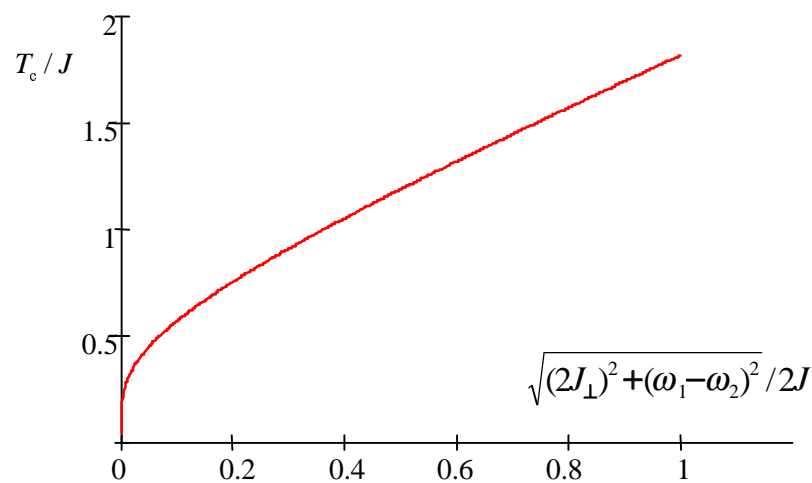


Рис. 1.7. Зависимость критической температуры T_c от анизотропии взаимодействия и магнитного поля.

Мы видим, что при $J_{\perp} = 0$ (модель Изинга типа 00Z, сильная анизотропия) парная *запутанность отсутствует при любых температурах*. Но достаточно малого значения $J_{\perp} > 0$ или различия частот $\omega_{1,2}$, чтобы критическая температура резко возросла.

Как следует из (1.70) для ферромагнитного типа взаимодействия, когда $J + J_{\perp} \sqrt{1 + X^2} < 0$, тепловая запутанность отсутствует при любой температуре независимо от величины поля. Заметим, что запутанные состояния в этом случае соответствуют вышележащим уровням энергии, при конечной температуре они слабо заселены по сравнению с основным состоянием и не дают существенного вклада в тепловую запутанность.

На самом деле при определении парной согласованности для трансляционно инвариантной цепочки необходимо учесть, что состояние каждого кубита может быть запутанным не только с ближайшими соседними кубитами, но и со следующими за соседними. В отсутст-

вии внешнего поля B и при $T = 0$, и при определенных упрощающих предположениях, в [1.21, 1.22] было найдено, что согласованность чистых состояний в расчете на двух ближайших соседей в бесконечной цепочке спинов $C < 0,434$.

Рассмотрим далее связь *максимальной запутанности с энергией основного состояния* антиферромагнитного кольца при $T = 0$. Его основное состояние не является состоянием типа $|0_1, 1_2, 0_3, 1_4, 0_5, \dots\rangle$, поскольку оно минимизируется только изинговской частью гамильтониана и не минимизируется при учете остальной его части, что накладывает ограничение на максимальное значение согласованности для пары спинов в основном состоянии кольца.

Будем снова исходить из того, что основное состояние антиферромагнитного кольца с одинаковым числом спинов в каждой подрешетке (L — четное число) инвариантно относительно трансляции спинов $i = i + 2$, а оператор z — составляющей полного спина $\sum_{i=1}^L I_{i,z}$ коммутирует с гамильтонианом \mathbf{H} . Эти свойства определяют вид приведенной матрицы плотности для пары спинов, которая для XXX-модели принимает вид (сравни (1.34))

$$\rho = \begin{pmatrix} v_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_+ & u & 0 \\ 0 & u^* & w_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_- \end{pmatrix}, \quad v_+ + v_- + w_+ + w_- = 1, \quad (1.72)$$

где диагональные элементы, согласно (1.57)

$$v_{\pm} = 1/4 ((1 \pm P_{1,z})(1 \pm P_{2,z}) + G_{1z,2z}), \quad w_{\pm} = 1/4 ((1 \mp P_{1,z})(1 \pm P_{2,z}) - G_{1z,2z}), \quad (1.73)$$

Из недиагональных элементов (1.59) оставим только те, которые благодаря сохранению z -составляющей полного спина, описывают когерентную суперпозицию состояний с одинаковыми его составляющими, такими являются состояния $|\uparrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\uparrow\rangle$:

$$u = 1/4 (P_{1+}P_{2-} + G_{1+,2-}), \quad (1.74)$$

откуда следует

$$\begin{aligned} 4\text{Re}u &= P_{1x}P_{2x} + P_{1y}P_{2y} + G_{1x,2x} + G_{1y,2y}, \\ (v_+v_-)^{1/2} &= 1/4 ((1 + P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z})^2 - (P_{1,z} + P_{2,z})^2)^{1/2}, \\ v_+ - v_- &= 1/2(P_{1,z} + P_{2,z}), \quad w_+ - w_- = -1/2(P_{1,z} - P_{2,z}), \\ v_+ + v_- &= 1/2(1 + P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z}). \end{aligned} \quad (1.75)$$

Для внутренней энергии, приходящейся на пару кубитов в кольце, получим

$$\begin{aligned} E &= \text{Spr}\{-\omega_1 (I_{1,z} \otimes \mathbf{1}_2) - \omega_2 (\mathbf{1}_1 \otimes I_{2,z}) + 2J (I_{1,z} \otimes I_{2,z}) + 2J_{\perp} (I_{1x} \otimes I_{2x} + I_{1y} \otimes I_{2y})\} = \\ &= -B M + J/2 (P_{1,z}P_{2,z} + G_{1z,2z}) + J_{\perp} 2\text{Re}u. \end{aligned} \quad (1.76)$$

где

$$(\gamma_1 P_{1,z} + \gamma_2 P_{2,z})/2 = M \quad (1.77)$$

— средний магнитный момент на один кубит.

Для минимизации энергии выберем фазу параметра z , равной π и получим

$$E = -B M + J/2 (v_+ + v_- - 1/2) - J_{\perp} 2|u|, \\ (v_+ v_-)^{1/2} = 1/4 ((1 + 2E/J + 2B M/J + (J_{\perp}/J) 4|u|)^2 - (P_{1,z} + P_{2,z})^2)^{1/2}. \quad (1.78)$$

Согласованность запутанных состояний принимает вид:

$$C = 2 \max [|u| - (v_+ v_-)^{1/2}, 0] = \\ = 2 \max [(-E - B M + J/2 (P_{1,z} P_{2,z} + G_{1z,2z}) - J_{\perp}/2 ((1 + P_{1,z} P_{2,z} + G_{1z,2z})^2 - (P_{1,z} + P_{2,z})^2)^{1/2})]. \quad (1.79)$$

Полностью выразить согласованность через внутреннюю энергию удастся только для изотропного кольца с взаимодействием XXX – типа (то есть, когда $J_{\perp} = 0$) и в отсутствии магнитного поля, когда $P_{1,z} = P_{2,z} = M = 0$:

$$C = [(-E/J) - 1/2]. \quad (1.80)$$

Учитывая известное значение для энергии основного состояния пары спинов в бесконечной ($L \rightarrow \infty$) изотропной антиферромагнитной цепочке, имеющей в принятых нами обозначениях вид $E/J = -2 \ln 2 + 1/2 = -0,886$ [1.23] (что больше значения внутренней энергии $-1,5$, соответствующего максимальной запутанности $C = 1$ и меньше значения $-0,5$, соответствующего незапутанному состоянию), найдем минимальное значение согласованности, для основного состояния:

$$C = 2 \ln 2 - 1 = 0,386, \quad (1.81)$$

которое меньше значения $0,434$, полученного на основе упрощающих предположений в [1.21, 1.22]

Таким образом, *основное состояние* бесконечного кольца *с изотропным взаимодействием запутано*, но в меньшей степени, чем в случае ансамбля независимых двухкубитовых систем. Это связано с тем, что в цепочке взаимодействующих кубитов основное состояние определяется не только состояниями выделенной пары кубитов, но и незапутанными состояниями других кубитов, то есть в регистре проявляется коллективный эффект, приводящий к увеличению энергии основного состояния, в расчете на пару кубитов.

В работе [1.24] для изотропной антиферромагнитной цепочки было показано, что неравенства Белла нарушаются, если $-E/J < 3/(2\sqrt{2}) = 0,68$. Однако существует узкий интервал энергии, $0,5 < -2E/J < 0,68$, где *неравенства Белла не нарушаются*, то есть система оказывается не вполне квантовой. Поскольку в основном состоянии $-E/J = 2 \ln 2 - 1/2 = 0,886$, следует сделать вывод, что в *этом состоянии неравенства Белла нарушаются*.

Итак, состояния квантового регистра, взаимодействие между кубитами в котором имеет *изотропный* характер типа XXX, при низких температурах и в отсутствие внешнего поля *неизбежно являются запутанными* и не могут служить в качестве основного *инициализированного состояния*.

В определенном интервале полей перед точкой квантового перехода, становится возможным запутанное состояние между состояниями кубитов, следующими за ближайшими соседями (*магнитная запутанность*) [1.18]. При этом, *длина запутанности*, определяющая область квантовых корреляций в гайзенберговской цепочке, может быть сделана достаточно большой при соответствующих значениях внешнего поля *вблизи точки квантового перехода*. Из этого следует, в частности, что квантовые операции, проводимые вблизи точки квантового фазового перехода, могут быть *лучше защищены относительно ошибок*, связанных с некоторыми несовершенствами системы.

Температурная зависимость согласованности для состояний двух соседних кубитов в цепочке из-за вклада состояний других кубитов изменяется с числом кубитов и его четностью в цепочке. При числе кубитов $L = 3$ в цепочке парная тепловая запутанность вообще исчезает. В пределе при $L \gg 1$ критическая температура для парной запутанности в цепочке с изотропным антиферромагнитным взаимодействием XXX – типа принимает в наших обозначениях независимо от четности числа кубитов значение $T_c = 0,796J$ [1.25]. то есть оно меньше критической температуры для тепловой запутанности пары кубитов в антиферромагнитном кольце $2J/\ln 3 = 1,820J$.

Как уже отмечалось, квантовый регистр в виде L -кубитовой цепочки Изинга OОZ – типа, находящейся в *продольном поле* не имеет запутанных состояний, и инициализированным состоянием регистра может быть его основное состояние.

Однако при отсутствии продольного поля запутанные основные состояния в цепочке Изинга возникают и при этом скачком (*квантовый фазовый переход*) при наложении даже очень малого *поперечного поля* [1.26]. При конечных температурах с увеличением поперечного внешнего поля согласованность в антиферромагнитной цепочке Изинга растет за счет примешивания вышележащих состояний, достигая некоторого максимального значения. Следовательно, для инициализации состояния цепочки спинов необходимо исключить поперечные поля.

До сих пор рассматривалась парная запутанность. Однако 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: Из приведенного анализа результатов, полученных для запутанности состояний в различного типа спиновых цепочках следует, что *основное состояние* кольца с изотропным антиферромагнитным взаимодействием является *запутанным*, но в меньшей степени, чем в случае ансамбля независимых двухкубитовых систем.

Для создания инициализированного незапутанного состояния квантового регистра следует использовать *достаточно сильные поля* и/или иметь *достаточно сильную* анизотропию взаимодействия между спинами.

Минимально возможная степень парной запутанности (согласованность) основного состояния антиферромагнитной цепочки при $T = 0$ и $B = 0$ соответствует $C = 0,386$.

1.7. Динамические процессы в ансамбле двухкубитовых систем. Основные уравнения

При рассмотрении динамических процессов в ансамбле многокубитовых цепочек спинов воспользуемся далее простейшей 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 пару кубитов.

В таких системах из полного числа $15 = 2^{2L} - 1$ независимых параметров *три* вещественных параметра $P_{1,z}, P_{2,z}, G_{1z,2z}$ (1.56) и *шесть* комплексных параметров (1.59), описывающих, соответственно, *продольные* и *поперечные* процессы релаксации.

В качестве гамильтониана двухспиновой системы достаточно общего вида (далее по повторяющимся «немым» индексам производится суммирование) воспользуемся выражением:

$$\mathbf{H} = \sum_{\gamma=1}^{15} F_{\gamma} D_{\gamma} = -\gamma_1 B_i / 2 (\sigma_{1i} \otimes \mathbf{1}_2) - \gamma_2 B_j / 2 (\mathbf{1}_1 \otimes \sigma_{2j}) + J_{ij} / 4 (\sigma_{1i} \otimes \sigma_{2j}), \quad (1.82)$$

с 15-ю параметрами

$$D_{\alpha} \equiv \{ -\gamma_1 B_i, -\gamma_2 B_j, J_{ij} / 4 \}. \quad (1.83)$$

Подставляя в уравнение для приведенной матрицы плотности

$$i\partial \rho(t) / \partial t = [\mathbf{H}, \rho(t)], \quad (1.84)$$

выражения (1.56) и (1.82) и вычисляя след матрицы $Q_{\alpha}(t) = \text{Sp} F_{\alpha} \rho(t)$ по спиновым состояниям, получим систему 15 линейных уравнений для классических динамических величин $Q_{\alpha}(t)$, в которая пока *не учитывает неунитарные релаксационные* процессы:

$$dQ_{\alpha}(t) / dt = -i \text{Sp} F_{\alpha} [\mathbf{H}, \rho(t)] = \sum_{\beta}^{15} \{ -i \sum_{\gamma}^{15} \text{Sp} (F_{\alpha} [F_{\gamma}, F_{\beta}]) D_{\gamma} \} Q_{\beta}(t) = \sum_{\beta}^{15} M_{\alpha\beta} Q_{\beta}(t), \quad (1.85)$$

где *антисимметричная эрмитова матрица* $M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha} = M_{\beta\alpha}^*$ с нулевыми диагональными элементами выражаются через 15 параметров D_{α} , определяемых структурой гамильтониана двухспиновой системы и содержит $15 \cdot 7 = 105$ вещественных параметров.

Таким образом, полное число независимых параметров, определяющих *унитарную* динамику двухкубитовой системы и число соответствующих уравнений равно квадрату размерности гильбертового пространства 2^4 без единицы, то есть 15.

С учетом свойств для коммутаторов и антикоммутаторов матриц Паули с индексами $i, j = x, y, z$ (являющихся генераторами одной из так называемых алгебр Клиффорда):

$$[\sigma_{\alpha,i}, \sigma_{\beta,j}] = i2\varepsilon_{ijk} \delta_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha,k}, \quad \{\sigma_{\alpha,i}, \sigma_{\alpha,j}\} = 2\delta_{ij}, \quad (1.86)$$

эта система динамических уравнений принимает следующий явный вид

$$dP_{1i}(t)/dt = \varepsilon_{ikl}(\gamma_1 P_{1k}(t)B_l + J_k \mathbf{G}_{1l,2n}(t)/2),$$

$$dP_{2i}(t)/dt = \varepsilon_{ikl}(\gamma_2 P_{2k}(t)B_l + J_{nk} \mathbf{G}_{1n,2l}(t)/2),$$

$$d\mathbf{G}_{1i,2j}(t)/dt = \gamma_1 \varepsilon_{ikl} B_l \mathbf{G}_{1k,2j}(t) + \gamma_2 \varepsilon_{jkl} B_l \mathbf{G}_{1i,2k}(t) + (\varepsilon_{ikl}/2)J_{kj}P_{1i}(t) + (\varepsilon_{jkl}/2)J_{ik}P_{2l}(t), \quad (1.87)$$

где введено обозначение $\mathbf{G}_{1l,2n}(t) = P_{1l}(t)P_{2n}(t) + G_{1l,2n}(t)$.

Заметим, что если произвести операцию преобразования, описываемого операторами (1.50) с последующим усреднением результатов над произвольной недиагональной матрицей плотности (1.56), то число независимых параметров и, соответственно, число динамических уравнений, оказывается существенно меньшим (так вместо 15 будет всего 5) и, следовательно, полученная таким образом система *не даст полного описания динамики* квантовой системы.

Для учета неунитарных процессов релаксации часто пользуются локальным во времени *феноменологическим уравнением для матрицы плотности*, полученным в рамках борновского приближения и предполагающего марковский характер случайных воздействий со стороны окружения на произвольную квантовую систему, сформулированную Дж. Линдбладом [1.27]. В частности, для оператора плотности ансамбля двухспиновых систем оно может быть представлено в виде:

$$i\partial \rho(t)/\partial t = [\mathbf{H}, \rho(t)] + iL_D[\rho(t)], \quad (1.88)$$

где

$$L_D[\rho(t)] = 1/2 \sum_{\gamma, \delta}^{15} a_{\gamma\delta} ([F_\gamma \rho(t), F_\delta^+] + [F_\gamma, \rho(t)F_\delta^+]), \quad (1.89)$$

— *оператор Линдблада*, $a_{\alpha\beta}$ — независимая от времени *эрмитовая* положительно полуопределенная *матрица* 15×15 в общем случае с 225 вещественными параметрами, имеющими размерность обратного времени. Отметим, что след от правой части (1.88) равен нулю и, следовательно, $\text{Sp} \rho(t) = 1$.

Такого же типа 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 [1.4, 1.5, 1.7], а также А. Редфильда [1.28]. 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 соответствует предположению о **марковском характере** случайных процессов, также лежащем в основе уравнения Линдблада.

Общая линейная система уравнений движения Линдблада для макроскопических динамических переменных $\text{Sp} \rho F_\alpha = Q_\alpha$ с учетом релаксационных эффектов определяется из следующего уравнения:

$$dQ_\alpha(t)/dt = -i \text{Sp}\{[\mathbf{H}, \rho(t)] F_\alpha\} + \text{Sp}\{L_D[\rho(t)] F_\alpha\}. \quad (1.90)$$

Следует заметить, что в такой форме уравнение для матрицы плотности описывает установление максимально смешанного равновесного состояния с равными населенностями для всех состояний, то есть описываемого равновесной матрицей плотности $\rho_0 = 1/4$.

Между тем еще Редфильдом было показано [1.28], что для того, чтобы уравнение для матрицы плотности описывало установление произвольного термодинамического равновесия с равновесной матрицей плотности вида $\rho_0 = \exp(-\mathbf{H}/kT)/\text{Sp} \exp(-\mathbf{H}/kT)$, в релаксационном операторе следует заменить ρ на разность $\rho - \rho_0$. Такое уравнение известно как уравнение Редфильда [1.28, 1.29].

Подставляя снова в (1.90) выражения (1.85) и (1.89) и вводя указанную поправку Редфильда, мы получим **обобщенную систему уравнений**, описывающую динамику двухкубитового ансамбля в виде (здесь учтено, что $F_{16} = \hat{\mathbf{I}}$):

$$dQ_\alpha(t)/dt = \sum_{\beta}^{15} M_{\alpha\beta} Q_\beta(t) + 1/2 \sum_{\beta}^{15} R_{\alpha\beta} (Q_\beta(t) - Q_{\beta 0}(B)), \quad (1.91)$$

где

$$R_{\alpha\beta} = \sum_{\beta}^{15} \sum_{\gamma,\delta}^{15} a_{\gamma\delta} \cdot \text{Sp} F_\alpha ([F_\gamma F_\beta, F_\delta^+] + [F_\gamma, F_\beta F_\delta^+]) \quad (1.92)$$

релаксационная эрмитова матрица.

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

Для однокубитовых систем матрица $R_{\alpha\beta}$ 3×3 характеризуется тремя вещественными (положительными диагональными элементами). В качестве частного случая из уравнения (1.91) следует **уравнение Блоха** для вектора Блоха с тремя составляющими (1.11).

Если внешнее магнитное поле зависит от времени $\mathbf{V}(t) = \mathbf{V} + \mathbf{b}(t)$, то на масштабе времени значительно большем **времени корреляции** τ_c случайных полей и при $\gamma|\mathbf{b}| \tau_c \ll 1$ равновесное значение макроскопической динамической переменной $Q_{\beta 0}(\mathbf{V}(t))$ следует считать, как это делалось при обобщении уравнения Блоха, зависящей от мгновенного значения поля $\mathbf{V}(t)$. Это оказывается существенным в случае достаточно сильных переменных полей $\mathbf{b}(t)$.

Если условие $\gamma|\mathbf{b}| \tau_C \ll 1$ не выполняется, ситуация оказывается более сложной, в частности времена релаксации начинают зависеть от амплитуды переменного поля $|\mathbf{b}|$ [1.8].

Число вещественных параметров, характеризующих равновесное смешанное состояние, то есть определяется размерностью гильбертова пространства, тогда как число вещественных параметров, описывающих динамику *смешанного* состояния ансамбля двухкубитовых систем, в общем случае увеличивается до максимального числа элементов матрицы $R_{\gamma\delta}$ $(2^4 - 1)^2 = 225$. Конкретное значение этих параметров определяется характером энергетического спектра спиновой системы, механизмами взаимодействия кубитов между собой и с окружением и может быть определено лишь для некоторых простых моделей (см. ниже разделы 1.10 – 1.12).

Следует заметить, что в случае, когда составляющие тензора корреляции отсутствуют, число динамических параметров значительно уменьшается и сводится к шести составляющим двух векторов Блоха. Однако 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 простейшем случае для ансамбля, состоящего только из двух типов некоррелированных спинов-кубитов, мы будем иметь систему двух связанных уравнений для векторов Блоха с 21 вещественными релаксационными параметрами. Для системы с одноосной симметрией, определяемой направлением внешнего поля, число независимых параметров уменьшается до 12.

Частным случаем является известная система уравнений И.Соломона и Н.Бломбергера, для z -составляющих двух векторов Блоха (векторов поляризации) [1.8]. Она содержит только 4 различных релаксационных параметра. Более полная система уравнений для векторов намагниченностей (или векторов Блоха) была сформулирована нами ранее в [1.30]:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}_1}{dt} + \frac{P_{1x}\mathbf{i} + P_{1y}\mathbf{j}}{T_{1\perp}} + \frac{(P_{1z} - P_{1z0})\mathbf{k}}{T_{1\parallel}} + \frac{P_{2x}\mathbf{i} + P_{2y}\mathbf{j}}{T_{12\perp}} + \frac{(P_{2z} - P_{20})\mathbf{k}}{T_{12\parallel}} &= \gamma_1[\mathbf{P}_1 \times \mathbf{B}(t)] + \gamma_{12}[\mathbf{P}_2 \times \mathbf{B}(t)] \\ \frac{d\mathbf{P}_2}{dt} + \frac{P_{2x}\mathbf{i} + P_{2y}\mathbf{j}}{T_{2\perp}} + \frac{(P_{2z} - P_{20})\mathbf{k}}{T_{2\parallel}} + \frac{P_{1x}\mathbf{i} + P_{1y}\mathbf{j}}{T_{21\perp}} + \frac{(P_{1z} - P_{10})\mathbf{k}}{T_{21\parallel}} &= \gamma_2[\mathbf{P}_2 \times \mathbf{B}(t)] + \gamma_{21}[\mathbf{P}_1 \times \mathbf{B}(t)] \end{aligned} \quad (1.93)$$

Для $I_1 = I_2 = 1/2$ и равного числа обоих кубитов, *времена перекрестной релаксации* $T_{21,\perp} = T_{12,\perp}$, $T_{21,\parallel} = T_{12,\parallel}$ и число независимых релаксационных параметров уменьшается до *шести*. На основе подобной системы уравнений, в частности, была продемонстрирована возможность значительного увеличения сигнала ЯМР в квантовых магнетометрах на пара-

магнитных растворах в условиях динамической поляризации ядерных спинов (эффекта Оверхаузера) [1.31].

С увеличением числа кубитов 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 L -кубитовой системы число динамических параметров, равное числу элементов матрицы плотности без единицы и достигает огромных значений $(2^{2L} - 1)$. 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**.

К счастью однако любые конкретные вычислительные операции представляются с помощью достаточно простых операций, происходящими только с одно- и двухкубитовыми состояниями, которые должны выполняться за времена, малые по сравнению с характерными временами декогерентизации этих 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 обобщение уравнения Линдблада и, в частности, уравнения (1.91) путем введения взамен независимой от времени релаксационной матрицы $R_{\alpha\beta}$ некоторой **матрицы памяти** $f_{\alpha\beta}(t)$:

$$R_{\alpha\beta}(Q_{\beta} - Q_{\beta 0}(B)) \rightarrow \int_0^t f_{\alpha\beta}(\tau)(Q_{\beta}(t - \tau) - Q_{\beta 0}(B))d\tau, \quad (1.94)$$

Заключение: Отмечено, что процессы декогерентизации и диссипации двухкубитовых систем описываются в рамках уравнения Линдблада с помощью релаксационной матрицы 15×15 с 225 элементами.

Сформулировано **обобщенное уравнение Линдблада**, которое для двухкубитового ансамбля, вообще говоря содержит дополнительно 15 параметров – равновесных значений динамических переменных. Получена система связанных уравнений для двух кубитов, не учитывающая тензоров корреляции.

Уравнение Линдблада обобщается и на случай **немарковских** случайных процессов, аналогично выполненному выше обобщению уравнения Блоха.

1.8. Декогерентизация состояний кубитов и способы ее описания

Декогерентизация квантовых состояний в системе, взаимодействующей с макроскопическим окружением, является, наряду с **диссипацией** энергии, типичным необратимым про-

цессом. 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 если определено *представление* для этой матрицы. Следовательно, должен существовать объективный 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.

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

$$E(\rho) = -\text{Sp } \rho(t) \log_2 \rho(t), \quad (1.95)$$

где $\rho(t)$ — приведенный оператор плотности, полученный путем взятия шпура от общего оператора плотности $|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$ по неконтролируемым степеням свободы окружения. Иначе говоря, энтропия запутанности является *энтропией фон Неймана* для смешанного состояния квантовой системы, описываемого матрицей плотности $\rho(t)$. 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 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 гамильтонианы квантовой системы и ее взаимодействия с окружением коммутируют между собой, состояниями-указателями могут

служить собственные функции гамильтониана квантовой системы, то есть соответствующее представление может быть названо *энергетическим*.

В энергетическом представлении процессы диссипации и декогерентизации четко разделяются и имеют свои временные масштабы. Непрерывное 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 обычно *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 другом представлении недиагональные элементы матрицы плотности при этом могут оставаться отличными от нуля. При переходе в собственное представление, то есть при диагонализации матрица плотности системы (это уже 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

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB}, \quad (1.96)$$

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 *стационарного случайного процесса марковского типа*, можно воспользоваться феноменологическим уравнением Линдблада (1.87) для матрицы плотности. Явление релаксации широко изучалось в физике разного рода двухуровневых систем и, в частности, в физике ядерного магнитного резонанса [1.8, 1.29], 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 отдельного кубита любые ошибки в матрице плотности $\delta\rho(t)$, в том числе и связанные с непрерывной декогерентизацией, могут быть определены из уравнения фон Неймана, если гамильтониан для него записать в виде

$$\mathbf{H} = -(\omega_0/2) \sigma_z - 1/2 (\varepsilon_z(t) \sigma_z + \varepsilon_x(t) \sigma_x + \varepsilon_y(t) \sigma_y), \quad (1.97)$$

где $\varepsilon_{x,y,z}(t)$ — амплитуды трех типов случайных нестационарных воздействий на кубит с определенными статистическими характеристиками, соответствующих *трем разным типам* ошибок. Это, соответственно, *фазовая* ошибка (phase-flip) $\varepsilon_z(t) \sigma_z$, определяющая собой фазы квантового состояния, *амплитудная* ошибка (bit-flip) $\varepsilon_x(t) \sigma_x$, приводящая к изменению населенностей состояний и смешанная *амплитудно-фазовая* ошибка (bit-phase-flip) $\varepsilon_y(t) \sigma_y$, соответствующая их комбинации. Воздействия, описываемые случайной функцией $\varepsilon_z(t) = \Delta\omega(t)$ не приводят к переходам между базисными состояниями, то есть не сопровождаются диссипацией энергии. Они ответственны за так называемую *адиабатическую декогерентизацию*.

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

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

$$\delta\rho(t) = 1/2 (\delta P_z(t) \sigma_z + \delta P_+(t) \sigma_- + \delta P_-(t) \sigma_+). \quad (1.98)$$

В случае L -кубитового регистра число различных типов ошибок в общем случае равно числу независимых элементов матрицы плотности регистра $2^{2L} - 1$. Для независимых кубитов в регистре, когда ошибки не коррелированы, число разных типов ошибок, очевидно, снижается до $3L$.

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 плотности, которая при диагонализации имеет ненулевые матричные элементы, являющиеся населенностями микросостояний p_n для состояний $|n\rangle$. Для такого состояния можно определить информационную энтропию Шеннона:

$$H[p] = - \sum_n p_n \log_2 p_n \quad (1.99)$$

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

$$S[\rho] = E(\rho) = - \text{Sp } \rho(t) \log_2 \rho(t) \quad (1.100)$$

Разность

$$S[\rho] - H[\rho] \geq 0 \quad (1.101)$$

обращается в нуль когда оператор плотности диагонален в базисе $|n\rangle$. Если равновесное состояние чистое, то неравенство (1.101) 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

$$F(t) = \text{Sp } \rho(t)\rho(0) = 1 - p(t), \quad (1.102)$$

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 скорость декогерентизации начального состояния.

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

$$P(t) = 2\text{Sp}(\rho(t)^2 - \rho(t)) + 1 = 2\text{Sp}(\rho(t)^2) - 1 \leq 1. \quad (1.103)$$

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

Заключение: Описание скорости как процессов диссипации, так и процессов декогерентизации на основе уравнения Линдберга с учетом полной релаксационной матрицы даже для двухкубитового ансамбля **практически не представляется возможным**. 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, используя такие инвариантные относительно используемого представления квантовых состояний величины как **точность** воспроизведения или **чистота** квантового состояния.

1.9. Точно решаемая квантовая модель адиабатической декогерентизации состояния кубита и ее трудности

Точно решаемая квантовая модель адиабатической декогерентизации состояний однокубитового ансамбля была первоначально детально изучена в работах [1.35 – 1.37] и затем была существенно уточнена при рассмотрении случая произвольного числа кубитов в регистре в [1.38]. Здесь мы дадим анализ этой модели для случая *одного кубита* и обсудим ее физическую адекватность.

В этой модели предполагалось, 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):

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB} = \\ &= -(\omega_0/2) \sigma_z \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1} \otimes \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sum_k \sigma_z \otimes (g_k b_k^+ + g_k^+ b_k), \end{aligned} \quad (1.104)$$

где \mathbf{H}_S и \mathbf{H}_B — гамильтонианы кубита и окружения в матричном представлении, $\mathbf{1}_S$, и $\mathbf{1}_B$ — единичные 2×2 матрицы-операторы, действующие, соответственно, на кубит и бозонное возбуждение, а третье слагаемое — описывает модуляцию резонансной частоты взаимодействия между ними, σ_z — диагональная матрица Паули, $b_k^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_k$ и $b_k = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_k$ — бо-

зонные матрицы рождения и уничтожения k -ой гармонической полевой моды вторично-квантованного окружения, $b_k^+ b_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_k$, $g_k b_k^+ + g_k^* b_k = \begin{pmatrix} 0 & g_k^* \\ g_k & 0 \end{pmatrix}$. Роль бозонных мод в

ЯМР квантовых регистрах могут играть фононные и магнонные моды. Например, при взаимодействии с акустическими фотонами в простой кубической решетке из N атомов с массой M

$$g_k \sim \omega_0 \sqrt{\hbar / (2NM_0 \omega_k)} \cdot k. \quad (1.105)$$

Рассматриваемый гамильтониан имеет характерное свойство:

$$[\mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B, \mathbf{H}] = 0, \quad (1.106)$$

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 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 сопровождается релаксацион-

ными 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:

$$\rho_S(t) = \text{Sp}_B \rho(t) = 1/2 (\mathbf{1} + P_z \sigma_z + P_+ \sigma_+ + P_- \sigma_-). \quad (1.107)$$

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 $P_{\pm}(t)$. Поэтому данную модель можно было бы рассматривать как квантовый аналог рассмотренной выше полуклассической модели.

Предположим, что в начальный $t = 0$ состояния кубита и окружения не коррелированы и оператор плотности можно представить в виде: $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B(0)$, где начальное значение приведенной матрицы плотности когерентного состояния кубита имеет отличную от нуля поперечную составляющую вектора Блоха $P_-(0) = 2\text{Sp}_S(\sigma_- \rho_S(0))$, а в качестве матрицы плотности окружения, рассматриваемого как система бозонных возбуждений, используется ее равновесное значение при температуре T (обратное влияние спиновой системы на окружение пренебрегается):

$$\rho_B(0) = \exp(-\mathbf{H}_B/T) / \text{Sp} \exp(-\mathbf{H}_B/T) = \prod_k \frac{\exp(-\omega_k b_k^+ b_k / T)}{(1 - \exp(-\omega_k / T))^{-1}} \quad (1.108)$$

Зависимость от времени недиагональных элементов матрицы плотности определяется составляющими вектора Блоха:

$$P_-(t) = 2\text{Sp}(\sigma_- \rho(t)), \quad (1.109)$$

где оператор плотности $\rho(t)$ удовлетворяет операторному уравнению

$$i\partial \rho(t) / \partial t = [\mathbf{H}, \rho(t)]. \quad (1.110)$$

Матрица плотности в представлении взаимодействия $\rho_{\text{int}}(t) = \mathbf{U}^{-1}(t) \rho(t) \mathbf{U}(t)$ удовлетворяет уравнению

$$i\partial \rho_{\text{int}}(t) / \partial t = [\mathbf{H}_{\text{SB}}(t), \rho_{\text{int}}(t)], \quad (1.111)$$

где

$$\mathbf{H}_{\text{SB}}(t) = \mathbf{U}^{-1}(t) \mathbf{H}_{\text{SB}} \mathbf{U}(t) = \sigma_z \otimes \sum_k \left(g_k b_k^+ \exp(i\omega_k t) + g_k^* b_k \exp(-i\omega_k t) \right), \quad (1.112)$$

$$\mathbf{U}(t) = \exp(-i(\mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B)t). \quad (1.113)$$

Решение уравнения (1.111) представим как результат следующего унитарного преобразования

$$\rho_{\text{int}}(t) = \mathbf{U}_{\text{int}}^{-1}(t) \rho_{\text{int}}(0) \mathbf{U}_{\text{int}}(t), \quad (1.114)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{\text{int}}(t) &= \exp\left(-i \int_0^t \mathbf{H}_{\text{SB}}(t') dt'\right) = \exp\left\{-i \int_0^t \sum_k \sigma_z \otimes (g_k b_k^+ \exp(i\omega_k t') + g_k^* b_k \exp(-i\omega_k t')) dt'\right\} = \\ &= \exp \sum_k \left((\sigma_z / 2) \otimes (b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t)) \right), \quad \xi_k(t) = 2g_k (1 - \exp(i\omega_k t)) / \omega_k. \end{aligned} \quad (1.115)$$

Оператор $\mathbf{U}_{\text{int}}(t)$ индуцирует запутывание состояний кубита и окружения, возникающее при $t > 0$. Именно образование запутанного состояния с окружением ответственно за процесс декогерентизации квантового состояния кубита, описываемого составляющими вектора Блоха $P_{\pm}(t)$. В (1.115), вообще говоря, следовало бы ввести оператор упорядочения операторов по времени Вика \mathbf{T} . Однако, как показано в [1.41] это не существенно для однокубитовых ансамблей.

Перейдем к вычислению $P_{-}(t)$. Подставляя в (1.123) найденное значение $\rho_{\text{int}}(t)$, используя свойство инвариантности следа относительно циклической перестановки операторов и соотношение $\mathbf{U}(t)^{-1} \sigma_{-} \mathbf{U}(t) = \exp(i\omega_0 t) \sigma_{-}$, запишем

$$P_{-}(t) = \exp(i\omega_0 t) 2\text{Sp}(\sigma_{-} \mathbf{U}_{\text{int}}^{-1}(t) \sigma_{+} \otimes \rho_{\text{B}}(0) \mathbf{U}_{\text{int}}(t)) P_{-}(0). \quad (1.116)$$

Учитывая далее, что

$$\mathbf{U}_{\text{int}}^{-1}(t) \sigma_{+} \mathbf{U}_{\text{int}}(t) = \sigma_{+} \exp \sum_k (b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t)) \quad (1.117)$$

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

$$P_{-}(t) = \exp(i\omega_0 t) \text{Sp}_{\text{B}} \rho_{\text{B}}(0) \exp \sum_k (b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t)) P_{-}(0), \quad (1.118)$$

где

$$\begin{aligned} \text{Sp}_{\text{B}} \rho_{\text{B}}(0) \exp \sum_k (b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t)) &= \prod_k \text{Sp}_{\text{B}k} \frac{\exp(-\omega_k b_k^+ b_k / T)}{(1 - \exp(-\omega_k / T))^{-1}} \exp \sum_l (b_l^+ \xi_l(t) - b_l \xi_l^*(t)) = \\ &= \prod_k \langle \exp(b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t)) \rangle_k, \end{aligned} \quad (1.119)$$

$\text{Sp}_{\text{B}k}$ — оператор взятия следа (диагональной суммы по числам заполнения n_k), соответствующий вычислению среднего значения в k -ом состоянии:

$$\text{Sp}_{\text{B}k}(\dots) = \langle \dots \rangle_k = \sum_{n_k=0}^{\infty} \langle n_k | \frac{\exp(-\omega_k n_k / T)}{(1 - \exp(-\omega_k / T))^{-1}} \dots | n_k \rangle, \quad \text{при этом } \langle 1 \rangle_k = 1.$$

При вычислении этого среднего воспользуемся *теоремой Ф.Блоха* (см., например, [1.39]), которая определяет *точное выражение*

$$\prod_k \left\langle \exp(b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t)) \right\rangle_k = \exp \left(- (1/2) \sum_k \left\langle (b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t))^2 \right\rangle_k \right) = \exp(-\Gamma(t)), \quad (1.120)$$

где

$$\Gamma(t) = \sum_k \frac{|\xi_k(t)|^2}{2} \operatorname{cth}(\omega_k/2T) = \sum_k 4 |g_k|^2 \frac{1 - \cos(\omega_k t)}{\omega_k^2} \operatorname{cth}(\omega_k/2T) \quad (1.121)$$

декремент декогерентизации.

Введем далее в рассмотрение спектральную плотность окружения $I(\omega) = \sum_k \delta(\omega - \omega_k) |g_k|^2$ и получим точное выражение, приведенное в [1.35, 1.36]

$$\Gamma(t) = \int_0^\infty 4I(\omega)(2n(\omega, T) + 1) \frac{1 - \cos(\omega t)}{\omega^2} d\omega, \quad (1.122)$$

в котором $n(\omega, T) = (\exp(\omega/T) - 1)^{-1}$ — среднее число бозевских возбуждений при температуре T . Из (1.12) следует, что вклад тепловых и вакуумных флуктуаций в $\Gamma(t)$ оказывается разделенным, а перемножение временных шкал, обусловленных этими двумя механизмами, приводит к достаточно сложному процессу декогерентизации:

$$P_z(t) = P_z(0), \quad P_{\pm}(t) = \exp(i\omega_0 t - \Gamma(t)) P_{\pm}(0). \quad (1.123)$$

Для точности воспроизведения состояния (fidelity) в лабораторной системе координат получим

$$F(t) = \operatorname{Sp} \rho(t) \rho = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(1 + P_z^2 + P_{\pm}(t) P_{\pm}^*) = \frac{1}{2} ((1 + P(0)_z^2) + (P(0)_x^2 + P(0)_y^2) \exp(i\omega_0 t - \Gamma(t))). \quad (1.124)$$

Конкретный вид зависимости $\Gamma(t)$ определяется видом спектральной плотности окружения. Если роль бозонов играют фононы кристаллической решетки, то их спектр ограничен сверху дебаевской частотой ω_D , а спектральную плотность можно представить в виде $I(\omega) = \alpha \omega^3 \exp(-\omega/\omega_D)$, где постоянная α характеризует интенсивность спектра случайных воздействий на кубит. Заметим, что в точном выражении эта интенсивность пропорциональна $|g_k|^2$. При $n = 1$ одномерная окружающая среда называется «омической». Авторы работ [1.35 – 1.37] приводят результаты численного моделирования величины $\Gamma(t)$ для различных значений параметров ω_D и T для одно- и двухкубитового регистра.

Здесь мы ограничимся рассмотрением асимптотического поведения $\Gamma(t)$ при $t \rightarrow \infty$, которое в пределе будет соответствовать обратному времени поперечной релаксации ядерного спина $1/T_{\perp}$:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} (\Gamma(t)/t) &= \lim_{t \rightarrow \infty} (d\Gamma(t)/dt) = 1/T_{\perp} = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty 4I(\omega)(2n(\omega, T) + 1) \frac{\sin(\omega t)}{\omega t} d(\omega t) = 2\pi \lim_{\omega \rightarrow 0} I(\omega)(2n(\omega, T) + 1). \end{aligned} \quad (1.125)$$

Этот предел имеет нулевое значение для спектральной плотности $I(\omega)$ с $n > 1$, для омической окружающей среды при $T \gg \omega$

При $T = 0$ ($n(\omega, T) = 0$) он определяется нулевыми колебаниями и конечен, если $\lim_{\omega \rightarrow 0} I(\omega) = \text{Const.}$. В этом случае спектральная плотность соответствует асимптотически экспоненциальной декогерентизации, что является аналогом условия «сильного сужения» в полуклассической модели декогерентизации, когда спектральная плотность отлична от нуля в широкой области частот, начиная от нулевых.

Спектральная плотность вида $I(\omega) = I_0 \delta(\omega - \omega_1)$ соответствует монохроматическим флуктуациям полей, создаваемых окружением и тогда

$$\begin{aligned} \Gamma(t) &= \int_0^{\infty} 4I_0(\omega)(2n(\omega, T) + 1)\delta(\omega - \omega_1) \frac{1 - \cos(\omega t)}{\omega^2} d\omega = \\ &= 4I_0(2n(\omega_1, T) + 1) \frac{1 - \cos(\omega_1 t)}{\omega_1^2} \end{aligned} \quad (1.126)$$

В случае $1/t \gg \omega_1 \gg T$ (это статические флуктуации или «жесткая» решетка) получим $\Gamma(t) = 2I_0 t^2$.

Выражение (1.121) можно получить непосредственно, не прибегая к теореме Блоха, но 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 (1.120) в ряд Тейлора до второго порядка по g_k , запишем

$$\begin{aligned} (d\Gamma(t)/dt) &= -d[\ln(P_-(t) \exp(-i\omega_0 t))]/dt \approx \\ &\approx - \sum_k (d/dt) \ln \left(1 + \langle b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t) \rangle_k + \langle (b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t))^2 \rangle_k / 2 + \dots \right) \approx \\ &\approx - \sum_k (d/dt) \left(\langle b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t) \rangle_k + \right. \\ &\quad \left. + [\langle (b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t))^2 \rangle_k - (\langle b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t) \rangle_k)^2] / 2 \right). \end{aligned} \quad (1.127)$$

При усреднении сохраним лишь слагаемые, диагональные по числам заполнения. В результате будем иметь то же выражение, что следует из точного (1.121)

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} (d\Gamma(t)/dt) &= - \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_k d \left(\langle (b_k^+ \xi_k(t) - b_k \xi_k^*(t))^2 \rangle_k / 2 \right) / dt = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_k 4|g_k|^2 \langle (2n_k + 1) \rangle_k \frac{\sin(\omega_k t)}{\omega_k}. \end{aligned} \quad (1.128)$$

Для асимптотической скорости декогерентизации получим снова выражение

$$\begin{aligned} 1/T_{\perp} &= \lim_{t \rightarrow \infty} (d\Gamma(t)/dt) = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} 4I(\omega)(2n(\omega, T) + 1) \frac{\sin(\omega t)}{\omega t} d(\omega t) = 2\pi \lim_{\omega \rightarrow 0} I(\omega)(2n(\omega, T) + 1), \end{aligned} \quad (1.129)$$

в котором участвуют только упругие процессы взаимодействия спина с бозоном. Однако следует заметить, что при произвольных значениях t вклад дают и неупругие виртуальные процессы с $\omega \neq 0$. При низких температурах $n(\omega, T) = 0$ декогерентизация определяется взаимодействием спина с нулевыми квантовыми флуктуациями бозонного резервуара.

Основой только что рассмотренной модели является **предположение об отсутствии обратного влияния спиновой системы-кубита на бозонный резервуар.**

Неудовлетворительность модели связана со следующими трудностями:

а) Полный гамильтониан $H_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes H_B + \mathbf{H}_{SB}$ может быть диагонализирован с помощью следующего унитарного преобразования

$$\mathbf{U} = \prod_k D(g_k / \omega_k), \quad (1.130)$$

где $D(g_k / \omega_k) = \exp(\sigma_z \otimes (b_k^+ g_k - b_k g_k^*)) / \omega_k = D^{-1}(-g_k / \omega_k)$ представляет собой известный из теории **когерентных состояний бозонного поля** унитарный **оператор смещения** для его k -ой бозонной моды [1.40], который в данном случае является четырехкомпонентной матричной функцией комплексного числа g_k / ω_k . Он производит следующие преобразования бозонных операторов:

$$\begin{aligned} D^{-1}(g_k / \omega_k) (\mathbf{1}_S \otimes b_k) D(g_k / \omega_k) &= \mathbf{1}_S \otimes b_k + (\sigma_z \otimes \mathbf{1}_B) g_k / \omega_k, \\ D^{-1}(g_k / \omega_k) (\mathbf{1}_S \otimes b_k^+) D(g_k / \omega_k) &= \mathbf{1}_S \otimes b_k^+ + (\sigma_z \otimes \mathbf{1}_B) g_k^* / \omega_k. \end{aligned} \quad (1.131)$$

В результате диагонализации гамильтониана бозонной системы получим

$$\begin{aligned} &\mathbf{U} (\mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB}) \mathbf{U}^{-1} = \\ &= \mathbf{U} \left\{ -(\omega_0/2) \sigma_z \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sum_k \sigma_z \otimes (g_k b_k^+ + g_k^+ b_k) \right\} \mathbf{U}^{-1} = \\ &= \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B - \hat{\mathbf{I}} \sum_k |g_k|^2 / \omega_k = \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B - \hat{\mathbf{I}} \int_0^\infty (I(\omega) / \omega) d\omega. \end{aligned} \quad (1.132)$$

Последнее слагаемое в (1.132), когда $\lim_{\omega \rightarrow 0} I(\omega) = \text{Const.}$, обращается в $-\infty$ из-за расходимости интеграла при $\omega \rightarrow 0$ и таким образом **ни одно из собственных состояний** перенормированного гамильтониана в рассматриваемой модели **не может рассматриваться в качестве основного** для описания экспоненциальной декогерентизации.

б) Найдем далее проекцию многомодового когерентного бозонного состояния на исходное вакуумное состояние. Она имеет вид

$$\langle 0 | \prod_k D(g_k / \omega_k) | 0 \rangle = (\sigma_z \otimes \mathbf{1}_B) \exp(-\sum_k |g_k / \omega_k|^2 / 2), \quad (1.133)$$

откуда следует, что для существования многомодовых когерентных состояний и физической устойчивости основного состояния бозонной системы с учетом взаимодействия с кубитом необходимо выполнение условия [1.41].

$$\sum_k |g_k / \omega_k|^2 = \int_0^{\infty} (I(\omega) / \omega^2) d\omega < \infty . \quad (1.134)$$

В случае асимптотически экспоненциальной декогерентизации это условие не выполняется. Это означает, что для такого процесса *вакуумное состояние* (нулевые флуктуации) *не соответствует физически устойчивому основному состоянию*.

в) Обе отмеченные выше трудности преодолеваются, если спектральная плотность обладает свойством $\lim_{\omega \rightarrow 0} (I(\omega) / \omega^2) < \infty$. Однако в этом случае $\lim_{\omega \rightarrow 0} I(\omega) = 0$ и $\lim_{t \rightarrow \infty} (d\Gamma(t) / dt) = 0$, то есть декогерентизация не затухает до нуля, а *выходит на насыщение* и дальнейший распад когерентных состояний будет определяться не учитываемыми в модели релаксационными процессами.

г) Наконец, выбор гамильтониана взаимодействия спина с бозонной системой в виде (1.104), когда модуляция резонансной частоты кубита определяется одноквантовым процессом в бозонной системе, *не вполне обоснован* с точки зрения возможных конкретных микроскопических механизмов адиабатического взаимодействия ядерного спина с окружением в твердом теле.

Заключение: Показано, что широко известная точно решаемая адиабатическая модель *однобозонной декогерентизации* квантового состояния ядерного спина в твердом теле, исключаяющая из рассмотрения, сопровождающиеся диссипацией энергии релаксационные процессы, встречается с существенными трудностями и *не является удовлетворительной*. Она не может рассматриваться также и в качестве адекватного аналога рассмотренной выше квазиклассической модели. Поэтому следует сделать вывод о том, что обобщение однобозонной модели на случай многокубитовых регистров, выполненное в [1.35 – 1.38], *не является вполне правомерным*.

1.10. Двухбозонная модель адиабатической декогерентизации состояния ядерного спина-кубита

Гамильтониан предложенной адиабатической модели представим в виде (матрица 4×4):

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1} \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB} = \\ &= -(\omega_0/2) \sigma_z \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1} \otimes \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sum_{k \neq l} \sigma_z \otimes (g_{k,l} b_k^+ b_l + g_{k,l}^* b_l^+ b_k) , \end{aligned} \quad (1.135)$$

в котором учитывается, что ядерный спин взаимодействует не с одной, а с *двумя* бозонными модами (индексы \mathbf{k} , в частности, соответствуют импульсам фононов), такое взаимодействие описывает в первом порядке теории возмущений *упругое рассеяние бозонов* на спине без его переворота, но с изменением импульса рассеиваемых фононов на \mathbf{q} ,

$g_{k,l} = g_{l,k}^* \sim \omega_0 kl (\hbar / 2NM_0) (\omega_k \omega_l)^{-1/2}$. Процессы с поглощением и испусканием двух бозонов являются неупругими и 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:

$$\rho_{\text{int}}(t) = \mathbf{U}_{\text{int}}^{-1}(t) \rho(0) \mathbf{U}_{\text{int}}(t), \quad (1.136)$$

где (далее для краткости обозначено: $\mathbf{k} = k, \mathbf{l} = l$)

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{\text{int}}(t) &= \exp(\sigma_z / 2) \otimes \sum_{k \neq l} (\xi_{kl}(t) b_k^+ b_l - \xi_{kl}^*(t) b_l^+ b_k), \\ \xi_{kl}(t) &= -\xi_{lk}^*(t) = 2g_{kl} (1 - \exp(i\omega_{kl}t)) / \omega_{kl}, \quad \omega_{kl} = \omega_k - \omega_l. \end{aligned} \quad (1.137)$$

Для вычисления поперечной составляющей вектора Блоха воспользуемся снова выражением (1.118). Учитывая теперь, что

$$\mathbf{U}_{\text{int}}^{-1}(t) \sigma_+ \mathbf{U}_{\text{int}}(t) = \exp \sum_{k \neq l} (\xi_{kl}(t) b_k^+ b_l - \xi_{kl}^*(t) b_l^+ b_k) \sigma_+ \quad (1.138)$$

и производя циклическую перестановку под знаком следа, в результате найдем

$$\begin{aligned} P_-(t) &= \exp(i\omega_0 t) \prod_{k,l} \text{Sp}_{Bkl} P_-(0) = \\ &= \exp(-i\omega_0 t) \prod_{k,l} \left\langle \exp(\xi_{kl}(t) b_k^+ b_l - \xi_{kl}^*(t) b_l^+ b_k) \right\rangle_{k,l} \cdot P_-(0), \end{aligned} \quad (1.139)$$

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

$$\text{Sp}_{Bkl}(\dots) \equiv \langle \dots \rangle_{k,l} = \sum_{n_k, n_l} \langle n_k, n_l | \frac{\exp(-\omega_k n_k / T)}{(1 - \exp(-\omega_k / T))^{-1}} \frac{\exp(-\omega_l n_l / T)}{(1 - \exp(-\omega_l / T))^{-1}} \dots | n_k, n_l \rangle. \quad (1.140)$$

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. Поэтому приходится воспользоваться непосредственно теорией возмущений для вычисления асимптотической скорости декогерентизации, аналогично тому, как это было сделано выше при получении выражения (1.128).

Снова с точностью до слагаемых второго порядка по g_k запишем

$$\begin{aligned} (d\Gamma(t) / dt) &= -d [\ln(P_-(t) \exp(-i\omega_0 t))] / dt = \\ &= -(d/dt) \sum_{k,l} \left\langle (b_k^+ b_l \xi_{kl}(t) - b_l^+ b_k \xi_{kl}^*(t))^2 / 2 \right\rangle_{k \neq l} = \\ &= (d/dt) \sum_{k,l} \left\langle (2n_k n_l + n_k + n_l) |\xi_{kl}(t)|^2 / 2 \right\rangle_{k \neq l} \end{aligned} \quad (1.141)$$

и получим

$$(d\Gamma(t)/dt) = \sum_{k,l} 4 |g_{kl}|^2 (2n(\omega_k, T)n(\omega_l, T) + n(\omega_k, T) + n(\omega_l, T)) \frac{\sin(\omega_{kl}t)}{\omega_{kl}}. \quad (1.142)$$

Введем далее двухчастотную спектральную плотность воздействий со стороны окружения

$$I(\omega, \omega') = \sum_{k,l} |g_{kl}|^2 \delta(\omega - \omega_k) \delta(\omega' - \omega_{kl}), \quad (1.143)$$

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

$$\begin{aligned} 1/T_{\perp} &= \lim_{t \rightarrow \infty} (d\Gamma(t)/dt) = \lim_{\omega' \rightarrow 0} 8\pi \int_0^{\infty} I(\omega, \omega') n(\omega, T) (1 + n(\omega, T)) d\omega = \\ &= 8\pi \int_0^{\infty} I(\omega, 0) \frac{\exp(\omega/T)}{(\exp(\omega/T) - 1)^2} d\omega \end{aligned} \quad (1.144)$$

Из этого выражения следует, что основной вклад в $1/T_{\perp}$ дают бозонные моды с **близкими частотами**, что соответствует реальным процессам **упругого рассеяния**. При низких температурах скорость асимптотической декогерентизации, определяемая рассматриваемым механизмом, в отличие от однобозонного механизма, стремится к нулю поскольку $n(\omega, T) \rightarrow 0$. При произвольных значениях t скорость декогерентизации определяется также и неупругими виртуальными процессами с $\omega \neq 0$.

Перейдем теперь к рассмотрению **основного состояния** модели, описываемую гамильтонианом (1.135).

Основному состоянию спиновой системы соответствует собственное значение $\langle \sigma_z \rangle = 1$. Поэтому для описания основного состояния полной системы вместо гамильтониана (1.142) будем использовать следующее выражение (матрица 2×2):

$$\mathbf{H}_0 = -(\omega_0/2) \mathbf{1}_B + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{l}} (g_{\mathbf{k}, \mathbf{l}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{l}} + g_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}^* b_{\mathbf{l}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}}). \quad (1.145)$$

Воспользуемся далее каноническим преобразованием Боголюбова-Тябликова [1.42] для этого случая, новые бозевские операторы представим в виде суперпозиции:

$$\beta_{\mathbf{k}, \mathbf{l}} = u_{\mathbf{k}, \mathbf{l}} b_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}, \mathbf{l}} b_{\mathbf{l}}, \quad \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}^* b_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}^* b_{\mathbf{l}}^{\dagger}, \quad (1.146)$$

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

$$|u_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}|^2 + |v_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}|^2 = 1, \quad (1.147)$$

при котором новые бозевские операторы удовлетворяют обычным коммутационным соотношениям.

Гамильтониан системы после преобразования принимает вид:

$$\mathbf{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}} E_{\mathbf{k}, \mathbf{l}} \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}. \quad (1.148)$$

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

$$i \frac{d\beta_{k,l}}{dt} = [\beta_{k,l}, \mathbf{H}_0] = E_{k,l} \beta_{k,l}, \quad i \frac{d\beta_{k,l}^+}{dt} = [\beta_{k,l}^+, \mathbf{H}_0] = -E_{k,l} \beta_{k,l}^+. \quad (1.149)$$

С другой стороны,

$$i \frac{db_k}{dt} = [b_k, \mathbf{H}_0] = \omega_k b_k + \sum_l g_{k,l} b_l, \quad i \frac{db_l}{dt} = [b_l, \mathbf{H}_0] = \omega_l b_l + \sum_k g_{k,l}^* b_k, \quad (1.150)$$

Подставим далее (1.146) в (1.148) и используем (1.149). Собирая коэффициенты при b_k , b_l , получим

$$E_{k,l} u_{k,l} = \omega_k u_{k,l} + g_{k,l}^* v_{k,l}, \quad E_{k,l} v_{k,l} = \omega_l v_{k,l} + g_{k,l} u_{k,l}. \quad (1.151)$$

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

$$E_{k,l}^\pm = \omega_k \delta_{k,l} \pm |g_{k,l}|. \quad (1.152)$$

Условием устойчивости основного состояния соответствует положительность энергии обеих ветвей элементарных возбуждений: $\omega_k > |g_{k,l}|$. Таким образом, трудности, связанные с неограниченным ростом энергии основного состояния в однобозонной модели декогерентизации, в рассматриваемом случае *не возникают*.

Заключение: Показано, что модель адиабатической декогерентизации состояния кубита, учитывающая двухбозонные упругие процессы рассеяния, *свободна от трудностей*, которые присущи моделям с однобозонными процессами. Поэтому при построении модели адиабатической декогерентизации многокубитовых регистров *адекватным* является не однобозонный, а *двухбозонный упругий процесс*.

1.11. Полуклассическая модель адиабатической декогерентизации в однокубитовом ансамбле

1.11.1. Адиабатическая декогерентизация в однокубитовом ансамбле

Рассмотрим однокубитовый ансамбль, в котором отдельные кубиты независимо взаимодействуют с окружением. При этом будем предполагать, что характерная частота воздействия окружения на спины ω_C мала по сравнению с частотой переходов спинов между энергетическими уровнями ω_0 ($\omega_C \ll \omega_0$) и поэтому *релаксации энергии практически не происходит* (это предположение как раз соответствует известному *адиабатическому приближению* в теории уширения линии ядерного магнитного резонанса [1.8]).

В этом случае в гамильтониане спина-кубита (1.93), можно учитывать только взаимодействие с внешним и с флуктуирующим полем, создаваемым окружением, следующего вида

$$\mathbf{H} = -(\omega_0 + \Delta\omega(t))\sigma_z/2, \quad (1.153)$$

где модуляция резонансной частоты $\varepsilon_z(t) \equiv \Delta\omega(t)$ является случайной функцией времен, одинаковой для всех кубитов ансамбля.

Основной причиной декогерентизации в такой *адиабатической модели* являются не переходы между уровнями спиновой системы, которые дают малый вклад, сравнимый с вкладом в диссипацию энергии, а случайная модуляция резонансных частот $\Delta\omega(t)$, которая приводит к *расфазировке* состояний отдельных кубитов в ансамбле за счет случайных сдвигов фазы $\varphi(t) = \int_0^t \Delta\omega(t)dt$ (*фазовые шумы*).

$$\varphi(t) = \int_0^t \Delta\omega(t)dt \quad (\text{фазовые шумы}).$$

Подставляя выражение для матрицы плотности спиновой системы в форме

$$\rho(t) = 1/2 (\mathbf{1} + \mathbf{P}(t) \boldsymbol{\sigma}) = 1/2 (\mathbf{1} + P_z(t) \sigma_z + P_+(t)\sigma_+ + P_-(t)\sigma_-), \quad (1.154)$$

в уравнение фон Неймана с гамильтонианом (1.153), для составляющих вектора Блоха получим простые уравнения:

$$dP_z(t)/dt = 0, \quad dP_{\pm}(t)/dt = \mp i(\omega_0 t + \Delta\omega(t))P_{\pm}(t), \quad (1.155)$$

из которых следуют точные решения

$$P_z(t) = P_z(0), \quad P_{\pm}(t) = \exp\left(\mp i\omega_0 t \mp i \int_0^t \Delta\omega(t)dt\right) P_{\pm}(0). \quad (1.156)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \rho \bullet (t) \rangle &= 1/2 (\mathbf{1} + P_z(0) \sigma_z + \\ &+ P_+(0) \langle \exp(-i\varphi(t)) \rangle \sigma_+ + P_-(0) \langle \exp(i\varphi(t)) \rangle \sigma_-). \end{aligned} \quad (1.157)$$

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

$$\langle \exp(\mp i(\omega_0 t + \varphi(t))) \rangle = \exp(\mp i\omega_0 t - \langle \varphi^2(t) \rangle / 2) = \exp(\mp i\omega_0 t - \Gamma(t)), \quad (1.158)$$

где декремент декогерентизации

$$\Gamma(t) = \int_0^t (t - \tau) f(\tau) d\tau, \quad (1.160)$$

$f(\tau) = \langle \Delta\omega(\tau)\Delta\omega(0) \rangle$ — затухающая с характерным временем $\tau_c \sim \int_0^{\infty} f(\tau) / \langle \Delta\omega^2 \rangle d\tau$ функ-

ция корреляции для стационарного случайного процесса частотной модуляции, являющаяся функцией памяти в рассматриваемом случае, $\langle \Delta\omega^2(0) \rangle \equiv \langle \Delta\omega^2 \rangle$ — интенсивность этого про-

цесса 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 и номера кубита в ансамбле и выполняется условие эргодичности, то усреднение по временному распределению (1.158) будет удобно заменить усреднением по ансамблю кубитов.

Для поперечной составляющей вектора Блоха $P_-(t)$ в рассматриваемом случае получим

$$\frac{dP_-(t)}{dt} - i\omega_0 P_-(t) + \int_0^t f(\tau) d\tau P_-(t) = 0, \quad d\Gamma/dt = \int_0^t f(\tau) d\tau. \quad (1.161)$$

Как легко видеть, выражение (1.109) на временных масштабах $\tau < \tau_c < t$ практически совпадает с уравнением (1.17), поскольку с точностью до второго порядка малости относительно $\Delta\omega(\tau)$ $P_-(t) \approx \exp(i\omega_0\tau)P_-(t-\tau)$. Рассматриваемая модель будет соответствовать полностью марковским случайным процессам в случае $\delta(\tau)$ —образной зависимости функции $f(\tau)$ от времени, то есть при $\tau_c \ll t$.

Таким образом, расфазировка приводит к экспоненциальному затуханию вначале заданной когерентности, описываемой поперечными составляющими Блоха $P_{\pm}(t)$. Соответствующая точность воспроизведения когерентного состояния $F(t)$ теперь определяется:

$$F(t) = \text{Spr}(t)\rho(0) = \\ = 1/2(1 + P_z(0)^2 + (P_x(0)^2 + P_y(0)^2)\exp(-\Gamma(t))). \quad (1.162)$$

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

Независимо от того используется модель декогерентизации, описываемая уравнением (1.17) или (1.161), определение значений характерных времен декогерентизации зависит от вида функции памяти $f(\tau)$ и, вообще говоря, не сводится к вычислению вероятности распада когерентного состояния по простому «золотому правилу».

Выражение (1.160) 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 $\exp(-\Gamma(t)) = \exp(-tT_1^{-1})$, где $T_1^{-1} = \langle\Delta\omega^2\rangle\tau_c$ — скорость декогерентизации кубита. Это означает, что при условии «*сильного сужения*» быстрые флуктуации приводят к *существенному усреднению полей и к замедлению декогерентизации* квантовых состояний. Мы имеем случай однородной декогерентизации. 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].

В противоположном случае «*жесткой решетки*» $\tau_c^2 \langle \Delta\omega^2 \rangle \gg 1$ (неоднородное уширение резонансной линии или предельный немарковский случай) выражение (1.108) сводится к $\exp(-\Gamma(t)) = \exp(-\langle \Delta\omega^2 \rangle t^2 / 2)$. В этом случае эффективная скорость декогерентизации увеличивается до $\langle \Delta\omega^2 \rangle^{1/2} \approx 1/T_D \gg T_\perp^{-1}$. Она определяется случайным статическим разбросом резонансных частот. Для подавления декогерентизации в этом случае могут быть использованы методы ЯМР спектроскопии высокого разрешения [1.43, 1.44].

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 сложных системах, когда время декогерентизации оказывается самым маленьким из всех других характерных времен и в частности в сравнении с временами, характеризующими динамику окружения [1.45], что соответствует рассмотренному нашему случаю «*жесткой решетки*».

1.11.2. Адиабатическая декогерентизация в многокубитовом ансамбле.

Полуклассическая модель может быть распространена и на многокубитовые квантовые состояния.

Рассмотрим сначала в качестве примера случай *адиабатической декогерентизации чистого триплетного запутанного двухкубитового состояния* с нулевой проекцией полного спина на ось z $|1, 0\rangle = \sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ (раздел 1.4), матрица плотности которого имеет вид

$$\rho(1, 0) = |1, 0\rangle\langle 1, 0| = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (1.163)$$

Влияние окружения, включающего и состояния остальной части антиферромагнетики часть, будем описывать *квазиклассически* как проявление коррелированных случайных сдвигов резонансных частот кубитов $\Delta\omega_{1,2}(t)$, образующих рассматриваемое запутанное состояние, и соответствующих случайных фаз и случайной модуляции параметра продольного спин-спинового взаимодействия $\Delta\omega_1(t) = I_1(t)/2$. Процессы декогерентизации, сопровождаемые переворачиванием ядерных спинов в адиабатическом приближении не учитываются.

Секулярную часть гамильтониана взаимодействия с окружением представим в виде

$$\mathbf{H} = -(\omega_0 + \Delta\omega_1(t))(\sigma_{1z} \otimes 1) / 2 - (\omega_0 + \Delta\omega_2(t))(1 \otimes \sigma_{2z}) / 2 + \Delta\omega(t)(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}) / 2. \quad (1.164)$$

Во вращающейся с резонансной частотой ω_0 системе координат динамика матрицы плотности (1.163) под действием случайного поля будет описываться выражением

$$\rho(1,0,t) = \mathbf{U}(t)^{-1} \rho(1,0)\mathbf{U}(t) , \quad (1.165)$$

где $\varphi_{1,2}(t) = \int_0^t \Delta\omega_{1,2}(t)dt$ и матрица унитарного преобразования 4×4 имеет вид (аргумент t

у $\varphi_{1,2}(t)$ далее опущен)

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(t) &= (\exp(i\varphi_1\sigma_{1z}/2) \otimes \exp(i\varphi_2\sigma_{2z}/2)) \cdot \exp(-i\varphi_1(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z})) = \\ &= ((\cos(\varphi_1/2)\mathbf{1} + i\sin(\varphi_1/2)\sigma_{1z}) \otimes (\cos(\varphi_2/2)\mathbf{1} + i\sin(\varphi_2/2)\sigma_{2z})) \cdot \\ &\quad \cdot (\cos\varphi_1(\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) + i\sin\varphi_1(\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z})) = \\ &= \begin{pmatrix} \exp(i(\varphi_1 + \varphi_2)/2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(i(\varphi_1 - \varphi_2)/2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-i(\varphi_1 - \varphi_2)/2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(-i(\varphi_1 + \varphi_2)/2) \end{pmatrix} \cdot \\ &\quad \cdot \begin{pmatrix} \exp(i\varphi_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(-i\varphi_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-i\varphi_1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(i\varphi_1) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.166)$$

Используя (1.165) для возмущенной матрицы плотности (1.163) получим

$$\rho(1,0,t) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \exp(-i(\varphi_1 - \varphi_2)) & 0 \\ 0 & \exp(i(\varphi_1 - \varphi_2)) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (1.167)$$

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

Предположим далее, что случайные фазы $\varphi_{1,2}(t)$ имеют средние значения $\langle \varphi_{1,2}(t) \rangle = 0$ и принадлежат к приведенному статистическому ансамблю, описываемому *двухмерным гауссовским распределением*, которое учитывает наличие корреляции между ними (глава 1 в книге [1.40]):

$$\begin{aligned} w(\varphi_1(t), \varphi_2(t)) &= \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma_1(t)\sigma_2(t)\sqrt{1-\rho_{12}^2(t)}} \exp\left[-\frac{1}{2(1-\rho_{12}^2(t))} \left(\frac{\varphi_1^2(t)}{\sigma_1^2(t)} - \frac{2\rho_{12}(t)\varphi_1(t)\varphi_2(t)}{\sigma_1(t)\sigma_2(t)} + \frac{\varphi_2^2(t)}{\sigma_2^2(t)} \right)\right], \end{aligned} \quad (1.168)$$

с среднеквадратичными значениями случайных фаз при стационарных флуктуациях сдвигов частот

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

и с нормированными **функции взаимной корреляции** случайных фаз

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

где

$$f_{1,2}(\tau) = \langle \Delta \omega_{1,2}(\tau) \Delta \omega_{1,2}(0) \rangle, \quad f_{12}(\tau) = \langle \Delta \omega_1(\tau) \Delta \omega_2(0) \rangle. \quad (1.169)$$

Усредняя с помощью распределения (1.168) возмущенную матрицу плотности (1.167) по статистическому ансамблю, получим

$$\langle \rho(1,0,t) \rangle = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \exp(-\Gamma(t)) & 0 \\ 0 & \exp(-\Gamma(t)) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (1.170)$$

где

$$\begin{aligned} \exp(-\Gamma(t)) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi_2 w(\varphi_1, \varphi_2) \exp(\pm i(\varphi_1 - \varphi_2)) = \\ &= \exp\{-(\sigma_1^2(t) - 2\sigma_1(t)\sigma_2(t)\rho_{12}(t) + \sigma_2^2(t))/2\} = \exp\left(-\int_0^t (t-\tau)(f_1(\tau) - 2f_{12}(\tau) + f_2(\tau))d\tau\right). \end{aligned} \quad (1.171)$$

Функция взаимной корреляции случайных фаз может принимать значения в интервале

$$0 \leq \rho_{12}(t) \leq 1. \quad (1.172)$$

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

$$\Gamma(t) = (\sigma_1^2(t) + \sigma_2^2(t))/2 = \int_0^t (t-\tau)(f_1(\tau) + f_2(\tau))d\tau = 2\Gamma_1(t), \quad (1.173)$$

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. Мы видим здесь, что декогерентизация состояний системы взаимодействующих кубитов существенно отличается от декогерентизации состояния отдельного кубита.

Таким образом, при полностью коррелированном воздействии, когда кубиты взаимодействуют с одной и той же адиабатической модой флуктуационных полей (пример так назы-

ваемой сильной декогерентизации), когерентность двух указанных двухкубитовых состояний не нарушается и они могут рассматриваться в качестве базиса *подпространства свободного от декогерентизации* (decoherence-free subspace –DFS). Эти два состояния могут быть выбраны при отмеченных выше условиях в качестве свободных от декогерентизации состояний логических кубитов.

Адиабатическая декогерентизация двух других когерентных состояний Белла двухкубитовой системы $(1/2)^{1/2}(|1, +1\rangle \pm |1, -1\rangle)$ при полностью коррелированном воздействии случайных полей $\rho_{12}(t) = 1$, как легко видеть, теперь не исчезает, а 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 когерентного запутанного состояния квантового регистра из L кубитов, например, типа суперпозиции L -кубитового состояния "шредингеровского кота"

$$|\psi\rangle = \sqrt{1/2}(|0_{L-1}, 0_{L-2}, \dots, 0_0\rangle + |1_{L-1}, 1_{L-2}, \dots, 1_0\rangle), \quad (1.174)$$

усредненная по гауссовскому распределению случайных фаз матрица плотности в предположении однородных *некоррелированных* фазовых шумов в укрупненном базисе блоков $|0_{L-1}, 0_{L-2}, \dots, 0_0\rangle, |1_{L-1}, 1_{L-2}, \dots, 1_0\rangle$ имеет вид

$$\langle \rho(t, L) \rangle = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & \exp(-L\Gamma_1(t)) \\ \exp(-L\Gamma_1(t)) & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.175)$$

Таким образом, многокубитовые когерентные запутанные состояния типа "кота" декогерентизируются с эффективным декрементом $L\Gamma_1(t)$. В случае *полностью коррелированных* флуктуаций фаз скорость декогерентизации оказывается пропорциональной L^2 . Заметим, что для состояний, в которых блоки недиагональных матричных элементов матрицы плотности имеют размерность $< L$, эффективная скорость декогерентизации в зависимости коррелированности флуктуаций будет пропорциональна этой размерности или ее квадрату.

Заключение: Рассмотренная полуклассическая модель адиабатической декогерентизации может соответствовать большому набору *различных случайных процессов*. В частности, это могут быть марковские и немарковские, случайные стационарные и нестационарные процессы. Роль случайных воздействий могут играть также определенные последовательности резонансных импульсов. В этом смысле полуклассический подход обладает *определенной общностью и широтой*. Он позволяет исследовать процессы адиабатической декогерентизации и в многокубитовых системах. Ограниченность его состоит в том, что он *не вскрывает конкретные микроскопических механизмов взаимодействия спиновой системы с окружением*.

1.12. 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 квантовую 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

$$\mathbf{H}_{IS} = \sum_{i,\alpha\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) I_{\alpha} S_{\beta}(\mathbf{r}_i, t), \quad (1.176)$$

где

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\gamma_I \gamma_S \hbar}{r_i^3} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{3r_{i\alpha} r_{i\beta}}{r_i^2} \right), \quad (1.177)$$

$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-1} \text{ Тл}^2 \text{ см}^3 / \text{Дж}$, \mathbf{r}_i — радиус-вектор расстояния от ядерного спина до i -го электронного спина, $\gamma_S \hbar S_{\beta}(\mathbf{r}_i, t)$ — флуктуирующий из-за взаимодействия с другими электронными спиновыми магнитными моментами примесных атомов, создающий локальное флуктуирующее поле

$$\Delta B_{\alpha}(t) = - \sum_{i,\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) (S_{\beta}(\mathbf{r}_i, t) - \langle S_{\beta}(\mathbf{r}_i) \rangle) / \gamma_I, \quad (1.178)$$

где угловые скобки обозначают ансамблевое усреднение по спиновым состояниям магнитных моментов окружающих примесных атомов.

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, играющими роль времен корреляции случайных полей.

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

$$\Delta\omega(t) = \gamma_I \Delta B_z(t) = \sum_{i=1,\beta}^Z D_{z\beta}(r_i) (S_{\beta}(r_i, t) - \langle S_{\beta}(\mathbf{r}_i) \rangle) \quad (1.179)$$

будет определяться выражением

$$\langle \Delta\omega(\tau) \Delta\omega(0) \rangle = C_S \int \sum_{\beta} D_{z\beta}^2(\mathbf{r}) (\langle S_{\beta}(\mathbf{r}, \tau) S_{\beta}(\mathbf{r}, 0) \rangle - \langle S_{\beta}(\mathbf{r}) \rangle^2) d\mathbf{r}, \quad (1.180)$$

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

Выражение для функции памяти при произвольных соотношениях этих параметров для диполь-дипольного взаимодействия ядерных спинов со спинами электронов было получено нами в [1.30, 1.46]. В рассматриваемом случае адиабатической декогерентизации, когда $\omega_s \tau_2 \gg 1$, она принимает вид

$$f(\tau) = \langle \Delta\omega(\tau)\Delta\omega(0) \rangle = \langle \Delta\omega^2 \rangle \exp(-t/\tau_1), \quad (1.181)$$

где

$$\langle \Delta\omega^2 \rangle = C_s \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_1 \gamma_s \hbar \right)^2 \frac{16\pi}{15a^3} (\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2), \quad (1.182)$$

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

$$\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2 = (1 - \text{th}^2(\omega_s/T))/4. \quad (1.183)$$

В случае почти полной поляризации электронных спинов, когда $\omega_s/T \gg 1$ будем иметь

$$\langle \Delta\omega^2 \rangle \approx C_s \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_1 \gamma_s \hbar \right)^2 \frac{16\pi}{15a^3} \exp(-(\omega_s/T)). \quad (1.184)$$

В результате найдем

$$\Gamma(t) = \int_0^t (t-\tau) \langle \Delta\omega(\tau)\Delta\omega(0) \rangle d\tau = \langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1^2 (t/\tau_1 - 1 + \exp(-t/\tau_1)). \quad (1.185)$$

Мультиплетная сверхтонкая структура, обусловленной 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, и мы получим $\Gamma(t) = \langle \Delta\omega^2 \rangle t^2 / 2 \equiv t^2 / 2T_{\perp}^{*2}$, где T_{\perp}^* 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 $\Gamma(t) = t/T_{\perp} = t \langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1$. Ядерный спин «чувствует» единое, усредненное по мультиплетной структуре быстро флуктуирующее поле, создаваемое магнитными моментами окружающих примесных атомов. В этом случае для времени *однородной декогерентизации* будем иметь

$$T_{\perp} = (\langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1)^{-1} \approx \langle \Delta\omega^2 \rangle \tau_1^2)^{-1/2} T_{\perp}^* \gg T_{\perp}^*. \quad (1.186)$$

Следовательно, увеличения времени декогерентизации T_{\perp} можно добиться уменьшая как интенсивность взаимодействия с электронными спинами (уменьшая их концентрацию), так и уменьшением времени продольной релаксации электронных спинов. Если в случае больших времен продольной релаксации ядерных спинов (твердые тела при низких температу-

рах) потребовать тех же значений и для времени декогерентизации состояний ядерных спинов, то для второго момента функции распределения случайных частот получим условие $\langle \Delta\omega^2 \rangle \ll \tau_1^{-2}$. Конкретные численные оценки приведены в Главе II.

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: Взаимодействие с электронными магнитными моментами примесных атомов является одним их существенных механизмов декогерентизации квантовых состояний ядерных спинов.

Показано, что время 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. Подавления декогерентизации состояний ядерных спинов можно добиться уменьшая как концентрацию случайно распределенных электронных спинов, так и время корреляции случайных полей (время продольной релаксации электронных спинов).

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

Многокубитовое *квантовое дискретное фурье-преобразование* (quantum Fourier transform QFT_N) 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 $\sum_{x=0}^{N-1} f(x) |x\rangle$, где x — двоичное представление целых чисел, нумерующих базисные состояния

регистра на шкале «пространственных координат» x и изменяющихся от нуля до $N - 1 = 2^L - 1$, в состояние $\sum_{k=0}^{N-1} \varphi(k) |k\rangle$, где k пробегает те же значения, но на шкале «пространственных частот»:

$$\text{QFT}_N: \sum_{x=0}^{N-1} f(x) |x\rangle \rightarrow \sum_{k=0}^{N-1} \varphi(k) |k\rangle. \quad (1.187)$$

Амплитуда фурье-преобразования $\varphi(k)$ определяется выражением

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} \exp(2i\pi kx/N) f(x), \quad (1.188)$$

Минимальный шаг, с которым дискретные значения x располагаются на x -шкале, соответствующий элементарной *информационной ячейке* равен единице. В двумерной

x - k - плоскости минимальной информационной ячейке соответствует прямоугольник площадью N (Рис. 1.8). Состояние квантового регистра в каждой информационной ячейке этой шкалы максимально локализовано, и не зависит от значений по шкале k .

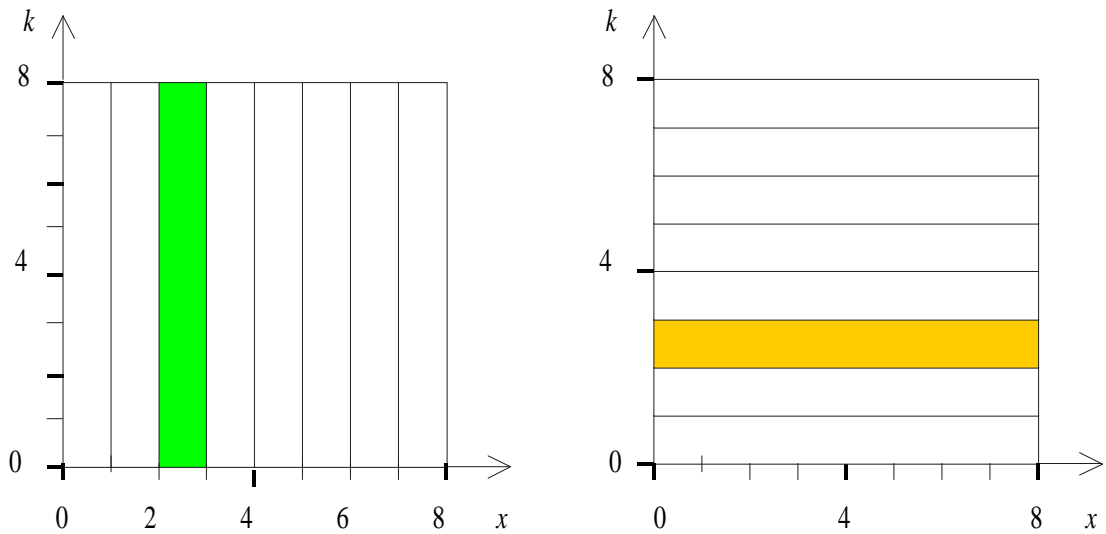


Рис. 1.8. Информационные ячейки для состояний 3-кубитового квантового регистра, локализованные на x - и k - шкалах.

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

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

Квантовое фурье-преобразование может быть построено с помощью двух основных операторов. Это однокубитовый оператор Адамара \mathbf{H}_j , действующий на j -ый кубит и двухкубитовый оператор контролируемого изменения фазы \mathbf{V}_{jk} , зависящий только от относительной фазы состояний $|1\rangle$ j -го и k -го кубитов, независимо от состояния других кубитов [1.15, 1.47] (см. Приложение П2).

Произведем над состоянием регистра $|x\rangle$ определенную последовательность операций, каждый шаг которой будем отмечать индексом j . В качестве *первого шага* положим $j = L - 1$ и подействуем оператором \mathbf{H}_{L-1} на первый кубит регистра x_{L-1} , что эквивалентно действию оператора $\mathbf{H}_{L-1} \otimes \mathbf{1}_{L-2} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_0$ на состояние всего регистра $|x\rangle$.

Далее на *втором шаге* положим $j = L - 2$ и подействуем произведением операторов $\mathbf{V}_{L-2,L-1}(\mathbf{1}_{L-1} \otimes \mathbf{H}_{L-2})$ на состояния двух кубитов x_{L-1} и x_{L-2} (здесь операторы действуют по направлению оси времени в порядке слева направо, что отмечено $|\rightarrow$). Продолжая далее таким образом на очередном j -ом шаге получим операцию $\mathbf{V}_{j+1} \mathbf{V}_{j+2} \dots \mathbf{V}_{jL-1} \mathbf{H}_j$. Когда будет достигнуто значение $j = 0$, этот шаг заканчивается операцией \mathbf{H}_0 . В результате полное унитарное преобразование представляется как последовательность элементарных шагов 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 $|x\rangle = |x_1, x_0\rangle$: $|\uparrow_1\uparrow_0\rangle, |\uparrow_1\downarrow_0\rangle, |\downarrow_1\uparrow_0\rangle, |\downarrow_1\downarrow_0\rangle$ следующего вида $\mathbf{U}_4 = (\mathbf{H}_1 \otimes \mathbf{1}_0) \mathbf{V}_{0,1} (\mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{H}_0) |\rightarrow$ и перейдем к обычной для умножаемых операторов-матриц последовательности действующих справа налево (отмечено знаком $|\leftarrow$):

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_4 &= (\mathbf{H}_1 \otimes \mathbf{1}_0) \mathbf{V}_{0,1} (\mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{H}_0) |\rightarrow = (\mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{H}_0) \mathbf{V}_{0,1} (\mathbf{H}_1 \otimes \mathbf{1}_0) |\leftarrow = \\ &= 1/2 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & i & -i \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -i & i \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.189)$$

В результате действия унитарной операции (1.189) четырехмерное состояние $|x\rangle$ 2-х кубитового регистра преобразуется в четырехмерную линейную суперпозицию $|c\rangle$ состояний следующим образом

$$\mathbf{U}_4 |x\rangle = |c\rangle = \mathbf{U}_4 \begin{pmatrix} |00\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle \\ |00\rangle - |01\rangle + i|10\rangle - i|11\rangle \\ |00\rangle + |01\rangle - |10\rangle - |11\rangle \\ |00\rangle - |01\rangle - i|10\rangle + i|11\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \\ (|0\rangle + i|1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \\ (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \\ (|0\rangle - i|1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \end{pmatrix}, \quad (1.190)$$

то есть для $N = 2^L = 4$ (учитывая, что четыре вычислительных базисных состояния $\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow$ соответствуют в двоичном представлении числам $x, k = 0, 1, 2, 3$) получим:

$$|x\rangle \rightarrow 1/2 (|0\rangle + \exp(i\pi x/2) |1\rangle + \exp(i\pi x) |2\rangle + \exp(i\pi x 3/2) |3\rangle). \quad (1.191)$$

Подчеркнем существенное свойство квантового фурье-преобразования: как следует из (1.191) оно *не создает запутанных состояний*.

Из сравнения (1.188) и (1.191) теперь видно, что для получения квантового фурье-преобразования следует дополнительно перейти от состояния $|c\rangle$ в (1.191) к состоянию $|k\rangle$, отличающемуся от $|c\rangle$ обратным порядком расположения состояний кубитов в регистре: $\uparrow\uparrow \rightarrow \uparrow\uparrow$, $\uparrow\downarrow \rightarrow \downarrow\uparrow$, $\downarrow\uparrow \rightarrow \uparrow\downarrow$, $\downarrow\downarrow \rightarrow \downarrow\downarrow$. Такое преобразование производится с помощью еще одной унитарной операции обмена (**SWAP**) состояний двух кубитов: $|k\rangle = \text{SWAP} |c\rangle$. При этом квантовое состояние остается незапутанным.

Заметим, что эта процедура аналогична операции "инверсии порядка двоичных знаков" в классическом алгоритме быстрого дискретного фурье-преобразования Кули-Тьюки. В результате $\text{QFT}_4 = \text{SWAP} \cdot U_4$.

При $L = 4$ размерность гильбертова пространства $N = 2^4 = 16$ и для выполнения фурье-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 .

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 $\mathbf{B}_{j,k}$ в случае квантового фурье-преобразования необходимо осуществить поворот фазы на угол $\theta_{j,k} = \pi/2^{k-j}$, что требует длительности τ_{k-j} , пропорциональной $2^{-(k-j)}$, где $2^{-1} \leq 2^{-(k-j)} \leq 2^{-(L-1)}$. Число таких двухкубитовых операций контролируемого изменения фазы при выполнении квантового фурье-преобразования равно $L(L - 1)/2$. 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 фурье-преобразования хотя и будет более сильной, чем $\sim L$, но более слабой, чем $\sim L^2$ [1.48].

Использование приближенного квантового фурье-преобразования, в котором уменьшается число операций контролируемого фазового сдвига до величины, определяемой требованием точности [1.49], также может частично решить проблему временной цены квантового фурье-преобразования.

Заключение: Отмечается, что квантовое фурье-преобразование на многокубитовом регистре требует *полиномиальное число квантовых операций* ($\sim L^2$) в отличие от быстрого классического преобразования Кули-Тьюки, требующего $2^L L$ операций. Однако при реализации фурье-преобразования на ЯМР квантовых компьютерах, если не ограничивать длительность элементарной операции, экспоненциально по отношению к числу кубитов *растет временная цена* преобразования.

1.14. Алгоритм факторизации Шора на основе квантового фурье-преобразования

Алгоритм факторизации Шора состоит в определении простых множителей p и q для заданного целого числа $M = p \cdot q$ путем использования квантовой схемы 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), и 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 период по x $r = 4$ и удовлетворяет уравнению $2^r \equiv 1 \bmod 15$ (в общем случае $a^r \equiv 1 \bmod M$, а параметр r называется порядком функции $a \bmod M$, когда $a < M$, он не имеет общих делителей с M).

Теперь, когда период r известен, множители числа M , с помощью *алгоритма Евклида*, определяются 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 около $\log_2 M$ бит информации.

Вычислительная схема для выполнения квантового алгоритма Шора ([1.47, 1.50]) использует два квантовых регистра X и Y . Каждый из них в начальный момент находится в инициализированном состоянии $|0\rangle = |\uparrow_{L-1}, \uparrow_{L-2}, \dots, \uparrow_0\rangle$. 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 достаточно большим, чтобы поместить значения функции $y_M(x)$, охватывающие достаточное число предполагаемых полных периодов. Для этого необходимо, чтобы число состояний регистра $N = 2^L \geq M^2 \gg r^2$.

На *первом* этапе алгоритма Шора инициализированное исходное состояние $|0\rangle$ регистра X переводится с помощью L -кубитовой операции Уолша-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 $|x\rangle = |x_{L-1}, x_{L-2}, \dots, x_0\rangle$. При этом второй регистр остается в состоянии $|0\rangle$. В результате для системы двух регистров получаем незапутанное состояние

$$|\Phi[x,0]\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x,0\rangle. \quad (1.192)$$

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 *состояниями обоих регистров* становятся определенным образом *запутанными*. Например, в случае $M = 15$ она имеет вид:

$$|\Phi[x, y_M(x)]\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes |y_M(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |2\rangle + |2\rangle \otimes |4\rangle + \\ + |3\rangle \otimes |8\rangle + |4\rangle \otimes |1\rangle + |5\rangle \otimes |2\rangle + |6\rangle \otimes |4\rangle + \dots + |N-1\rangle \otimes |2^{N-1} \bmod 15\rangle), \quad (1.193).$$

откуда следует, что последовательность значений функций $y_{15}(x)$ имеет на шкале x период $r = 4$ и каждому фиксированному состоянию второго регистра соответствует последовательности 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 $r = 4$:

$$|\Phi[x,4]\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} (|2\rangle + |6\rangle + |10\rangle + \dots + |4A+l\rangle) \otimes |4\rangle = \\ = \frac{1}{\sqrt{A+1}} \sum_{j=0}^A |rj+l\rangle \otimes |4\rangle = \sum_{x=0}^N f(x) |x\rangle \otimes |4\rangle, \quad (1.194)$$

где введена квазипериодическая функция

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{A+1}} \sum_{j=0}^A \delta_{x, rj+l}, \quad (1.195)$$

$0 \leq l \leq r < M$, $A = [N/r - 1]$ (целая часть). В рассматриваемом случае $l = 2$ — начальное значение x в (1.194), определяемое выбором фиксированного значения $|4\rangle$.

Состояние (1.194) является однородной некогерентной 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 (1.187) (далее для простоты предположим, что N точно делится на r , так что $A = N/r - 1$):

$$\mathbf{QFT}_N: \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^A |rj+l\rangle \rightarrow \sum_{k=0}^{N-1} \varphi_l(k) |k\rangle, \quad (1.196)$$

где

$$\varphi_l(k) = \sqrt{1/N} \sum_{x=0}^{N-1} \exp(2ki\pi x/N) f(x) = \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^A \exp \frac{2\pi i(jr+l)k}{N}. \quad (1.197)$$

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

$$p(k) = |\varphi_l(k)|^2 = (r/N^2) \left| \sum_{j=0}^A \exp(2\pi i j(rk \bmod N)/N) \right|^2. \quad (1.198)$$

Учитывая, что основной вклад в (1.197) дают слагаемые, у которых rk/N близко к целому числу, точнее

$$-r/2 \leq rk \bmod N \leq r/2, \quad (1.199)$$

то в случае малых значениях r/N для каждого значения r , которое удовлетворяет (1.199), можно получить оценку для вероятности в этом случае [1.47]:

$$p(k) \geq 4/(\pi^2 r). \quad (1.200)$$

Из (1.200) 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 (1.194) преобразуется в равновероятную суперпозицию (1.197) с периодом N/r .

Измерение вероятности состояния (1.198) позволяет далее 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 неприводимому виду, то есть к виду, когда числитель и знаменатель не имеют других общих наибольших делителей, кроме единицы. После этого с помощью алгоритма Евклида находятся и 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. Реально для извлечения периода из фурье-преобразования следует произвести еще ряд дополнительных вычислительных операций, например, произвести 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.

Разложения 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 классические более сложные алгоритмы факторизации, такие как RSA-алгоритм, который позволил уменьшить число необходимых операций до $\sim \exp(\text{const } L^{1/3}(\log_2 L)^{2/3})$, что еще не достаточно полно решало проблемы факторизации, которая стала приобретать важное значение в связи с разработкой систем секретного обмена сообщениями по открытому каналу связи с открытым ключом (методы криптографии).

Заключение: Отмечается, что в случае алгоритма Шора, использующего квантовое дискретное фурье-преобразование, полное число операций *степенным образом* зависит от L полиномиально ($\sim L^3$), то есть имеет место экспоненциальный выигрыш по сравнению с классическими методами. Однако, эта зависимость *не учитывает влияния паразитного взаимодействия между кубитами*, которое приводит к некоторой дополнительной деградации квантовых вычислительных процессов с ростом L [1.51]. Наиболее существенным однако является на наш взгляд, уже отмечавшийся выше, вопрос о *временной цене реализации* алгоритма Шора при работе на ЯМР квантовых компьютерах.

1.15. Квантовое вейвлет-преобразование в алгоритме факторизации

В качестве способа решения проблемы временной цены в ЯМР квантовых компьютерах мы предлагаем *использовать вместо* квантового дискретного фурье-преобразования *квантовое вейвлет-преобразование* (quantum wavelet-transform) [1.15], которое является унитарным преобразованием от представления состояния квантового регистра в «пространственной» шкале $|x\rangle$ к некоторому другому двухпараметрическому представлению, определяемому системой базисных вейвлет-функций (вейвлетов).

Начнем с рассмотрения вейвлет-преобразования для квадратично интегрируемой на интервале $[0, N]$ непрерывной функции $f(x)$, амплитуды которого определяются выражением [1.52]

$$w_n(m) = \int_0^N \psi_n(x, m) f(x) dx, \quad (1.201)$$

где $\psi_n(x, m)$ — базисные функции-вейвлеты, заменяющие функции $\exp(2\pi i x k/N)$ в фурье-преобразовании и отображающие функцию $f(x)$ в отличие от фурье-преобразования не на одномерный массив дискретных параметров k , а на **двухмерный массив** параметров n, m .

Вейвлет-преобразование становится обратимым, в частности, при определенном условии ограничивающим вид «**материнской функции**» функции $\psi(x) \equiv \psi_0(x, 0)$:

$$\int_0^N |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (1.202)$$

Совокупность «**дочерних**» базисных функций представляется в следующем виде

$$\psi_n(x, m) = 2^{n/2} \psi(2^n x - m) \quad (1.203)$$

и образуют **полную ортонормированную** систему, то есть

$$\int_0^N \psi_n(x, m) \psi_{n'}^*(x, m') dx = \delta_{nn'} \delta_{mm'}. \quad (1.204)$$

Поэтому они могут быть базисом для квантовых состояний.

В выражении (1.203) роль «пространственных частот» k играют теперь параметры $N2^n$. С увеличением параметра n в 2^n раза уменьшается масштаб или увеличивается **разрешение** функции $\psi_n(x, m)$ по шкале x в сравнении с разрешением материнской функции $\psi(x)$ и, кроме того, происходит сдвиг вейвлета на $2^{-n}m$. Роль «пространственных» координат переходит к параметру $2^{-n}m$.

Существует много типов вейвлетов с различным характером локализации. Наиболее интересные из них удовлетворяют **условию компактности**, то есть они равны нулю вне некоторого конечного интервала длины.

Простейшим преобразованием является **преобразование Хаара**, некоторым недостатком которого является то, что хотя его базисные функции удовлетворяют условию компактности, но не удовлетворяют условию плавности и потому не достаточно хорошо локализованы на шкале пространственных частот [1.52]. Однако это преобразование позволяет наиболее просто перейти к дискретному вейвлит-преобразованию и наглядно продемонстрировать его особенности и преимущества.

Рассмотрим физический смысл преобразований (некоторые подробности общего характера можно найти также в нашей книге [1.15], там и ссылки на другие работы).

Материнская вейвлет-функция Хаара задается на интервале разрешения $[0, 1]$ и равна нулю в остальной области (Рис. 1.9), а именно:

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x < 1/2 \\ -1 & 1/2 \leq x < 1 \end{cases} . \quad (1.205)$$

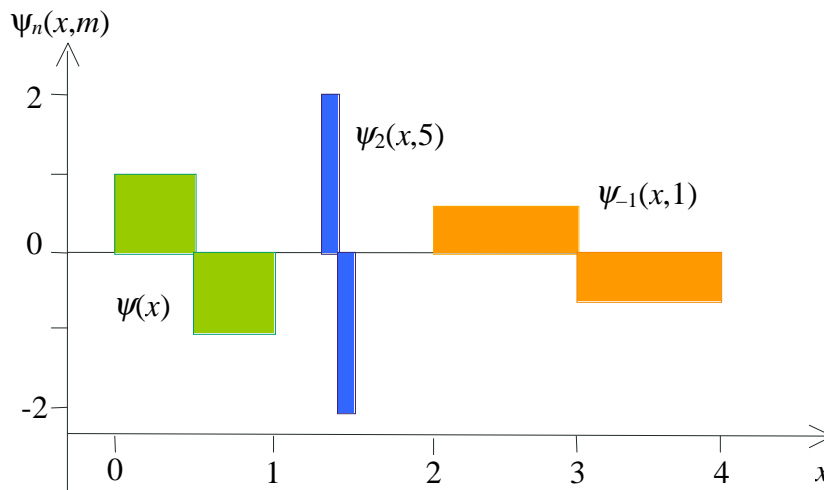


Рис. 1.9. Примеры базисных вейвлет-функций Хаара: «материнская» и две «дочерних».

Она служит для построения соответствующей **дочерней функции**:

$$\psi_n(x, m) = 2^{n/2} \psi(2^n x - m) = \begin{cases} 2^{n/2} & m2^{-n} \leq x < (m+1/2)2^{-n} \\ -2^{n/2} & (m+1/2)2^{-n} \leq x < (m+1)2^{-n} \end{cases} . \quad (1.206)$$

Как видно из (1.206), параметры m и n лежат в конечных интервалах:

$$0 \leq m \leq N2^n - 1, \quad -L = -\log_2 N \leq n \leq 0 . \quad (1.207)$$

Таким образом, для заданного значения L наиболее высокое разрешение оказывается у материнской функции ($n = 0$).

Базисные дочерние вейвлет-функции Хаара расщепляются на две кусочно-постоянных области разного знака, имеющими в 2^n раза более высокий уровень разрешения по шкале x , определяемый параметром n . С увеличением числа кубитов в регистре увеличивается диапазон значений параметров n и, соответственно, число дочерних вейвлет-функций. При $L = 3$, $N = 8$ будем иметь $n = 0, -1, -2, -3$, $m = 0, 1, 2, \dots, 7$.

Соответственно, амплитуда вейвлет-преобразования Хаара (**вейвлет-амплитуды**) представляется в виде двух слагаемых

$$w_n(m) = \int_0^N \psi_n(x, m) f(x) dx = \sqrt{1/2} (f_{n+1}(2m) - f_{n+1}(2m+1)) , \quad (1.208)$$

где функции четных и нечетных аргументов

$$f_{n+1}(2m) = 2^{n/2} \int_{m2^{-n/2}}^{(m+1/2)2^{-n/2}} f(x) dx = 2^{(n+1)/2} \int_{2m2^{-(n+1)/2}}^{(2m+1)2^{-(n+1)/2}} f(x) dx ,$$

$$f_{n+1}(2m+1) = 2^{n/2} \int_{(m+1/2)2^{-n/2}}^{(m+1)2^{-n/2}} f(x) dx = 2^{(n+1)/2} \int_{(2m+1)2^{-(n+1)/2}}^{(2m+2)2^{-(n+1)/2}} f(x) dx \quad (1.209)$$

осуществляют *дискретное представление* непрерывной функции $f(x)$ для каждого заданного уровня разрешения вейвлета (параметр n), а именно:

$$f_n(m) = \sqrt{1/2} (f_{n+1}(2m) + f_{n+1}(2m+1)). \quad (1.210)$$

Каждое из этих слагаемых имеет смысл среднего значения функции $f(x)$ на интервалах удвоенной протяженности (параметр $n+1$) по сравнению с интервалом, в котором определен вейвлет.

Вектор исходного состояния квантового регистра для каждого масштаба разрешения n можно представить в виде суперпозиции:

$$|n\rangle = \sqrt{1/2} \sum_{m=0}^{N2^n-1} (f_{n+1}(2m) |2m\rangle + f_{n+1}(2m+1) |2m+1\rangle). \quad (1.211)$$

В результате при вейвлет-преобразовании x - k плоскость разбивается на одинаковые по площади (N) прямоугольные ячейки-диады с разным соотношением высоты и ширины, координаты которых задаются параметрами n и m . На Рис. 1.10 видно, что хорошему разрешению на шкале x соответствует информационные ячейки с плохим разрешением по шкале k ($N2^n$) и наоборот.

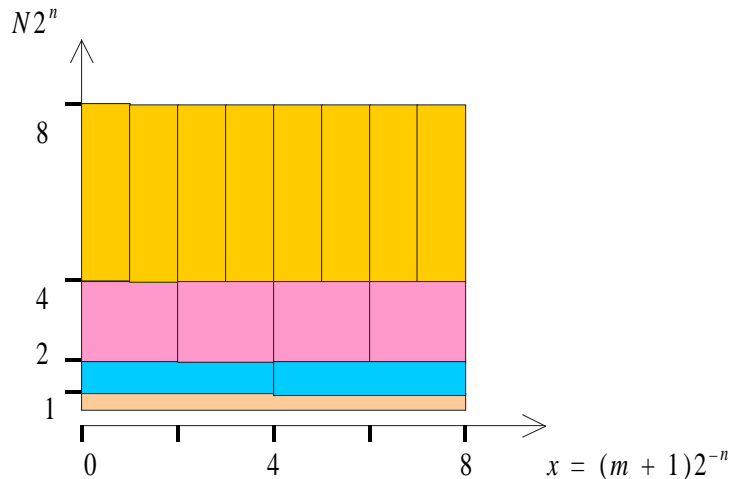


Рис. 1.10. Информационные ячейки при вейвлет-преобразовании для $L = 3$.

Возвратимся теперь к квазипериодической функции $f(x)$ (1.195), характеризующейся конечным числом равных по амплитуде отсчетов, отстоящих на расстояниях r друг от друга на шкале x ($x = jr + l$) для дискретных значений $x = 0, 1, \dots, N-1$. Для этого запишем ее, считая далее для простоты $N/r - 1$ целым числом и $l = 0$, в виде:

$$f(x) = \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^{N/r-1} \delta_{x,rj}, \quad (1.212)$$

Для вейвлет-амплитуды получим

$$w_n(m) = \int_0^N \psi_n(x, m) f(x) dx = \sqrt{1/2} (f_{n+1}(2m) - f_{n+1}(2m + 1)), \quad (1.213)$$

где

$$f_{n+1}(2m) = \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^{N/r-1} 2^{(n+1)/2} \delta_{jr, 2m2^{-(n+1)/2}}, \quad (1.214)$$

$$f_{n+1}(2m + 1) = \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^{N/r-1} 2^{(n+1)/2} \delta_{jr, (2m+1)2^{-(n+1)/2}}. \quad (1.215)$$

Формирование вейвлет-амплитуды можно осуществить с помощью квантового *однокубитового* ($L = 1, N = 2, m = 0, 1, n = 0, -1$) вейвлет-преобразования Хаара \mathbf{QWTH}_1 которое представляется *одним* оператором Адамара \mathbf{H} .

Произвольный исходный вектор состояния одного кубита для масштаба n имеет вид

$$|n\rangle = f_{n+1}(0)|0\rangle + f_{n+1}(1)|1\rangle = \begin{pmatrix} f_{n+1}(0) \\ f_{n+1}(1) \end{pmatrix}. \quad (1.216)$$

В результате преобразования получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{QWTH}_1 |n\rangle &= \mathbf{H} |n\rangle = \mathbf{H} \begin{pmatrix} f_{n+1}(0) \\ f_{n+1}(1) \end{pmatrix} = \sqrt{1/2} \begin{pmatrix} f_{n+1}(0) + f_{n+1}(1) \\ f_{n+1}(0) - f_{n+1}(1) \end{pmatrix} = \\ &= f_n(0)|0\rangle + w_n(0)|1\rangle, \end{aligned} \quad (1.217)$$

то есть суперпозицию однокубитовых состояний с амплитудой $f_n(0)$ и вейвлет-амплитудой $w_n(0)$.

Для *двухкубитового* преобразования ($L = 2, m = 0, 1, 2, 3, n = 0, -1, -2$) потребуется более сложная квантовая схема. В представлении двухкубитовых базисных состояний $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle$ и $|11\rangle$ оператор квантового вейвлет-преобразования принимает вид [1.53]:

$$\mathbf{QWTH}_2 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{vmatrix} \quad (1.218)$$

Двухкубитовая операция Хаара осуществляется тремя однокубитовыми операциями и одной двухкубитовой операцией, то есть всего *четырьмя* элементарными операциями.

Например, исходное двухкубитовое состояние

$$|n\rangle = f_{n+1}(0)|00\rangle + f_{n+1}(1)|01\rangle + f_{n+1}(2)|10\rangle + f_{n+1}(3)|11\rangle, \quad (1.219)$$

преобразуется следующим образом

$$\text{QWTH}_2 | n \rangle = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_{n+1}(0) \\ f_{n+1}(1) \\ f_{n+1}(2) \\ f_{n+1}(3) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} f_n(0) \\ w_n(1) \\ f_n(2) \\ w_n(3) \end{vmatrix}, \quad (1.220)$$

то есть для двухкубитового регистра при заданном уровне разрешения в результате вейвлет-преобразования мы получаем *две вейвлет-амплитуды*

$$w_n(0) = \sqrt{1/2} (f_{n+1}(0) - f_{n+1}(1)), \quad w_n(1) = \sqrt{1/2} (f_{n+1}(2) - f_{n+1}(3)). \quad (1.221)$$

Число элементарных квантовых операций, необходимых для реализации вейвлет-преобразования для всего диапазона уровней разрешения, определяется в основном числом кубитов L в квантовом регистре, и оказывается порядка L^2 [1.54], тогда как быстрое классическое вейвлет-преобразование потребовало бы порядка $L2^L$ операций [1.55]. Квантовые вейвлет-преобразования имеют ту же сложность, что и квантовые фурье-преобразования. Однако, преимущество квантовых вейвлет-преобразований появляется в тех случаях, когда можно ограничиться одним определенным диапазоном. В этом случае потребуется всего L операций [1.56].

Обратимся снова к алгоритму факторизации Шора, который основан на нахождении периода r определенным образом сформированных амплитуд состояния квантового регистра. Для этих целей используется квантовое дискретное фурье-преобразование, которое для регистра из L кубитов строится из L операторов Адамара \mathbf{H} и $L(L-1)/2$ операторов контролируемого изменения фазы $\mathbf{V}_{j,k}$, то есть требует $L(L+1)/2$ элементарных операций.

Амплитуда фурье-преобразования квазипериодической функции (1.197)

$$\varphi_l(k) = \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^{N/r-1} \exp\left(\frac{2\pi i r j k}{N}\right) \quad (1.222)$$

имеет конечное число равновероятных дискретных отсчетов на одномерной шкале k при $k = \nu N/r, \nu = 0, 1, \dots, r-1$.

Если искомый период $N > r \gg 1$, то есть не требует высокого разрешения по шкале x , то информацию о нем будут нести в основном фурье-амплитуды малыми значениями пространственных частот $1 < k \ll N$.

Существенным недостатком дискретного фурье-преобразования, как уже отмечалось выше, является то, что при его выполнении имеют место *излишние вычислительные затраты*, особенно при учете амплитуд с большими значениями k , которые обычно по разным причинам не достаточно четко известны, или имеют большую временную цену, связанную с выполнением операций контролируемого изменения фазы для состояний удаленных кубитов. Но при определении периода r как раз влияние этих амплитуд не играет определяющей

роли и поэтому фурье-преобразование, учитывающее в равной мере все амплитуды, представляется не вполне адекватным для задачи факторизации.

Для преодоления указанного недостатка мы предлагаем обратиться к рассмотрению вейвлет-преобразования [1.15]. Амплитуда вейвлет-преобразования Хаара квазипериодической функции $f(x)$ имеет вид

$$w_n(m) = \int_0^N \psi_n(x, m) f(x) dx = \sqrt{r/N} \sum_{j=0}^{N/r-1} 2^{n/2} \psi(2^n jr - m), \quad (1.223)$$

откуда следует, учитывая ортогональность вейвлет-функций, что вероятность $\overline{|w_n(m)|^2}$ получить для квантового регистра состояние $|n, m\rangle$

$$\overline{|w_n(m)|^2} = r/N \sum_{j=0}^{N/r-1} 2^n (\psi(2^n jr - m))^2, \quad (1.224)$$

где черта сверху обозначает усреднение по всевозможным результатам измерения состояния регистра для одних и тех же значений n, m и r .

Заметим, что при наличии достаточно большого ансамбля эквивалентных квантовых регистров и при выполнении условия эргодичности усреднение по времени эквивалентно усреднению по ансамблю.

При целочисленных значениях параметров n, r и m аргументы вейвлет-функции сохраняют дискретные значения, если $2^n = v/r$, где $v = 1, 2, \dots$, — набор целых чисел. В сумме (1.224) по j отличны от нуля только слагаемые, соответствующие тем целочисленным значениям $j = 0, 1, \dots, N/r - 1$, которые лежат в интервале $2^{-n}m/r \leq j < 2^{-n}(m + 1)/r$, то есть значениям $j = m/v$. Для произвольных значений v последнее соотношение выполняется только для *одного* слагаемого с $j = m = 0$. Оно также выполняется для части других слагаемых с $j \neq 0$, для значений v , которым кратен параметр m .

На Рис. 1.11. схематически изображены идеальные зависимости $|f(x)|^2$ и $2^{-n} \overline{|w_n(0)|^2}$ для регистра с $L = 3$ с «периодом» $r = 4$. Интенсивность вейвлет-амплитуд $w_n(0)$ экспоненциально уменьшаются с ростом отрицательных значений n , но при этом растет разрешение по шкале 2^n . По оси ординат вероятность получить вейвлет-амплитуды умножена на 2^{-n} для того чтобы компенсировать это уменьшение. В такой нормировке вероятности будут иметь *одинаковые* амплитуды.

Можно также рассматривать не отдельные вейвлет-амплитуды, а сумму по возможным значениям m , то есть $2^{-n} \sum_m |w_n(m)|^2$, называемую *дисперсией вейвлет-преобразования*, которая отражает относительный вклад масштабов с различными значениями параметров n .

Очевидно, что в отличие от $2^{-n} \overline{|w_n(0)|^2}$ амплитуды дисперсии $2^{-n} \sum_m |w_n(m)|^2$ не будут одинаковыми.

С другой стороны, по мере роста параметра n разрешение по шкале 2^n становится более низким, амплитуды располагаются все реже и содержат все меньше информации о периоде r . Вейвлет-амплитуды в области низкого разрешения как раз соответствуют относительно плохо определенным фурье-амплитудам. Поэтому при определении периода $r \gg 1$ основное значение будут иметь вейвлет-амплитуды с достаточно высоким разрешением, то есть с значениями n , близкими к $-L$. Для выполнения вейвлет-преобразования, соответственно, требуется порядка L квантовых операций

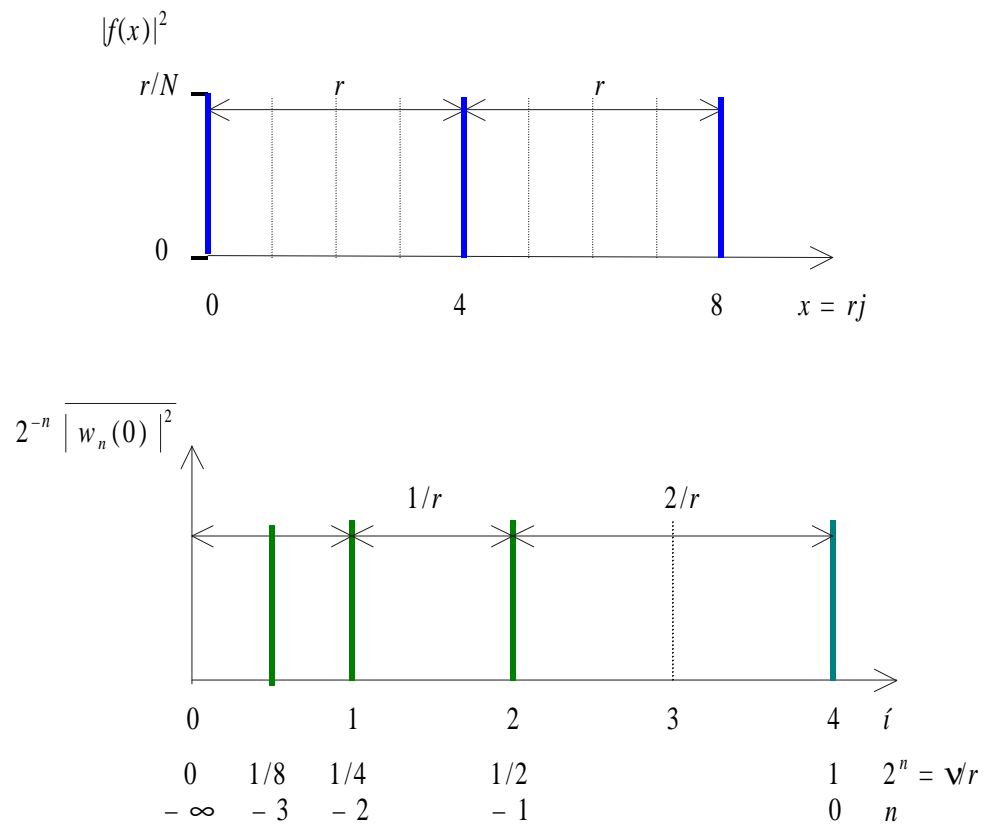


Рис. 1.11. Схематическое изображение идеальных зависимостей функции $|f(x)|^2$ для регистра с $L = 3$, «периодом» $r = 4$ и функции $2^{-n} \overline{|w_n(0)|^2}$ ($-L \leq n \leq 0$).

Период функции r определяется способом, аналогичным тому, как это делается при использовании фурье-преобразования. Измеряя разность пар значений 2^n , определяются соответствующие разности $\Delta n/r$, после преобразования которых к неприводимому виду затем определяется и период r .

Заключение: Предложено использовать в алгоритме факторизации *квантовое вейвлет-преобразование*, преимущество которого по сравнению с квантовым фурье-

преобразованием состоит в том, что при примерно том же числе элементарных унитарных операций, что и в случае квантового фурье-преобразования, вейвлет-преобразование *не содержит операций типа контролируемого изменения фазы* $\mathbf{V}_{j,k}$ и, следовательно, отпадает проблема возрастающей экспоненциально с числом этих операций временной цены алгоритма Шора. Кроме того, можно ожидать *дальнейшего ускорения* алгоритма факторизации при оптимизации типов используемых вейвлетов.

Приложение П1. Обобщенное уравнение Блоха для немарковского случайного процесса

Здесь мы приведем вывод уравнения (1.17), применяя общий операторный подход, подобный описанному в [1.14], который представляется более удобным по сравнению с первоначальным матричным подходом, использованным нами ранее в [1.12, 1.57]. Для описания динамики спиновых систем в твердых телах формулируется обобщенное уравнение Блоха, учитывающее немарковский характер случайных процессов.

Предположим, что спиновая система S и окружающая среда B , с которой она взаимодействует, представляет собой замкнутую систему, которая для случая одного спина-кубита описывается гамильтонианом вида (матрица 4×4):

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_S \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_S \otimes \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB}, \quad (\text{П1.1})$$

где $\mathbf{H}_S = -(\omega_0/2) \sigma_z$, при этом $[\mathbf{H}_S, \mathbf{H}_B] = 0$, но $[\mathbf{H}_B, \mathbf{H}_{SB}] \neq 0$.

Далее выражение (П1.1) будем записывать в более компактном операторном виде

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{SB}.$$

Зависимость от времени недиагональных элементов матрицы плотности или поперечной составляющей вектора Блоха, в частности $P_-(t)$, определяется выражением:

$$P_-(t) = 2\text{Sp}(\sigma_- \rho(t)), \quad (1.117)$$

где оператор плотности $\rho(t)$ удовлетворяет уравнению

$$i\partial\rho(t)/\partial t = [\mathbf{H}, \rho(t)] \quad (1.118)$$

с начальным условием $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B(0)$, $\rho_S(0) = 1/2 P_-(0) \sigma_+$.

Перейдем к представлению взаимодействия

$$\rho(t) = \exp(-i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t) \rho_{\text{int}}(t) \exp(i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t),$$

$$\mathbf{H}_{SB} = \exp(-i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t) \mathbf{H}_{SB,\text{int}}(t) \exp(i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t), \quad (\text{П1.2})$$

$$i\partial\rho_{\text{int}}/\partial t = [\mathbf{H}_{SB,\text{int}}(t), \rho_{\text{int}}(t)]. \quad (\text{П1.3})$$

Выражение (1.117) запишем в виде

$$P_-(t) = 2\text{Sp}(\sigma_- \rho(t)) = \exp(i\omega_0 t) 2\text{Sp}(\sigma_- \rho_{\text{int}}(t)). \quad (\text{П1.4})$$

Выделим далее из оператора $\rho_{\text{int}}(t)$ часть, соответствующую рассматриваемым состояниям ядерного спина кубита, с помощью оператора проектирования P_S со свойствами

$$(1-P_S)P_S = 0, \quad \rho_{\text{int}}(t) = P_S \rho_{\text{int}}(t) + (1-P_S) \rho_{\text{int}}(t), \quad P_S \mathbf{H}_S = \mathbf{H}_S P_S, \quad P_S \mathbf{H}_B = 0, \quad (\text{П1.5})$$

Используя (П1.2) найдем

$$\frac{dP_-(t)}{dt} = i\omega_0 P_-(t) - i2 \exp(i\omega_0 t) \text{Sp}([\sigma_- P_S, \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t)](P_S \rho_{\text{int}}(t) + (1-P_S) \rho_{\text{int}}(t))) \quad (\text{П1.6})$$

или

$$\begin{aligned} \frac{dP_-(t)}{dt} = i\omega_0 P_-(t) - i2 \exp(i\omega_0 t) \text{Sp}([\sigma_- P_S, \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t)]P_S \rho_{\text{int}}(t)) - \\ - i2 \exp(i\omega_0 t) \text{Sp}(\sigma_- P_S \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t)(1-P_S) \rho_{\text{int}}(t)) \end{aligned} \quad (\text{П1.7})$$

Для множителя $(1-P_S) \rho_{\text{int}}(t)$ запишем уравнение

$$\frac{d(1-P_S) \rho_{\text{int}}(t)}{dt} = -i(1-P_S)[\mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t), (P_S \rho_{\text{int}}(t) + (1-P_S) \rho_{\text{int}}(t))], \quad (\text{П1.8})$$

решение которого для начального условия $(1-P_S) \rho(0) = 0$ представим в виде

$$(1-P_S) \rho_{\text{int}}(t) = -i \int_0^t dt'.$$

$$\cdot \mathbf{T} \exp\{-i(1-P_S) \int_{t'}^t \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t'') dt''\} (1-P_S) \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t') P_S \rho_{\text{int}}(t') \mathbf{T} \exp\{i(1-P_S) \int_{t'}^t \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t'') dt''\}, \quad (\text{П1.9})$$

где \mathbf{T} — оператор Вика упорядочения по времени.

Далее примем, что $\text{Sp}_B \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t) = \text{Sp}_B \mathbf{H}_{\text{SB,int}} = 0$ и поэтому второе слагаемое в правой части (П1.7) выпадает.

Подставляя в (П1.7) выражение (П1.9) получим

$$\begin{aligned} \frac{dP_-(t)}{dt} = i\omega_0 P_-(t) - 2 \exp(i\omega_0 t) \int_0^t dt' \text{Sp}\{\sigma_- P_S \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t') \cdot \\ \cdot \mathbf{T} \exp(-i(1-P_S) \int_{t'}^t \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t'') dt'') (1-P_S) \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t') P_S \rho_{\text{int}}(t') \mathbf{T} \exp(i(1-P_S) \int_{t'}^t \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t'') dt'')\}. \end{aligned} \quad (\text{П1.10})$$

Учитывая теперь, что

$$\sigma_- = \exp(-i\omega_0 t') \exp(i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t') \sigma_- \exp(-i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t'),$$

и совершая циклическую перестановку операторов под знаком следа, запишем

$$\begin{aligned} \frac{dP_-(t)}{dt} = i\omega_0 P_-(t) - 2 \int_0^t \exp(i\omega_0(t-t')) dt' \text{Sp}\{\mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t-t') \exp(i((\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t') \cdot \\ \cdot \mathbf{T} \exp(-i(1-P_S) \int_{t'}^t \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t'') dt'') (1-P_S) \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t') P_S \rho_{\text{int}}(t') \mathbf{T} \exp(i(1-P_S) \int_{t'}^t \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t'') dt'') \cdot \\ \cdot \exp(i(\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B)t') \sigma_- P_S \}. \end{aligned} \quad (\text{П1.11})$$

Наконец, ограничимся вторым порядком малости относительно взаимодействия с окружением и положим в (П1.11) $\mathbf{T} \exp(\pm i(1 - P_S) \int_0^t \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t'') dt'') \approx 1$. Кроме того, будем предполагать, 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 (адиабатическое приближение) и матрица плотности имеет вид $\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$ результате получим

$$\frac{dP_-(t)}{dt} - i\omega_0 P_- + \int_0^t f(\tau) \exp(i\omega_0 \tau) P_-(t - \tau) d\tau = 0, \quad (1.17)$$

где функция памяти имеет вид

$$f(\tau) = \text{Sp}_B \{ \rho_B(0) \mathbf{H}_{\text{SB,int}}(t - t') (1 - P_S) \mathbf{H}_{\text{SB}} \} \quad (\text{П1.12})$$

Для твердотельного случая с учетом процессов последействия, предполагая функцию памяти $f(\tau)$ изотропной в плоскости xu , *обобщенное уравнение Блоха* можно представить в виде

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} + \int_0^t f(\tau) [(\cos(\omega_0 \tau) P_x(t - \tau) + \sin(\omega_0 \tau) P_y(t - \tau)) \mathbf{i} + \\ + (-\sin(\omega_0 \tau) P_x(t - \tau) + \cos(\omega_0 \tau) P_y(t - \tau)) \mathbf{j}] d\tau + \frac{(P_z(t) - P_0) \mathbf{k}}{T_{\parallel}} = \gamma_{\perp} [\mathbf{P}(t) \times \mathbf{B}]. \end{aligned} \quad (\text{П1.13})$$

Вклад неадиабатических процессов может быть учтен путем включения в функцию памяти дополнительного δ -образного слагаемого:

$$f(\tau) \rightarrow f(\tau) + 1/T_{\perp}' \cdot \delta(\tau). \quad (\text{П1.14})$$

Приложение П2. 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 с выделенными кубитами. Одним из основных условий для построения квантового компьютера является наличие *универсального* набора однокубитовых и двухкубитовых квантовых вентилях [1.16], с помощью которого может быть выполнено любое унитарное преобразование 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 них является *однокубитовая операция инверсии НЕ (NOT)*, которая

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

$$\mathbf{NOT} = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \equiv \sigma_x = -i \exp(i\pi \mathbf{I}_x), \quad (\text{П2.1})$$

которую можно рассматривать как поворот вектора Блоха вокруг оси x на угол π .

Другой однокубитовой операцией является *операция Адамара Н*

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x + \sigma_z) = -i \exp(i\pi(\mathbf{I}_x + \mathbf{I}_z)/2^{1/2}). \quad (\text{П2.2})$$

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

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

$$\mathbf{H} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix}, \quad \mathbf{H} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \end{vmatrix}. \quad (\text{П2.3})$$

Заметим, что указанные матрицы имеют определитель, равный -1 и не являются унитарными, отвечающими вращению вектора Блоха в трехмерном пространстве, они становятся такими при умножении на мнимую единицу.

Двухкубитовые вентили соответствуют операциям поворота в четырехмерном гильбертовом пространстве состояний двух кубитов, для которых необходимо, чтобы по крайней мере на время их выполнения имело место взаимодействие между кубитами, которое приводит к образованию составляющих соответствующего тензора корреляции. Основным базовым двухкубитовым вентилем является обратимый контролируемый инвертор или оператор *контролируемое НЕ* (Controlled NOT \equiv CNOT).

Этот вентиль описывается квантовой матрицей 4×4 (в базисе $|0_1 0_2\rangle, |0_1 1_2\rangle, |1_1 0_2\rangle, |1_1 1_2\rangle$) следующего вида:

$$\begin{aligned} \mathbf{CNOT} &= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \otimes \mathbf{1} + \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \otimes \sigma_x \equiv |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbf{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x = \\ &= 1/2 (\hat{\mathbf{I}} + 2\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes 2\mathbf{I}_x - 4\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{I}_x). \end{aligned} \quad (\text{П2.4})$$

Последнее выражение можно представить также в виде последовательности операторов поворота:

$$\mathbf{CNOT} = \exp(-i\pi/4) (\mathbf{1} \otimes \exp(i\mathbf{I}_x\pi/2)) \cdot (\exp(i\mathbf{I}_z\pi/2) \otimes \mathbf{1}) \cdot \exp(-i(\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{I}_x)\pi), \quad (\text{П2.5})$$

при этом операцию коррелированного поворота двух кубитов можно переписать как

$$\exp(-i(\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{I}_x)\pi) = (\mathbf{1} \otimes \exp(-i\mathbf{I}_y\pi/2)) \exp(-i(\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{I}_z)\pi) (\mathbf{1} \otimes \exp(i\mathbf{I}_y\pi/2)). \quad (\text{П2.6})$$

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

В сравнении с классическим вентиляем **CNOT** квантовый вентиль является более богатым. В отличие от классического вентиля квантовый вентиль **CNOT** может действовать на суперпозицию состояний, а также создавать эту суперпозицию, создавать и разрушать запутанные состояния.

Например, запутанное ЭПР-состояние можно создать из незапутанного $|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \equiv |1\rangle \otimes |1\rangle$ с помощью унитарного преобразования, построенного из операций **H** и **CNOT**:

$$\mathbf{CNOT} (\mathbf{H} |1\rangle \otimes |1\rangle) = \mathbf{CNOT} (\sqrt{1/2} (|0\rangle - |1\rangle) \otimes |1\rangle) = \sqrt{1/2} (|01\rangle - |10\rangle). \quad (\text{П2.7})$$

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

$$\mathbf{SWAP} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1/2(\hat{\mathbf{I}} + \sigma_1 \otimes \sigma_2) = \mathbf{CNOT} \overline{\mathbf{CNOT}} \cdot \mathbf{CNOT}, \quad (\text{П2.8})$$

где

$$\overline{\mathbf{CNOT}} = \mathbf{1} \otimes |0\rangle\langle 0| + \sigma_x \otimes |1\rangle\langle 1|, \quad (\text{П2.9})$$

а также оператор *контролируемого изменения фазы* состояния второго кубита $|1\rangle\langle 1|$:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{j,k} &= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(i\theta_{i-j}) \end{vmatrix} = \\ &= \exp[(i\theta_{j-k}/4) (\mathbf{1} - 2\mathbf{I}_z)] \otimes \mathbf{1} \cdot (\exp(i(\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{I}_z) \theta_{j-k}) \cdot (\mathbf{1} \otimes \exp[(i\theta_{j-k}/4) (\mathbf{1} - 2\mathbf{I}_z)])) = \\ &= \exp(i\theta_{j-k}/2) \exp(-i(\theta_{j-k}/2)\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{1}) \cdot (\exp(i(\mathbf{I}_z \otimes \mathbf{I}_z) \theta_{j-k}) \cdot (\mathbf{1} \otimes \exp(-i(\theta_{j-k}/2)\mathbf{I}_z))), \end{aligned} \quad (\text{П2.10})$$

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

Введенные выше для формирования квазичистого состояния системы двух кубитов операторы $\mathbf{P}_{1,2}$ выражаются через операторы **CNOT** и **SWAP**:

$$\mathbf{P}_1 = \mathbf{SWAP} \cdot \mathbf{CNOT}, \quad \mathbf{P}_2 = \mathbf{CNOT} \mathbf{SWAP}. \quad (\text{П2.11})$$

Литература к Главе I

- 1.1. *Schumacher B.* Quantum Coding. // *Phys. Rev.*, 1995, v.**A51**, №4, pp.2738-2747.
- 1.2. *Landau L.D.* Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik. // *Zeitsch. Phys.*, 1927, Bd.**45**, S.430-441. / Перевод с немец. : *Л.Д.Ландау*. Собрание трудов. т.I. –М.: Наука, 1969, 512с.
- 1.3. *Bloch F.* Nuclear Induction. // *Phys. Rev.*, 1946, v.**70**, №7/8, pp.460-473.
- 1.4. *Wangsness R.K., Bloch F.* The Dynamical Theory of Nuclear Induction. // *Phys. Rev.*, 1953, v.**89**, pp.729-739.
- 1.5. *Bloch F.* Dynamical Theory of Nuclear Induction. II // *Phys. Rev.*, 1956, v.**102**, pp.104-135.
- 1.6. *Torrey H.C.* Bloch Equations with Diffusion Terms. // *Phys. Rev.*, 1956, v.**104**, pp.563-565.
- 1.7. *Bloch F.* Generalized Theory of Relaxation. // *Phys. Rev.*, 1957, v.**105**, №4, pp.1206-1222.
- 1.8. *Abragam A.* The Principles of Nuclear Magnetism. –Oxford: Clarendon Press, 1961. / *А.Абрагам*. Ядерный магнетизм. / Перевод с англ. с участием **А.А.Кокина** под ред. Г.В.Скроцкого. —М.: ИИЛ, 1963, 552с.
- 1.9. *Kubo R., Tomita K.* A General Theory of Magnetic Resonance absorption. // *Journ. Phys. Soc. Japan*, 1954, v.**9**, pp.888-919.
- 1.10. *Скроцкий Г.В., Кокин А.А.* Система магнитных моментов в слабом переменном магнитном поле. // *ЖЭТФ*, 1959, т.**36**, вып. 1, с.169-175.
- 1.11. **Кокин А.А.** Уширение резонансных линий и релаксация. // Учебное пособие. – Москва: МФТИ, 1970, 154 с.
- 1.12. **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.
- 1.13. **Кокин А.А., Мороча А.К.** Уравнения Блоха, область их применимости и возможные обобщения. // Всесоюзн. симпозиум. «Применение ЯМР и ЯКР в физике и химии твердого тела». Тезисы доклада. Владивосток, 1968, с.7-9.
- 1.14. *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.
- 1.15. *Валиев К.А. Кокин А.А.* Квантовые компьютеры: надежды и реальность. — Москва-Ижевск : НИЦ РХД, 2001. 352 с.
- 1.16. *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.
- 1.17. *Schrödinger E.* Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik. // *Naturwissenschaften*, 1935, Bd.**23**, S.807-812.

- 1.18. *Wootters W.K.* Entanglement of Formation of Arbitrary State of Two Qubits. // *Phys. Rev. Lett.*, 1998, v.**80**, №10, pp.2245-2248.
- 1.19. *Arnesen M.C., Bose S., Vedral V.* Natural Thermal and Magnetic Entanglement in the 1D Heisenberg Model. // *Phys. Rev. Lett.*, 2001, v.**87**, №1, pp.017901-1-017901-4.
- 1.20. *Knill E., Chuang I., Laflamme R.* Effective Pure States for Bulk Quantum Computation. // *Phys. Rev.*, 1998, v.**A57**, №5, pp.3348-3363.
- 1.21. *Wootters W.K.* Entangled Chains. // E-print LANL, 2000, quant-ph/0001114.
- 1.22. *O'Connor K.M., Wootters W.K.* Entangled rings. // *Phys. Rev.*, 2001, v.**A63**, pp.052302-1–052302-9.
- 1.23. *Исюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н.* Статистическая физика магнитоупорядоченных систем. — М.: Наука, 1987, 264 с.
- 1.24. *Wang X., Zanardi P.* Quantum Entanglement and Bell Inequalities in Heisenberg Spin Chains. // 2002, LANL E-print quant-ph/0202108.
- 1.25. *Wang X.* Threshold Temperature for Thermal Entanglement and Ground-State Multipartite Entanglement in the Isotropic Heisenberg Model. // 2002, LANL E-print quant-ph/0205049.
- 1.26. *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.
- 1.27. *Lindblad G.* On the Generation of Quantum Dynamical Semigroups. // *Commun. Math. Phys.*, 1976, v.**48**, pp.119-130.
- 1.28. *Redfield A.G.* On the Theory of Relaxation Processes. // *Journ. Resear. Devel. IBM*, 1957, v.**1**, pp.19-31.
- 1.29. *Slichter C.P.* Principles of Magnetic Resonance. Third Ed. —Berlin et al.: Springer, 1990, 656p. / *Сликтер Ч.* Основы теории магнитного резонанса. / Перевод с англ. 2-го издания 1980 г. под ред. Г.В.Скороцкого. —М.: Мир, 1981, 445с.
- 1.30. *Кокин А.А., Скороцкий Г.В.* Теория парамагнитного резонанса в системах, содержащих два сорта магнитных момента. // *ЖЭТФ*, 1959, т.**37**, вып.2(8), с.482-489.
- 1.31. *Кокин А.А., Рыжков В.М., Скороцкий Г.В.* К вопросу о возможности использования эффекта Оверхаузера для усиления сигнала свободной прецессии. // –Ленинград: ОКБ Мингеол. СССР, Геофизическое приборостроение (сб. статей), 1960, вып.6, с.27-32.
- 1.32. *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.
- 1.33. *Менский М.Б.* Квантовые измерения и декогеренция. —М.: Физматлит, 2001, 228 с.
- 1.34. *Anastopoulos C.* Frequently Asked Questions about Decoherence. // E-print LANL, 2000, arXiv:quant-ph/0011123.
- 1.35. *Palma G.M., Suominen K.-A., Ekert A.K.* Quantum Computers and Dissipation. // *Proc. Roy. Soc., Lond.*, 1996, v.**A452**, pp.567.

- 1.36. *Mozyrsky D., Privman V.* Adiabatic Decoherence. // Jour. Stat. Phys., 1998, v.**91**, №.3/4, pp.787-799.
- 1.37. *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.
- 1.38. *Reina J.H., Quiroga L., Johnson N.F.* Decoherence of Quantum Registers. // E-print LANL, 2001, arXiv:quant-ph/0105029.
- 1.39. *Cohen-Tannoudji C., Dui B., Laloë F.* Механика Квантовая. —Paris Hermann. 1973. // Коэн-Таннуджи К., Дю Б., Лалоэ Ф. Квантовая механика, т.1. —Екатеринбург: Изд. Уральский. Университет., 2000, 944с.
- 1.40. *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.
- 1.41. *Alicki R.* Decoherence in Quantum Open Systems Revisited. // E-print LANL, 2002, arXiv:quant-ph/0205173.
- 1.42. *Тябликов С.В.* Методы квантовой теории магнетизма. —М.: Наука, 1975, 528 с .
- 1.43. *Haeblerlen 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.Скороцкого и Э.Т.Липпмаа. —М.: Мир, 1980, 504с.
- 1.44. *Ernst R.R., Bodenhausen G., Wokaun A.* Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions. —Oxford: Univ. Press, 1994, 650p. / 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, 710с.
- 1.45. *Strunz W.T., Haake F., Braun D.* Universality of Decoherence in the Makroworld. // E-print LANL, 2002, arXiv:quant-ph/0204129.
- 1.46. *Кокун А.А.* Магнитный резонанс в системах, обладающих одновременно электронным и ядерным парамагнетизмом. // Изв. ВУЗ, 1960, №4, с.198–205.
- 1.47. *Ekert A., Jozsa R.* Quantum Computation and Shor's factoring algorithm. // Rev. Mod. Phys., 1996, v.**68**, №3, pp.297–301.
- 1.48. *Saito A., Rios 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.
- 1.49. *Barenco A., Ekert A., Suominen K.-A., Törmä P.* Approximate Quantum Fourier Transform and Decoherence // Phys. Rev., 1996, v.**A54**, № 1, pp.139.

- 1.50. *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.
- 1.51. *Gea-Banacloche J.* Qubit-Qubit Interaction in Quantum Computers // *Phys. Rev.*, 1998, **v.A57**, №1, pp.R1–R4.
- 1.52. *Cohen F., Kovačević J.* Wavelets: The Mathematical background. // *Proc. IEEE.*, 1996, **v.84**, № 5, pp.720–732.
- 1.53. *Klappenecker A., Beth T., Grassl M.* Wavekettransformation auf Quantenrechnen // Magdeburg: Logisch-GmbH, 1998, Information und Mikrosystemtechnik., 25-27 März, pp.145–152.
- 1.54. *Klappenecker A.* Wavelets and Wavelet Packets on Quantum Computers. // 1999, LANL E-print arXiv:quant-ph/9909014.
- 1.55. *Beylkin G., Coifman R., Rokhlin V.* Fast Wavelet Transforms and Numerical Algorithms I. // *Commun. Pure Appl. Math.* 1991, **v.44**, №2, pp.141–183.
- 1.56. *Fjany A., Williams C. P.* Quantum Wavelet Transforms: Fast Algorithms and Complete Circuits. // 1998, LANL E-print arXiv:quant-ph/9809004.
- 1.57. *Кокун А.А.* Квантовая теория электронного и ядерного парамагнитного резонанса и релаксации в слабых переменных полях. Кандидатская диссертация. Свердловск. УрГУ, 1961, 179с.

ГЛАВА II. АНСАМБЛЕВЫЕ ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ ЯМР КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ

2.1. Общие проблемы реализации полномасштабного ЯМР квантового компьютера

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]).

Главным преимуществом такого компьютера является то, что практически независимые молекулы-компьютеры жидкости, благодаря усреднению в результате интенсивного броуновского движения молекул меж- и внутримолекулярных диполь-дипольных магнитных взаимодействий, *действует независимо*, обеспечивая тем самым возможность управления ими и измерение их состояний с помощью известных в технике ядерного магнитного резонанса (ЯМР) операций над *макроскопическим объемом* жидкости. Индивидуальное обращение к отдельным кубитам заменяется здесь одновременным обращением к соответствующим кубитам во всех молекулах ансамбля. Компьютер такого рода получил название *ансамблевого* (bulk-ensemble quantum computer) **ЯМР квантового компьютера**. Замечательным здесь является то, что он в принципе работает при *комнатной температуре*. Время декогерентизации квантовых состояний ядерных спинов в жидкости достаточно велико по сравнению с временем выполнения отдельной логической операции, выполняемой на основе техники ЯМР. Оно может составлять несколько секунд.

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.

Основные ограничения этого направления развития ЯМР квантовых компьютеров связаны со следующими обстоятельствами:

1. Исходное квантовое состояние системы ядерных спинов в отдельной молекуле жидкого образца, благодаря конечному значению температуры в жидкости, неизбежно является *смешанным*. Это требует для инициализации такого состояния использования

специальных неунитарных операций для преобразования его в квазичистое состояние, обладающее свойствами чистого основного состояния [2.1, 2.2]:

$$\rho_0 \rightarrow \rho_\varepsilon = (1 - \varepsilon)2^{-L} \cdot \mathbf{1} + \varepsilon|0\rangle\langle 0|, \quad (2.1)$$

где параметр $\varepsilon \approx L(\omega_0/T)2^{-L}$ представляет собой вероятность с которой чистое состояние $|0\rangle\langle 0|$ входит в матрицу плотности квазичистого состояния ρ_ε . Она определяется связью кубитов с окружением, ω_0 — характерная резонансная частота, $\omega_0/T \ll 1$.

Квантовые корреляции в сильно смешанных состояниях жидкостных квантовых компьютеров при комнатных температурах, определяются в основном *локальными взаимодействиями* между кубитами. При малых значениях ε и *для относительно небольшого числа кубитов*, при котором $\varepsilon \leq (1+2^{2L-1})^{-1}$, соответствующие квазичистые состояния остаются *незапутанными* при любых унитарных преобразованиях [2.3]. В таком состоянии *не нарушаются неравенства Белла*, а составляющие тензора корреляции описывают классические корреляции. С этой точки зрения жидкостные прототипы квантовых компьютеров не являются вполне квантовыми, однако они могут имитировать некоторые квантовые процессы. Следует отметить, что вопрос о «*квантовости*» процессов в малокубитовых жидкостных квантовых компьютерах ($\varepsilon \ll 1$) до сих пор остается предметом интенсивных дискуссий.

Для достаточно больших значений параметра $\varepsilon > (1+2^{L-1})^{-1}$ квазичистое состояние (2.1) будет включать максимально запутанное состояние L -кубитов, смешанное с полностью поляризованным состоянием [2.4]. Откуда следует, что для большого числа кубитов в молекуле, при $\varepsilon \sim 1$ квазичистое состояние может быть запутанным.

2. Измеряемый на выходе жидкостного компьютера сигнал пропорционален экспоненциально малому параметру $\varepsilon \approx L(\omega_0/T)2^{-L}$ (см. подраздел **2.8.2**), 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, ЯМР квантовые компьютеры на молекулах органической жидкости не могут иметь число кубитов L , значительно *больше двух-трех десятков* (см. обзор [2.1]). Этого недостаточно для создания на этом пути полномасштабного ЯМР квантового компьютера.

Для реализации *полномасштабного квантового компьютера*, превосходящего по производительности любой классический компьютер, на каких бы физических принципах он не работал, требуется выполнить *пять основных требований* [2.2, 2.5].

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.

Наиболее перспективной кандидатурой для многокубитового квантового регистра может быть *твердотельный гомоядерный вариант*, в котором ядерные спины, образующие квантовый регистр, принадлежат идентичным атомам, размещенных в некоторой твердотельной искусственной или естественной структуре. Существенно также, что такой вариант допускает создание достаточно *больших ансамблей многокубитовых квантовых регистров*.

2. Необходимо обеспечить условия приготовления состояния входного регистра с необходимой точностью в исходном основном базисном состоянии $|0_{L-1}, 0_{L-2}, 0_{L-3}, \dots, 0_0\rangle$ — *процесса инициализации состояния квантового регистра* (см. раздел **1.3**).

В случае многокубитовых ЯМР квантовых компьютеров переход к использованию *низких спиновых температур* $\omega_0/T_1 \geq 1$ соответствует тому, что в (2.1) параметр $\varepsilon \approx 1$, и исходное состояние оказывается практически чистым квантовым состоянием и в отличие от жидкостного варианта преобразование к квазичистому состоянию становится не нужным.

3. Необходимо обеспечить *максимальное подавление эффектов декогерентизации и исправление случайных ошибок* квантовых состояний регистра. Характерное время декогерентизации должно в $10^4 - 10^5$ раз превышать время выполнения основных квантовых операций (время такта) для того, чтобы ошибка при выполнении отдельной квантовой операции была по крайней мере менее $10^{-4} - 10^{-5}$, что согласно предельной теореме [2.6] является приемлемым для надежной работы многокубитового компьютера с использованием соответствующих корректирующих кодов. Проблема подавления декогерентизации является одной из основных на пути реализации квантовых компьютеров

Для твердотельных ЯМР квантовых компьютеров эффекты декогерентизации, которые определяются при низких температурах в основном взаимодействием ядерных спинов с окружающими посторонними электронными и ядерными магнитными примесями, могут быть снижены до требуемого уровня путем *очистки материала*, и, кроме того, путем использования многоимпульсных методов спектроскопии ЯМР высокого разрешения [2.7].

4. Необходимо обеспечить за время декогерентизации такта выполнение требуемой совокупности квантовых логических операций, определяющей унитарное преобразование $U(t)$. Эта совокупность должна содержать определенный набор защищенных от ошибок *двухкубитовых* операций, типа контролируемый инвертор или контролируемое НЕ (CNOT) и *однокубитовых* операций, таких как операции НЕ, Адамара и некоторые другие. 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-кубитам. Это можно осуществить, в частности, путем управления резонансной частотой кубита с помощью *электрического, магнитного или электромагнитного воздействия на электронное состояние* атома, содержащего данный спин-кубит. Эти вопросы изучаются в подразделе **2.6.3**.

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

Проблема индивидуального измерения состояний ядерного спина-кубита в твердотельном ЯМР квантовом компьютере является другой и наиболее трудной. Был предложен целый ряд способов измерения состояний отдельных кубитов. Нам представляется, что для измерения состояний ядерных спинов, как и для организации логических операций, перспективным является *ансамблевый* подход, при котором используется не отдельный многокубитовый квантовый регистр, а достаточно большой их ансамбль, что детально обсуждается далее в этой Главе.

Относительно возможности выполнения перечисленных общих требований было высказано достаточно большое число скептических возражений, ответ на многие из них был дан уже в обзоре Дж.Прескилла [2.8]. Недавно появились новые пессимистические высказывания, связанные с проблемами реализуемости полномасштабных квантовых компьютеров [2.9-2.14]. Ниже, в разделах **2.2–2.4** мы проанализируем эти высказывания и приведем наши соображения относительно возможных способов преодоления этих трудностей в случае твердотельного ЯМР ансамблевого квантового компьютера.

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

В последующих разделах будут исследованы варианты *ансамблевых твердотельных квантовых компьютеров* и рассмотрена *их перспективность* с точки зрения выполнения всех перечисленных основных требований.

2.2. Проблемы приготовления базисных состояний многокубитового квантового регистра и решение их в ансамблевом подходе

Процесс приготовления исходного основного состояния квантового регистра (инициализации) $|0\rangle \equiv |0_{L-1}, 0_{L-2}, 0_{L-3}, \dots, 0_0\rangle$ обычно состоит в приготовлении основных состояний каждого кубита регистра в отдельности. Если вектор такого чистого квантового состояния, определен с точностью до фазового множителя с неопределенным значением фазы, представляющей собой сумму неопределенных фаз векторов состояния основных состояний кубитов, то матрица плотности этого основного состояния диагональна и не содержит никаких неопределенных фазовых множителей. Однако благодаря случайным воздействиям со стороны окружения уже на стадии инициализации могут быть внесены ошибки при приготовлении основных состояний отдельных кубитов, обусловленные образованием суперпозиций основных состояний с неосновными.

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

$$\begin{aligned} \mathbf{U} &= \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2}} \begin{vmatrix} 1+i\varepsilon_z & i(\varepsilon_x-i\varepsilon_y) \\ i(\varepsilon_x+i\varepsilon_y) & 1-i\varepsilon_z \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2}} (\mathbf{1}+i\varepsilon_x\sigma_x+i\varepsilon_y\sigma_y+i\varepsilon_z\sigma_z), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где случайные вещественные параметры ε_x , ε_y , ε_z характеризуют интенсивность *трех* типов ошибок (они могут быть независимыми случайными функциями времени). Действуя на основное состояние $|0\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}$ преобразование (2.2) переводит состояние $|0\rangle$ в суперпозицию

его с состоянием $|1\rangle$ с соответствующими фазовыми множителями:

$$\mathbf{U}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2}} \left((1+i\varepsilon_z)|0\rangle + i(\varepsilon_x+i\varepsilon_y)|1\rangle \right). \quad (2.3)$$

В результате этого воздействия матрица плотности возмущенного основного состояния принимает вид

$$\mathbf{U}|0\rangle\langle 0|\mathbf{U}^\dagger = \frac{1}{1+\varepsilon_z^2+\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2} \begin{vmatrix} (1+\varepsilon_z^2) & -i(1+i\varepsilon_z)(\varepsilon_x-i\varepsilon_y) \\ i(1-i\varepsilon_z)(\varepsilon_x+i\varepsilon_y) & (\varepsilon_x^2+\varepsilon_y^2) \end{vmatrix} \quad (2.4)$$

Она содержит теперь комплексные недиагональные элементы, но по-прежнему имеет только одно, равное единице собственное значение, то есть соответствует *чистому* квантовому состоянию кубита. Для составляющих вектора Блоха получим

$$P_z = 1 - \frac{2(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2)}{1 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2} = 1 - 2p, \quad P_{\pm} = 2 \frac{(\varepsilon_z \varepsilon_x - \varepsilon_y) \pm i(\varepsilon_x + \varepsilon_z \varepsilon_y)}{1 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2}. \quad (2.5)$$

Для *точности воспроизведения* основного состояния кубита в соответствии с (1.129) получим

$$F(0) = \langle 0 | \mathbf{U} | 0 \rangle \langle 0 | \mathbf{U}^+ | 0 \rangle = \frac{1}{1 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2} (1 + \varepsilon_z^2) = 1 - p, \quad (2.6)$$

где p — вероятность ошибки воспроизведения основного состояния $|0\rangle$ (здесь тоже случайная величина) будет мала при $\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 \ll 1$ $p \approx \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2$. Недиагональные элементы матрицы плотности, в отличие от диагональных, имеют малую по сравнению с единицей амплитуду и фазовый множитель со случайной фазой $\pm \arctg \frac{\varepsilon_x + \varepsilon_z \varepsilon_y}{\varepsilon_z \varepsilon_x - \varepsilon_y}$, которая при $|\varepsilon_z| \sim 1$ может принимать любые значения.

В случае, когда кубит находится в некотором произвольном состоянии

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

результат воздействия на него оператора \mathbf{U} имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{U}|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2}} \left(\mathbf{1} + i\varepsilon_x \sigma_x + i\varepsilon_y \sigma_y + i\varepsilon_z \sigma_z \right) \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2}} \left((c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) + i\varepsilon_z (c_0|0\rangle - c_1|1\rangle) + \right. \\ &\quad \left. + i\varepsilon_x (c_0|1\rangle + c_1|0\rangle) + \varepsilon_y (-c_0|1\rangle + c_1|0\rangle) \right). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Слагаемые в (2.7), содержащие вещественные случайные величины $\varepsilon_z, \varepsilon_x, \varepsilon_y$, описывают, 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, $i\sigma_y = \sigma_z \sigma_x$) *ошибок-переворотов*. Ошибки состояния $|0\rangle$ в (2.6) в основном обусловлены такими амплитудными и амплитудно-фазовыми переворотами.

Все 2^L базисных векторов состояний квантового регистра $|n\rangle$ создаются в результате однокубитовых унитарных преобразований *iNOT* (Приложение П2), которые переводят ос-

новые состояния определенных кубитов $|0\rangle$ в состояния $|1\rangle$. В идеальном случае они представляют собой полную ортогональную систему.

Неидеальность однокубитовых операций за счет случайных воздействий, как при образовании базисных состояний, так и при вводе информации приводит также к соответствующим ошибкам.

Например, неидеальное однокубитовое унитарное преобразование $i\text{NOT}$ (с определителем, равным единице) представляется матрицей

$$\begin{aligned} i\text{NOT}_\varepsilon &= \frac{1}{\sqrt{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2}} \begin{vmatrix} i\varepsilon_z & i((1+\varepsilon_x) - i\varepsilon_y) \\ i((1+\varepsilon_x) + i\varepsilon_y) & -i\varepsilon_z \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2}} \left((1+\varepsilon_x)\sigma_x + i\varepsilon_y\sigma_y + i\varepsilon_z\sigma_z \right), \end{aligned} \quad (2.8)$$

Преобразование вектора состояния $|0\rangle$ в вектор состояния $|1\rangle$ теперь будет выглядеть следующим образом:

$$i\text{NOT}_\varepsilon|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2}} \left(\varepsilon_z|0\rangle + ((1+\varepsilon_x) + i\varepsilon_y)|1\rangle \right). \quad (2.9)$$

Точность воспроизведения конечного состояния $|1\rangle$ принимает вид

$$F(1) = \frac{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_y^2}{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2} = 1 - p, \quad (2.10)$$

Вероятность ошибки воспроизведения состояния $|1\rangle$ при $\varepsilon_z \ll 1$ $p \approx \varepsilon_z^2 \ll 1$ и определяются теперь в основном **фазовыми переворотами**. Состояние $|1\rangle$ в отличие от основного состояния имеет теперь амплитуду, порядка 1 и помимо общего дополнительный фазовый множитель со случайной фазой $\exp(i\varphi)$, где $\varphi = \arctg \frac{\varepsilon_y}{1+\varepsilon_x}$, которая при $|\varepsilon_y| \ll 1$ принимает малые значения, а составляющие вектора Блоха имеют вид:

$$\begin{aligned} P_z &= -1 + \frac{2\varepsilon_z^2}{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2} = -1 + 2p, \\ P_\pm &= \frac{2|\varepsilon_z| \sqrt{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_y^2}}{(1+\varepsilon_x)^2 + \varepsilon_z^2 + \varepsilon_y^2} \exp(i\varphi). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Таким образом, вектора 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 содер-

жат только недиагональные элементы матрицы плотности, описываемые поперечными составляющими вектора Блоха со случайной фазой произвольной величины при определенном соотношении параметров ϵ_x , ϵ_y и ϵ_z .

Благодаря двухкубитовым (и более сложным) случайным воздействиям ошибки состояний квантового регистра будут определяться также и образующимися при этом *запутанными состояниями* разного уровня и степени сложности.

При образовании *произвольной суперпозиции* базисных векторов состояния отдельные составляющие суперпозиции могут иметь различные общие фазовые множители с неопределенными фазами произвольной величины и несущественным является только один общий фазовый множитель.

Одно из основных утверждений в серии работ С.Кэка [2.9–2.13] состоит в том, что при приготовлении как основного состояния (инициализации), так и других базисных векторов состояния квантового регистра, квантовые *ошибки, связанные, в частности, со случайными фазовыми множителями нельзя полностью исправить*, используя класс кодов коррекции квантовых ошибок (Quantum Error Correction Codes, **QECC**), предложенный А.Калденбанком, П.Шором и Э.Стином [2.6], поскольку «they can potentially correct only bit flips and phase flips and some combinations thereof, which errors represent a small subset of all the error that can corrupt a quantum state [2.13]». Причиной этого, как утверждает автор, является *аналоговая* природа фазовых ошибок, характеризующихся непрерывным набором неконтролируемых случайных значений фаз многокубитовых состояний. Кроме того, утверждается, что *аналоговые квантовые ошибки* при образовании многокубитовых суперпозиций *не локализованы* и распространяются на многие базисные состояния в гильбертовом пространстве, в то время как в существующих кодах они предполагаются локализованными на ограниченном числе кубитов и кодирование логических состояний производится лишь на квантовых состояниях *ограниченного подпространства* в полном гильбертовом пространстве квантовой системы.

Отмечая далее, что произвольные суперпозиции базисных состояний квантового регистра, образующиеся при построении кодовых слов, при вводе информации в квантовый регистр или в процессе выполнения унитарных преобразований, нельзя представить без непрерывных случайных фаз компонентов и при этом «small phase error will become large as unitary transformations are applied repeatedly in the execution of a quantum algorithm», С.Кэк утверждает, что «since quantum calculations are sensitive to the phase values, they will have uncontrollable effects [2.13]».

По поводу этих пессимистических утверждений С.Кэка отметим следующее:

1. Инициализация состояния многокубитового ЯМР квантового регистра, то есть перевод всех кубитов в основные булевы состояния $|0_i\rangle$, должна производиться при *низких спиновых температурах* и в *достаточно сильном магнитном поле*. Напомним, что при этом основное состояние регистра может быть незапутанным даже при наличии взаимодействия между кубитами (см. раздел 1.6). При достаточно хорошей изоляции регистра от окружения (при $\varepsilon_x, \varepsilon_y \ll 1$) для вероятности ошибки основного состояния всего регистра $|0\rangle$ и амплитуды недиагональных элементов матрицы плотности, обусловленных случайными воздействиями со стороны окружения, можно обеспечить *необходимую малость*.

2. *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. Случайные фазовые множители аналогового типа сохраняются только у недиагональных элементов матрицы плотности, величина *амплитуды и фазы* которых определяется соотношениями между параметрами $\varepsilon_x, \varepsilon_y$ и ε_z , которые могут быть достаточно малы. То же относится и к фазовым множителям *других базисных состояний* квантового регистра, в которых отдельные кубиты находятся в состояниях $|1_i\rangle$.

3. Проблемы связанными с исправлением случайных фазовых ошибок у базисных состояний, отмеченные С.Кэком существовали бы для одиночного квантового регистра в определенный момент времени, возмущенное базисное состояние которого является чистым для каждого конкретного значения внешнего воздействия. Это воздействие на отдельный кубит в простейшем случае можно рассматривать как *стационарный случайный процесс*, реализуемый случайными функциями $\varepsilon_x(t), \varepsilon_y(t), \varepsilon_z(t)$, принадлежащими к некоторому статистическому ансамблю, а 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 эквивалентна приведенной матрице плотности с матричными элементами, зависящими от параметров случайного процесса (средние значения, дисперсии, функции корреляции и т.д.), как это рассмотрено в разделе 1.9.

4. Однако рассмотренное выше усреднение по времени означает практически неосуществимую процедуру достаточно *длительного накопления* мгновенных результатов измерения возмущенной матрицы плотности. Вместо одиночного квантового регистра мы предлагаем перейти к достаточно *большому ансамблю идентичных квантовых регистров*, в котором стационарный случайный процесс, описывающий случайные воздействия, можно считать *эргодическим*, то есть таким, который описывается одними и теми распределениями слу-

чайных функций как по времени для отдельного элемента ансамбля, так и по ансамблю в отдельный момент времени, то приведенная матрица плотности будет определяться путем усреднения возмущенной матрицы плотности 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, *аналогично* тому как это делается в *ансамблевых жидкостных квантовых компьютерах* (предполагается, что систематические ошибки, вносимые управляющими импульсами, при этом могут быть исключены).

В результате приведенная матрица плотности будет описывать некоторый процесс *декогерентизации* квантового состояния (пример такого усреднения см. раздел **1.9**), в результате которого произойдет затухание недиагональных элементов матрицы плотности. При этом амплитуды и фазы стационарных матричных элементов приведенной матрицы плотности, которая описывает уже не чистое, а *смешанное состояние*, не будут содержать *случайные величины аналогового типа*. Такое состояние не представляло бы проблем для **QECC**.

Затухание недиагональных элементов многокубитовой матрицы будет тем быстрее, чем большую размерность имеют недиагональные блоки в исходной матрице плотности. Степень смешанности будет определяться некоторой средней вероятностью ошибки получить чистое состояние $\bar{p} \ll 1$, которую можно рассматривать как *аналог температуры* в жидкостном ЯМР квантовом компьютере. Например, благодаря этим ошибкам чистое базисное состояние $|0\rangle\langle 0|$ переходит к смешанному состоянию, описываемому матрицей плотности вида

$$\begin{vmatrix} 1-\bar{p} & 0 \\ 0 & \bar{p} \end{vmatrix}. \text{ Таким образом мы видим, что на этапе подготовки базисных состояний квантового регистра } \mathbf{быстрая декогерентизация} \text{ в ансамблевом варианте играет } \mathbf{конструктивную роль}, \text{ обеспечивая выполнение } \mathbf{второго} \text{ основного требования.}$$

5. Если выполнены условия хорошей изоляции кубитов от окружения и они находятся в достаточно сильном поле, то смешанное состояние ансамблевого регистра будет соответствовать *малых значениях* \bar{p} . В этом случае оно может быть преобразовано к квазичистому состоянию

$$\begin{vmatrix} 1-\bar{p} & 0 \\ 0 & \bar{p} \end{vmatrix} = \bar{p}\mathbf{1} + (1-2\bar{p})|0\rangle\langle 0|, \quad (2.12)$$

где множитель $(1-2\bar{p})$ играет роль множителя ε в (2.1), имеющий теперь значения, близкие к единице. В этом случае сохраняются свойства несепарабельности (запутанности) квантовых состояний [2.4], как отмечалось выше в разделе **2.1**, при любом числе кубитов. Это означает, что вычислительные процессы в таких системах будут *полностью*

означает, что вычислительные процессы в таких системах будут **полностью квантовыми**, а не классической их имитацией.

Вычислительные операции использующие одно и двухкубитовые квантовые вентили будут сопровождаться за время их выполнения образованием недиагональных элементов приведенной матрица плотности, соответствующих по крайней мере не более чем двухкубитовым состояниям, для времени декогерентизации которых можно обеспечит достаточно большие значения (**третье** основное требование), используя определенные методы подавления декогерентизации.

6. Произвольная суперпозиция векторов базисных состояний, возникающая в процессе выполнения квантовых операций в результате случайных воздействий, представляет собой сумму с комплексными коэффициентами, называемыми **фазорами** [2.15]. Для отдельного квантового регистра это приводит к трудностям, отмеченным С.Кэком. Однако в случае ансамблевого варианта квантового регистра, в результате усреднения по ансамблю эта суперпозиция будет содержать усредненные по ансамблю фазоры, характеризующиеся определенными **усредненными значениями амплитуд и фаз**.

Если, например, для проведения этого усреднения воспользоваться следующими упрощениями: амплитуда α_k / \sqrt{N} и фаза φ_k каждого элементарного фазора в ансамбле из N элементов статистически независимы друг от друга и от амплитуд и фаз фазоров других элементов, случайные амплитуды всех элементарных фазоров имеют одинаковые распределения со средним значением $\bar{\alpha}$ и вторым моментом $\overline{\alpha^2}$, случайные фазы распределены однородно на интервале $(-\pi, \pi)$. В этом случае среднее значение амплитуды по ансамблю N элементарных фазоров и дисперсия равны [2.15]

$$\bar{\alpha} = \sqrt{\pi \overline{\alpha^2}}, \quad \sigma^2 = (4 - \pi) \overline{\alpha^2}, \quad (2.13)$$

а средняя фаза равна нулю.

Заключение: *Исключение случайных аналоговых фазовых ошибок* в базисных состояниях квантового регистра **достигается** в результате быстрого процесса затухания недиагональных элементов матрицы плотности за счет процессов декогерентизации, в результате приведенные матрицы плотности чистых базисных состояний принимают вид матриц плотности **смешанного** состояния. Случайные фазовые множители со **случайными аналоговыми фазами** у составляющих суперпозиции базисных состояний в результате их усреднения при ансамблевом подходе становятся детерминированными комплексными коэффициентами, а **не усредненными остаются дискретные ошибки**, исправление которых доступно методам QECC.

2.3. Проблема уменьшения вероятности вычислительной ошибки для состояний квантового регистра, представляющих высшие разряды

Как отмечает в своей заметке М. Дьяконов [2.14], базисные состояния отдельных инициализированных кубитов во входном регистре должны быть заданы с *разной точностью*, поскольку “while physically the spins are equivalent, from the computational point of view it is not so”.

Вероятность *вычислительной ошибки* для кубитов, представляющих более высокие бинарные разряды в квантовом регистре, при том же значении ошибки для отдельного физического кубита действительно 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 в регистре (низший бинарный разряд) кубита. Возникает *проблема уменьшения вычислительной ошибки* при переходе от низших к высшим двоичным разрядам.

Для решения этой проблемы мы предлагаем вместо физических спинов-кубитов, соответствующих каждому двоичному разряду, использовать состояния *логических кубитов*, характеризующихся также двумя квантовыми состояниями (это могут быть в свою очередь не только физические, но и логические кубиты), кодируемых *блоком, состоящим из исходных физических кубитов* такого размера, чтобы обеспечить необходимое подавление ошибок состояний у логических кубитов, соответствующих высшим разрядам.

Это можно, в принципе, осуществить с помощью метода *связанных* (concatenated) кодов (см., например, книгу [2.6], гл.10), представляющих собой *иерархию* кодирующих схем с числом уровней иерархии, определяемых положением логического кубита в регистре и значением необходимой вычислительной точности для данного разряда.

Рассмотрим здесь эту иерархию подробнее, имея здесь 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 опущен). При переходе к следующему *первому* уровню, 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, $c \sim 10^5 - 10^6$ ([2.6], гл.10). На *втором* уровне иерархии ошибка уменьшается

до $c(cp^2)^2 = (c^2p^2)^2/c$. Если **связывание** (concatenation) производится k раз, то k -**ом уровне** иерархии вероятность ошибки будет $(cp)^{2^k} / c$.

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 кодирования. Выразим последнюю через вероятность ошибки исходного базисного состояния $-p2^{-(L-1)}$, а именно,

$$(cp)^{2^k} / c < p 2^{-(L-1)} \text{ или } (cp)^{2^{k-1}} < (1/2)^{(L-1)}, \quad (2.14)$$

откуда следует, что $cp < 1$ и, следовательно, предельное значение допустимой ошибки для состояния с одним «перевернутым» исходным кубитом должно составлять $p < 10^{-5}$.

Число связываний для L -го логического кубита k будет определяться теперь из:

$$k > \log_2 \left(\frac{L-1}{\log_2(1/cp)} + 1 \right) \sim \log_2(L-1). \quad (2.15)$$

Пусть теперь каждому разряду соответствует базисное состояние не с одним кубитом, а с логическим кубитом, закодированного соответствующим образом на первом уровне с помощью d (до десятка) физических кубитов. При этом число исходных физических кубитов на последнем k -ом уровне иерархии составит

$$\sum_{i=1}^k d^i \approx d^k = \left(\frac{L-1}{\log_2(1/cp)} + 1 \right)^{\log_2 d} \sim (L-1)^{\log_2 d}, \quad (2.16)$$

то есть **полиномиально** зависит от L . Так, например, для числа логических кубитов $L = 129$ согласно (2.15) получим иерархию связывающих кодов с $k > 7$, и 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 путем использования связывающего кодирования состояний различных двоичных разрядов на иерархии логических кубитов. Показано, что при этом число физических кубитов на последнем уровне иерархии **полиномиально** растет с числом разрядов L .

2.4. Проблемы, связанные с выполнением вычислительных операций и измерениями состояний кубитов

М. Дьяконов делает также пессимистическое утверждение, заключающееся в том, что **осуществление унитарной вычислительной операции** в системе из $L \sim 10^3$ спинов с точностью $\sim 10^{-5}$ **невозможно**, в частности, невозможен контролируемый поворот отдельного

спина, направленного вначале вдоль оси z ($|0\rangle$), в фиксированное направление плоскости xu , “because of the continuous fast precession around the direction of the magnetic field” [2.15].

На самом деле поворот i -го ядерного спина-кубита (или **вектора Блоха**), изначально ориентированного вдоль оси z , в плоскость xu осуществляется с помощью резонансного для рассматриваемого спина радиочастотного $\pi/2$ импульса круговой поляризации и соответствует образованию в лабораторной системе координат суперпозиции состояний, например, типа $|\psi\rangle = \sqrt{1/2} (|0\rangle + \exp(-i\omega_0 t)|1\rangle) \exp(i\varphi_{0i})$, где $\omega_0 = \gamma B$ — резонансная частота и φ_{0i} — общая фаза состояний кубитов. При достаточно точной настройке резонансная частота **вполне контролируема** и в случае ансамблевого варианта она имеет определенное одно и то же значение для всех эквивалентных кубитов в ансамбле. Другое дело, когда сама унитарная операция содержит ошибки (см. выше). Здесь важно еще и другое: матричные элементы матрицы плотности для суперпозиции базисных состояний, как уже отмечалось ранее в разделах **1.1** и **2.2 вообще не содержат общего фазового множителя**:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = 1/2 \begin{vmatrix} 1 & \exp(i\omega_0 t) \\ \exp(-i\omega_0 t) & 1 \end{vmatrix}, \quad (2.17)$$

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 xu ($P_- = 1/2$) и наличие быстрой прецессии вектора состояний в отсутствие случайной модуляции резонансной частоты **не приводит к неконтролируемому разбросу направлений вектора Блоха** в этой плоскости. Эксперименты на жидкостных ансамблевых ЯМР квантовых компьютерах это наглядно подтверждают.

Роль **разности временных зависимостей фаз** векторов состояний физических кубитов-спинов $|0_i\rangle$ и $|1_i\rangle$, определяемых разностью их энергий $\pm\omega_{0i}/2$, М.Дьяконов относит к наиболее фундаментальным трудностям.

Для пояснения он рассматривает одно из базисных состояний регистра, в котором отдельные кубиты имеют одну и ту же резонансную частоту $\omega_{0i} = \omega_0$. Вектор состояния регистра $|0_1, 0_2, 1_3, 0_4, \dots, 1_L\rangle$, в котором k кубитов находится в состоянии $|1_i\rangle$, будет иметь одинаковый фазовый множитель $\exp(ik\omega_0 t)$ на фоне общего множителя, соответствующего состояниям $|0_i\rangle$.

Поэтому **разные с вычислительной точки зрения**, но с одним и тем же числом k , базисные состояния, такие как $|1_1, 0_2, 1_3, 0_4, \dots, 1_L\rangle$ и $|0_1, 1_2, 1_3, 0_4, \dots, 1_L\rangle$, представляющие разные числа, имеют одну и ту же фазу и **с физической точки зрения одинаковы**. Произвольная суперпозиция из состояний с разным числом k имеет набор фазовых множителей с $1 \leq k \leq L$ и из-за неконтролируемости с точки зрения М.Дьяконова их фаз зависимость от времени со-

стояния имеет случайный характер, из чего он делает вывод о невозможности сохранить когерентность такого состояния в момент выполнения вычислительных операций: “relative phases will have random values at the moments when our gates are applied, which will completely disorganize the performance of our quantum computer”.

На самом деле, с точки зрения выполняемых квантовых операций базисные состояния регистра удобнее описывать не векторами состояния, а матрицами плотности, которые, как известно, для всех чистых состояний в вычислительном базисе имеют только *одно вещественное* собственное значение и не содержат вообще никаких фазовых множителей.

Фазовые множители могут появиться в определенных состояниях у недиагональных элементов матрицы плотности, описывающих образование когерентных суперпозиций в процессе выполнения унитарных преобразований. Они вполне контролируются управляющими импульсами. Разрушение когерентности будет происходить за счет общих процессов декогерентизации, которые в принципе могут быть подавлены до необходимого уровня.

При выполнении вычислительных операций существенное значение имеет избирательное обращение к отдельным кубитам регистра, которые для этого должны иметь либо *отличающиеся резонансные частоты*, либо они должны быть *пространственно разделены*, для того, чтобы резонансный импульс мог воздействовать только на вполне определенный спин. В этом случае состояния регистра $|1_1, 0_2, 1_3, 0_4 \dots 1_L\rangle$ и $|0_1, 1_2, 1_3, 0_4 \dots 1_L\rangle$ будут *различными не только с вычислительной, но и с физической точки зрения*, поскольку в процессе выполнения квантовых операций резонансные частоты и фазы спинов в резонансных и нерезонансных состояниях $|1_i\rangle$ будут отличаться.

Конечно, резонансные переходы для одного спина могут вызывать *нерезонансные переходы* в регистре у спинов с другой резонансной частотой и генерировать в регистре *нежелательные* осциллирующие состояния кубитов. Однако вклад их можно минимизировать выбором параметров импульсов [2.16].

Наконец, М. Дьяконов считает *непреодолимой задачей одновременного измерения* состояний большого числа ($L > 10^3$) спинов, 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 ([2.6] гл.10).

Измерение же состояний логических кубитов необходимо производить лишь *на выходе компьютера*, где указанная *высокая точность не нужна*.

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 *однокубитовых приведенных матриц плотности выходного регистра* $\rho_k = \text{Sp}_{i \neq k} |\psi_L\rangle\langle\psi_L|$ в базисе $|0_k\rangle$ и $|1_k\rangle$, а *не одновременно* всех 2^L коэффициентов суперпозиции полной матрицы плотности $|\psi_L\rangle\langle\psi_L|$, то есть, как и на выходе классического цифрового компьютера. Более существенным здесь представляется вопрос о том как произвести это измерение в каждом конкретном случае. Здесь существенное значение может иметь опять 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 и что является классическим пределом квантового компьютера. С его точки зрения “the classical limit of the quantum computer is a classical analog machine”.

Нам представляется, что решение вопроса о том, где граница между квантовым и классическим компьютером определяется, не только “by taking into account the effects of finite temperature, finite precision of our unitary transformations, or finite accuracy of our measurements”, как пишет М.Дьяконов, но в большей степени ролью которую играют свойство *суперпозиции* и *запутанности* квантовых состояний, *квантовый параллелизм и квантовый характер динамики кубитов*, которые, в конечном счете, и определяют эффективную величину необходимой предельной точности выполнения отдельной квантовой операции. В классическом пределе их роль в системах из двухуровневых элементов отсутствует, кубиты становятся обычными битами, а компьютер классическим цифровым.

Заключение: Показано, что 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. Отмечено, кроме того, что 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 проблема подавления процессов декогерентизации квантовых состояний, исправления случайных ошибок, организации помехоустойчивых квантовых вычислений, а также проблема измерения конечного

квантового состояния. Отмечается, что их решение для ЯМР квантовых компьютеров *облегчается при ансамблевом подходе*.

2.5. 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*, допускающий переход к *произвольному числу кубитов* L , был предложен в Австралии Б.Кейном в 1998 году [2.17]. Интенсивные теоретические и экспериментальные исследования возможности создания такого компьютера развернуты в настоящее время в специально созданном для этих целей Австралийском центре технологии квантовых компьютеров [2.18-2.20].

Согласно предложенной Кейном схеме в приповерхностный слой МОП-структуры, образованной на подложке изотопно-чистого кремния ^{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).

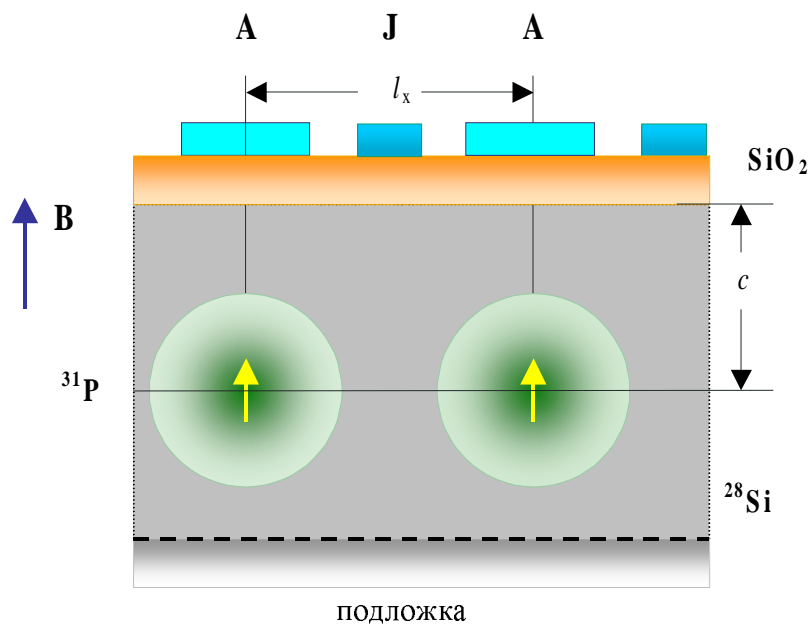


Рис. 2.1. Схематическое изображение двух ячеек полупроводниковой структуры модели Кейна с ядерными спинами-кубитами донорных атомов ^{31}P .

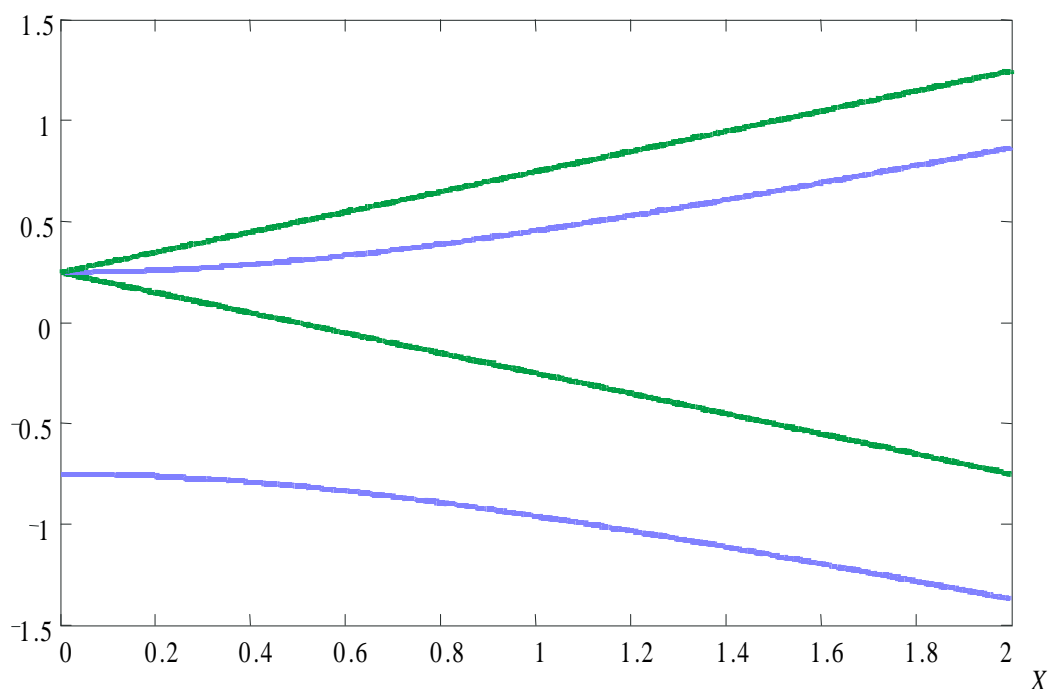
При температурах $T < 0,1$ К донорные атомы не ионизированы и находятся в основном орбитальном S-состоянии, а электронные спины в полях порядка нескольких тесла практически полностью поляризованы. Гамильтониан спиновой системы донора ^{31}P имеет вид:

$$\mathbf{H} = \omega_S \mathbf{S}_z \otimes \mathbf{1} - \omega_I \mathbf{1} \otimes \mathbf{I}_z + A \mathbf{I} \mathbf{S}, \quad (2.18)$$

где $A/2\pi = 117,53$ МГц [2.21] — постоянная сверхтонкого взаимодействия, $\omega_I = \gamma_I B$, $\omega_S = \gamma_S B$,

$$\gamma_I = 108 \text{ радМГц/Тл}, \gamma_S = 176 \text{ радГГц/Тл}, \zeta = \frac{\gamma_I}{\gamma_I + \gamma_S} = 0,382 \cdot 10^{-3}.$$

а)



б)

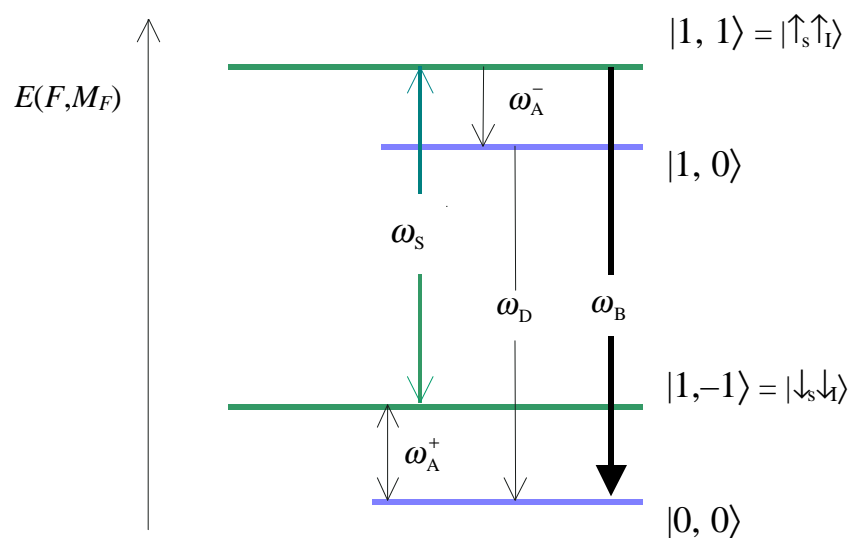


Рис. 2.2 а) Энергетический спектр электрон-ядерной системы донорного атома ^{31}P (2.19).
б) Схема энергетических уровней донорного атома и обозначение состояний. Переходы на частоте ω_S в первом приближении запрещены.

Собственные значения гамильтониана (2.18) описываются формулой Брейта-Раби (Рис. 2.2)

$$E(F, M_F, X) = -A \left\{ \frac{1}{4} + \zeta X M_F + (-1)^F \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(1 + M_F X) \sqrt{1 + 2M_F X + X^2} \right\}. \quad (2.19)$$

или

$$E(F, 0, X) = -A \left\{ \frac{1}{4} + (-1)^F \frac{1}{2} \sqrt{1+X^2} \right\}, \quad E(1, \pm 1, X) = A \left\{ \frac{1}{4} \mp \left(\zeta - \frac{1}{2} \right) X \right\}, \quad (2.20)$$

где

$$X = (\omega_I + \omega_S)/A \approx \omega_S/A, \quad (2.21)$$

$F = I \pm 1/2 = 0, 1$, $M_F = M + m$, $M_0 = 0$, $M_1 = \pm 1, 0$, $M, m = \pm 1/2$ — проекции электронных и ядерных спинов на ось z, гироманнитные отношения ядерного спина ^{31}P и спина электрона.

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, ω_A^\pm (радиочастота) — в основном ядерным переходам.

При температурах $T < 0,1$ К и при $X \approx \gamma_S B/A \gg 1$ заселенными будут только два низших энергетических уровня, между которыми происходят резонансные переходы на частоте

$$\omega_A^+ = E(1, -1) - E(0, 0) \approx A/2 + (\omega_I - \omega_S)/2 + (A/2)\sqrt{1+X^2} \approx A/2 + \omega_I - \frac{A^2}{4\omega_S} \quad (2.22)$$

При $B \sim 3$ Тл резонансная частота $\omega_A^+ \sim 100$ рад МГц.

Состояния

$$|1, 0\rangle = \sqrt{1-\alpha} |\uparrow_s \downarrow_I\rangle + \sqrt{\alpha} |\downarrow_s \uparrow_I\rangle, \quad |0, 0\rangle = \sqrt{\alpha} |\uparrow_s \downarrow_I\rangle - \sqrt{1-\alpha} |\downarrow_s \uparrow_I\rangle, \quad (2.23)$$

где

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{X}{\sqrt{1+X^2}} \right), \quad (2.24)$$

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 $\alpha \approx 1/2$ и 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 **A**, шириной $a \sim c$.

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.

Для выполнения унитарных операций над кубитами предполагается использовать стандартную импульсную технику ЯМР, для измерения состояний отдельных кубитов высоко-

чувствительные методы, например, основанных на использовании *одноэлектронных транзисторов* [2.22].

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, и к случайному *разбросу значений резонансных частот*. Поэтому точная настройка постоянной сверхтонкого взаимодействия представляет собой достаточно *трудную проблему*.

Взаимодействие ядерных спинов доноров с поляризованными 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 **2.8.5** применительно к ансамблевому варианту ЯМР квантового компьютера.

Помимо кремния в рассматриваемой схеме могут быть использованы при должной очистке и другие безспиновые полупроводниковые материалы и структуры, как, 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, которые сами по себе являются кубитами, а их число L в регистре, 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 [2.23], что позволяет достаточно долго сохранять исходные базисные состояния квантового регистра как неравновесные.

Заключение: При несомненных преимуществах схемы Кейна она обладает *определенными трудностями*. Они состоят в основном в следующем:

1. Для инициализации состояний кубитов потребуются либо *очень низкие температуры ядерных спинов* (< 1 мК), либо специальные методы динамической поляризации.

2. Сигнал, несущий информацию о состоянии ядерного спина индивидуального атома фосфора очень мал и требует разработки *исключительно высоко чувствительных 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 влияния процесса декогерентизации квантовых состояний кубитов, определяемого шумовыми *флуктуациями напряжения 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 **Ж** (см. ниже).

2.6. Исследование и развитие схемы Кейна ЯМР квантовых компьютеров

Первоначальная схема Кейна получила дальнейшее развитие и стала основой для ряда новых предложений по реализации полномасштабных ЯМР квантовых компьютеров, в которых рассматривались различные варианты преодоления отмеченных выше трудностей первоначальной схемы. Это, прежде всего работа самого Кейна [2.24].

Далее мы остановимся на результатах, полученных в наших исследованиях [2.25–2.31].

2.6.1. Эффект усиления сигнала ЯМР

Интенсивность ЯМР сигнала и скорость выполнения квантовых операций определяются резонансным значением *частоты Раби* [2.32]. В рассматриваемом случае она определяется амплитудой матричного элемента гамильтониана взаимодействия электрон-ядерной спиновой системы внешним радиочастотным полем $b_x(t) = 2b \cos(\omega_A^+ t)$, где b — амплитуда поляризованной по кругу составляющей радиочастотного поля (обычно ~ 1 мТл), вызывающего резонансные переходы между двумя нижними состояниями:

$$H_{\text{rf}}(t) = (\gamma_S S_x - \gamma_I I_x) b_x(t) = H_{\text{rf}} \cos(\omega_A^+ t). \quad (2.25)$$

Для резонансной частоты Раби получим выражение [2.30, 2.31]

$$\Omega = \gamma_I b_{\text{eff}}(X) = 2 |\langle 0,0 | H_{\text{rf}} | 1,-1 \rangle| = (\sqrt{\alpha} \gamma_S + \sqrt{1-\alpha} \gamma_I) b. \quad (2.26)$$

Частота Раби и b_{eff} имеют максимальное значение при $\alpha = 1/2$ ($X = 0$), далее она монотонно уменьшается до значения, соответствующего отдельному ядерному спину $\alpha = 0$. Поэтому с точки зрения квантовых операций предпочтительнее работать при относительно слабых полях, при которых $\gamma_S/\gamma_I \gg X \approx \omega_S/A \gg 1$ или $3,5 \text{ Тл} > B \gg 3,9 \cdot 10^{-3} \text{ Тл}$. В этом случае

$$b_{\text{eff}}(X) = (1 + \eta) b, \quad (2.27)$$

где $\eta = A/(2\omega_1) \gg 1$ — **коэффициент усиления** сигнала ЯМР в парамагнитных образцах, когда радиочастотное поле действует через поперечную составляющую электронной поляризации. Например, для магнитных полей $B = Tл$ мы имеем $b_{\text{eff}} = 4,4b$, а при $B = 0,01 Tл$ — значение $b_{\text{eff}} = 338b$. На существование эффекта усиления впервые было указано в работе К.Валиева [2.33].

Для описания динамики рассматриваемой двухуровневой системы с равновесной поляризацией ядерных спинов P_{z0} мы можем воспользоваться формально уравнением типа уравнения Блоха [2.30, 2.31]:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} + \frac{P_x \mathbf{i} + P_y \mathbf{j}}{T_{\perp}} + \frac{(P_z - P_0) \mathbf{k}}{T_{\parallel}} = \gamma_1 [\mathbf{P} \times \mathbf{B}_{\text{eff}}(t)], \quad (2.28)$$

в котором $\mathbf{B}_{\text{eff}}(t) = (\omega_A^+ / \gamma_1) \mathbf{k} + 2b_{\text{eff}} \cos(\omega_A^+ t) \mathbf{i}$ — эффективное магнитное поле, учитывающее эффект усиления.

Из анализа этого уравнения, подобного анализу решения стандартного уравнения Блоха [2.32] следует, что сигнал ЯМР **не может быть увеличен** за счет эффекта усиления сверх максимального значения, соответствующего отсутствию этого эффекта $P_{y \text{ max}} = \sqrt{T_{\perp} / T_{\parallel}} P_0 / 2$, которое в условиях резонанса достигается при $b_{\text{eff}} = 1 / \gamma_1 \sqrt{T_{\perp} T_{\parallel}}$.

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 позволит 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 тем самым увеличить скорость выполнения (тактовую частоту) этих операций.

При более точном рассмотрении эффекта усиления в твердотельном случае вместо уравнения (2.28) следует использовать обобщенное уравнение Блоха, учитывающее процессы последействия (см **Приложение П1** (П1.13)). Запишем его в виде

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} + \int_0^t f(\tau) \exp(i\omega_0 t) (P_x(t-\tau) \mathbf{i} + P_y(t-\tau) \mathbf{j}) d\tau + \frac{(P_z - P_0) \mathbf{k}}{T_{\parallel}} = [\mathbf{P} \times (\omega_0 \mathbf{k} + 2b \cos(\omega t) \mathbf{i})], \quad (2.29)$$

Переходя во **вращающуюся с частотой** ω_0 систему координат и пренебрегая противоположно вращающейся компонентой переменного поля, для изображения Лапласа

$$\mathbf{P}(p) - P_0 \mathbf{k} / p = \int_0^{\infty} (\mathbf{P}(t) - P_0 \mathbf{k}) \exp(-pt) dt \quad (2.30)$$

с равновесным значением вектора Блоха в начальный момент $P(t=0) = P_0 \mathbf{k}$ будем иметь систему уравнений

$$\begin{aligned}
(p + F(p))P_x + (\omega - \omega_0)P_y(p) &= 0, \\
(p + F(p))P_y - (\omega - \omega_0)P_x(p) - \gamma_1 b P_z &= 0, \\
(p + 1/T_{\parallel})P_z(p) + \gamma_1 b P_y(p) &= P_0 / pT_{\parallel} + P_0,
\end{aligned} \tag{2.31}$$

где $F(p) = \int_0^t f(t) \exp(-pt) dt$.

Откуда в частности получим

$$P_y(p) = \frac{-\gamma_1 b (p + F(p))}{\Delta(p)} P_0 (1 / pT_{\parallel} + 1), \tag{2.32}$$

где

$$\Delta(p) = (p + F(p))[(p + F(p))(p + 1/T_{\parallel}) + (\gamma_1 b)^2] + (\omega - \omega_0)^2 (p + 1/T_{\parallel}). \tag{2.33}$$

При условии резонанса $\omega = \omega_0$ найдем

$$P_y(p) = \frac{\gamma_1 b P_0 (1 / pT_{\parallel} + 1)}{(p + F(p))(p + 1/T_{\parallel}) + (\gamma_1 b)^2}. \tag{2.34}$$

Перейдем теперь от изображения к оригиналу

$$P_y(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} \exp(pt) P_y(p) dp = P_y(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} \frac{\gamma_1 b P_0 (1 / pT_{\parallel} + 1) \exp(pt)}{(p + F(p))(p + 1/T_{\parallel}) + (\gamma_1 b)^2} dp \tag{2.35}$$

Стационарное значение этого интеграла определяется выражением [2.34]:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{y \max}(t) = \lim_{p \rightarrow 0} p P_y(p) = \frac{\gamma_1 b P_0 / T_{\parallel}}{F(0) / T_{\parallel} + (\gamma_1 b)^2}. \tag{2.36}$$

Его максимальное значение достигается при

$$(\gamma_1 b) = \sqrt{F(0) / T_{\parallel}}. \tag{2.37}$$

Функция памяти в виде $f(t) = \langle \Delta \omega^2 \rangle \exp(-t/\tau_C)$ имеет изображение $F(p) = \langle \Delta \omega^2 \rangle / (p + 1/\tau_C)$, $F(0) = \langle \Delta \omega^2 \rangle \tau_C$. Для максимального стационарного значения получим

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{y \max}(t) = \frac{P_0}{2} \frac{1}{\sqrt{\langle \Delta \omega^2 \rangle \tau_C T_{\parallel}}}. \tag{2.38}$$

Реально это соответствует значениям времени $t > \max(T_{\parallel}, \tau_C, (\langle \Delta \omega^2 \rangle \tau_C)^{-1})$.

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 очень медленно). В выражении (2.34) следует заменить $p + F(p) \approx p + \langle \Delta \omega^2 \rangle / p$, $p + 1/T_{\parallel} \approx p$. В результате максимальное стационарное значение

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{y \max}(t) = \frac{P_0}{2} \frac{1}{\sqrt{\langle \Delta \omega^2 \rangle T_{\parallel}^2}} \tag{2.39}$$

будет достигаться при $(\gamma_1 b)^2 = \langle \Delta \omega^2 \rangle$.

В обоих случаях мы получаем выражение типа $P_{y \max} = \sqrt{T_{\perp} / T_{\parallel}} P_0 / 2$ 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 случае быstroфлуктуирующей и медленно флуктуирующей решетки.

2.6.2. 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.

Гамильтониан такой системы с одинаковыми значениями постоянных сверхтонкой структуры запишем в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \gamma_S \mathbf{B} (\mathbf{S}_a + \mathbf{S}_b) + J (\mathbf{S}_a \mathbf{S}_b) + \Delta \hat{H}, \\ \Delta \hat{H} &= \hat{H}_a + \hat{H}_b = -\gamma_I \mathbf{B} (\mathbf{I}_a + \mathbf{I}_b) + A (\mathbf{I}_a \mathbf{S}_a + \mathbf{I}_b \mathbf{S}_b), \end{aligned} \quad (2.40)$$

где спиновые операторы в матричной форме имеют вид

$$\mathbf{S}_a \equiv (\mathbf{1} \otimes \mathbf{S}_a) \otimes \hat{\mathbf{1}}, \quad \mathbf{S}_b \equiv \hat{\mathbf{1}} \otimes (\mathbf{1} \otimes \mathbf{S}_b), \quad \mathbf{I}_a \equiv (\mathbf{I}_a \otimes \mathbf{1}) \otimes \hat{\mathbf{1}}, \quad \mathbf{I}_b \equiv \hat{\mathbf{1}} \otimes (\mathbf{I}_b \otimes \mathbf{1}), \quad (2.41)$$

где $\hat{\mathbf{1}}$ — единичная матрица 4×4 , $\mathbf{1}$ — единичная матрица 2×2 , $\mathbf{B} = B \mathbf{k}$.

Опуская пока взаимодействие с ядерными спинами, которое является малым возмущением, для собственных значений гамильтониана в нулевом приближении получим выражение

$$E_0(S, M) = \omega_S M + J [S(S+1)/2 - 3/4]. \quad (2.42)$$

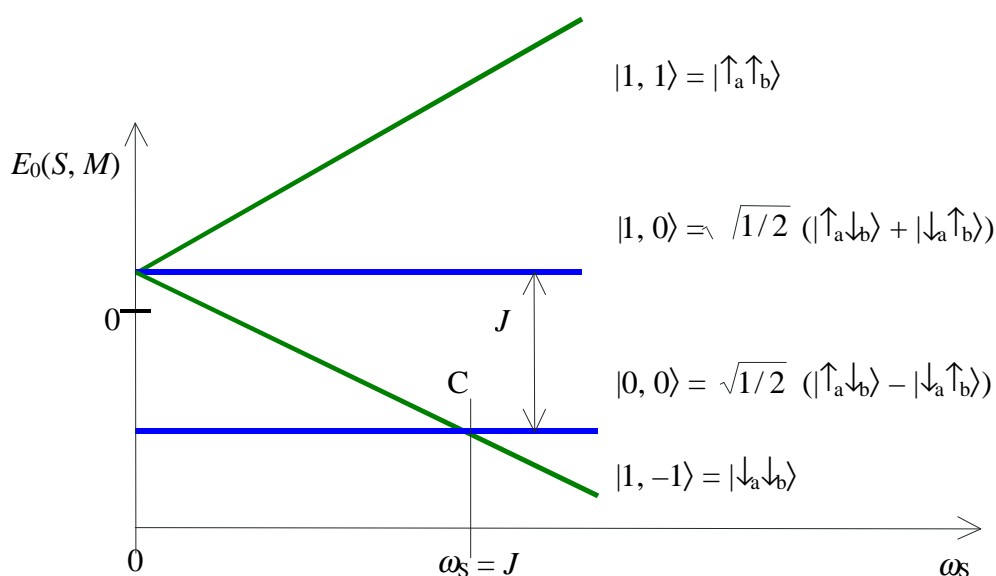


Рис. 2.3. Уровни энергии двух взаимодействующих электронных спинов

Оно описывает три триплетных ($S=0, M=\pm 1, 0$) и один синглетный ($S=0, M=0$) уровня энергии, подобно рассмотренному ранее выражению (1.27), 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.

Поскольку гамильтониан симметричен относительно перестановки доноров а и b, то его собственные состояния распадаются на **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 $[S_{za} + S_{zb} + I_{za} + I_{zb}, \hat{H}] = 0$, то проекция полного ядерного спина m и электронного M на направление магнитного поля $m_a + m_b + M_a + M_b = m + M$ является сохраняющейся величиной и поэтому матрица 16×16 , представляющая гамильтониан (2.40) 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 , был приведен нами в [2.27-2.29].

Однако наибольший интерес представляет поведение уровней вблизи **точки пересечения** невозмущенных уровней С (Рис. 2.3), где возможен более простой анализ, приведенный нами в книге [2.2].

Сверхтонкая структура энергетического спектра «двухатомной молекулы» вблизи точки пересечения синглетного и триплетного уровня С при $\omega_S = J$ в модели Кейна играет **важную роль**. В области пересечения двух уровней достаточно весьма слабых возмущений для того, чтобы произошла **раздвижка пересекающихся уровней (антипересечение)**, имеющих одинаковую симметрию [2.35].

В точке пересечения С встречаются только **три из четырех** состояний неприводимой совокупности $|S, M; I, m\rangle$ с $m + M = -1$: $|1, -1; 1, 0\rangle, |1, -1; 0, 0\rangle, |0, 0; 1, -1\rangle$ и **три из шести** состояний неприводимой совокупности с $m + M = 0$: $|0, 0; 0, 0\rangle, |0, 0; 1, 0\rangle, |1, -1; 1, 1\rangle$. Оставшиеся одно и три 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 С возникают **антипересечения**. 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 вы-

шележащих состояний соответствующих неприводимых совокупностей и в области пересечения приводит лишь к сдвигу уровней.

В случае 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 в представлении этих трех состояний принимает следующий вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} J/4 - \omega_s & 0 & 2^{-3/2} A \\ 0 & J/4 - \omega_s & 2^{-3/2} A \\ 2^{-3/2} A & 2^{-3/2} A & \omega_1 - 3J/4 \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

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 $|1, 0; 1, -1\rangle$ [2.36] оказывается, что эта энергия приобретает 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

$$E_{\pm}^a = (-J/2 - \omega_s + \omega_1)/2 \pm \sqrt{(J - \omega_s - \omega_1)^2/4 + (A/2)^2}. \quad (2.44)$$

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

$$\omega_J = E(1, -1) - E_-^a = \frac{(A/2)^2}{\omega_s - J} - \frac{(A/2)^2}{\omega_s}. \quad (2.45)$$

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 $|1, -1\rangle$, которое контролируется затвором **J**. Для значений $B = 2$ Тл, $\omega_s = 57$ рад ГГц и $J = 30$ рад ГГц $< \omega_e$ имеем $\omega_J = 75$ рад кГц $\ll \omega_A^+ \sim 100$ рад МГц.

В первоначальной схеме Кейна [2.17] предполагалось использовать именно эти два уровня в качестве «рабочих» для организации двухкубитовых операций, а также процесса измерения конечного состояния кубита.

Как видно из Рис. 2.4 адиабатическое увеличение параметра J или уменьшение величины поля B приводит при прохождении точки С справа налево к переходу нижнего антисимметричного состояния электрон-ядерной системы с $M + m = -1$ из триплетного электронно-

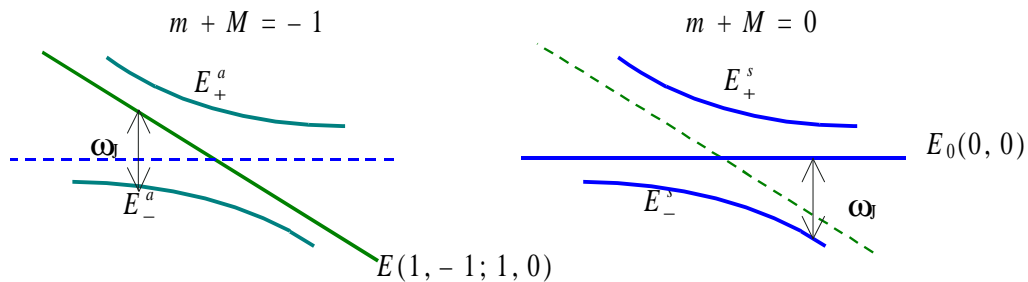


Рис. 2.4. Два типа пар антипересекающихся уровней вблизи точки С.

го 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** $|0, 0\rangle$ в **триплетное незапутанное** состояние $|1, -1\rangle$, 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. Оба **не генерируют ЯМР сигнал** и требуются другие 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 [2.17] и **может быть измерено** с помощью высокочувствительных одноэлектронных емкостных методов.

После прохождения точки С энергия перехода из вышележащего электронного триплетного состояния в основное синглетное состояние при триплетных состояниях ядерных спинов определяется теперь величиной $\sim (J - \omega_S)$.

Нами была рассмотрена также пара **антипересекающихся симметричных** состояний с $m + M = 0$, которая имеет собственные значения [2.2, 2.27, 2.28]:

$$E_{\pm}^s = (J/2 - \omega_S + \omega_1)/2 \pm \sqrt{(J - \omega_S + \omega_1)^2/4 + (A/2)^2}, \quad (2.46)$$

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, полная проекция изменяется на единицу, что 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 ЯМР сигнал*, для измерения которого могут быть использованы резонансные методы. Это имеет значение для рассматриваемых далее ансамблевых методов измерения сигнала.

2.6.3. Электрический контроль состояний кубитов

Анализ зависимости постоянной структуры от электрического потенциала для разных форм затворов был проведен нами в [2.25-2.29]. При относительно малых значениях потенциала V эта зависимость имеет колоколообразный характер вида $\Delta A(V)/A \approx -(V/V_0)^2$, где V_0 – постоянная, определяемая геометрическими параметрами затвора и поляризуемостью донорного атома χ , $1/V_0^2 \approx \chi/(4a^2\delta E)$. При $a \sim c$, $\chi = 4 \cdot 10^{-32}$ Фсм² и характерном расстоянии до возбужденных электронных уровней донора $\delta E \approx 0,04$ эВ = $6,4 \cdot 10^{-21}$ Дж мы получаем оценку $(a/V_0)^2 \approx 6 \cdot 10^{-12}$ (В/см)⁻² [2.26, 2.27].

При использовании импульсных радиочастотных воздействий на ядерные спины, имеющих обычно ширину полосы $\sim 10^4$ Гц, относительное изменение резонансной частоты (~ 100 МГц) под действием электрического потенциала на затворе составит $\Delta\omega_A^+(V)/\omega_A^+ = \Delta A(V)/A \approx -(V/V_0)^2 \sim 10^{-4}$. При геометрических параметрах $a \sim c \sim 10$ нм для значений напряжения на затворах получим $V \sim 10^{-2}$ В.

Относительная среднеквадратичная ошибка в значении резонансной частоты, обусловленная разбросом значений постоянной сверхтонкой структуры $\overline{(\delta\omega_A^+)^2}/(\omega_A^+)^2 = \overline{(\delta A)^2}/A^2$, в конечном счете определяется среднеквадратичной неточностью значения потенциала на затворах $\overline{(\delta V)^2}/V^2$, неточностью геометрических параметров a и c и неточностью расположения донорных атомов как по глубине (ось z) так и в плоскости под затворами (ось x). Так для среднеквадратичной ошибки параметра V_0 , связанной только с неточностью размещения атомов в плоскости при геометрических параметрах $a \sim c$ будем иметь $\overline{(\delta V_0)^2}/V_0^2 \approx \overline{(\delta z)^2}/a^2$ [2.25, 2.26].

Если принять, в соответствии с общими требованиями к полномасштабным квантовым компьютерам, что $\sqrt{\overline{(\delta\omega_A^+)^2}/(\omega_A^+)^2} \approx 2(V/V_0)^2 \sqrt{\overline{(\delta z)^2}/a^2} \leq 10^{-4} - 10^{-5}$, то получим, что *ошибки в расположении доноров* по оси z должны быть по крайней мере *на порядок меньше пара-*

метра а. Аналогичные выводы следуют относительно неточности расположения доноров в плоскости x и погрешности геометрических параметров. Погрешность значения потенциала на затворе \mathbf{A} должна быть на порядок меньше напряжения V .

Необходимое расстояние между кубитами в цепочке $l_x \sim 20$ нм определяется из требования, согласно которому постоянная косвенного взаимодействия между электронными спинами соседних донорных атомов (гайзенберговского типа) $J > 0$, обусловленная перекрытием электронных волновых функций, могла бы контролироваться с помощью потенциала на затворах \mathbf{J} . В поле $B = 2$ Тл значение $J(l_x)$, при котором имеет место пересечение электронных спиновых уровней, соответствует в кремнии расстоянию между атомами $l_x \sim 10 - 20$ нм [2.17], а в случае германия при определенной ориентации осей симметрии по нашим оценкам [2.25, 2.26] она может быть порядка 25 – 50 нм.

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 от наличия механических напряжений в полупроводниковой структуре [2.37].

Б.Кейном был предложен также вариант кремниевого ЯМР квантового компьютера [2.24], 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 происходит 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. 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 является также 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 предлагается использовать некоторую структуру, названную *спиновым рефрижератором*.

Описанная идея Кейна развивается далее в статье Б.Кейна с сотрудниками [2.38]. 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 и постоянная сверхтонкого взаимодействия практически обращается в нуль. Это позволяет с помощью затворов **A** осуществлять нечувствительный к ошибкам настройки состояний их дискретный цифровой контроль, когда сверхтонкое взаимодействие либо включено, либо выключено для каждого тактового цикла. Авторы статьи [2.38] предлагают кодировать состояния 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 разложить на инвариантные подпространства, характеризующиеся проекцией полного спина. Внутри каждого подпространства переворот ядерного спина сопровождается поворотом 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 одного из спинов, что соответствует нерезонансным переходам. Как видно из (2.18) вклады сверхтонкого взаимодействия и магнитного поля имеют сравнимую величину ($X \sim 1$) в полях порядка 1 мТл и поэтому рабочими полями в этом случае будут слабые поля.

Основными недостатками предложенной в [2.38] модификации схемы Кейна путем перехода к миллитесловым постоянным полям является на наш взгляд необходимость понижения спиновых температур до микрокельвиновых значений, сохранение индивидуального обращения к отдельным кубитам и необходимость дополнительного повышения уровня очистки материала от парамагнитных примесных центров для подавления декогерентизации состояний ядерных спинов в слабых полях.

Заключение: 1. Показано, что эффект усиления сам по себе не позволяет превысить 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. Показано, что из необходимости обеспечения необходимой точности выполнения квантовых операций следуют достаточно *жесткие требования к геометрическим параметрам* наноструктуры (ошибки в размерах затворов, положениях донорных атомов и т. д. должны быть меньше 10%).

Общий вывод состоит в том, что, несмотря на ряд предложенных модификаций схемы Кейна, направленных, в частности, на преодоление трудностей, связанных с контролем косвенного взаимодействия между соседними ядерными спинами-кубитами, основные проблемы схемы Кейна, касающиеся инициализации и характера измерений состояний кубитов *в рамках индивидуального подхода не находят радикального решения.*

2.7. Варианты многокубитовых ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров

Для преодоления отмеченных в разделе 2.5 трудностей заманчивым представляется использование уже продемонстрированного в жидкостных квантовых компьютерах *ансамблевого подхода*, позволяющего путем перехода к ансамблю эквивалентных параллельно работающих компьютеров, решить проблему с фазовыми множителями, использовать стандартные методы ЯМР для измерения сигнала на выходе компьютера, использовать динамические методы поляризации ядерных спинов (охлаждение спиновой системы). Было предложено несколько различных твердотельных ансамблевых вариантов. Рассмотрим здесь кратко те из них, которые относятся к ЯМР квантовым компьютерам.

2.7.1. Ансамблевый твердотельный ЯМР квантовый компьютер с двухмерным электронным газом

Один из первых вариантов ансамблевого твердотельного ЯМР квантового компьютера был предложен еще до появления модели Кейна [2.39]. Модель представляет собой *цепочку 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 $e^2/(2\pi\hbar)$, где e — заряд свободного электрона (цело-

численный 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 $l_H = (\hbar/eB)^{1/2}$. Она 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 двумерного электронного газа. Это взаимодействие экспоненциально затухает с расстоянием r с характерной длиной l_H [2.40].

Для выполнения двухкубитовых операций желательно 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 только между спинами соседних атомов. Для этого расстояние между атомами должно быть 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 до состояния, способного локально нарушить когерентность двумерного электронного газа, а с ней и косвенное взаимодействие между спинами в паре. Предполагается, что дифференциация резонансных частот может быть также достигнута путем использования примесей различного типа, помещая их вблизи или окружая ими ядерные спины. Квантовые операции будут выполняться одновременно параллельно на всех группах соответствующим образом настроенных спинов. Односпиновые 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 частности, в [2.40] предлагается *ансамблевый* метод, аналогичный используемому в жидкостных квантовых компьютерах, то есть путем измерения среднего значения сигнала, создаваемого действующими параллельно копиями спиновых цепочек (аналоги молекул в жидкостном варианте). Были предложены также схемы измерения конечных состояний и коррекции ошибок, отличные от используемых при ЯМР. 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 на наш взгляд являются

- а) наличие присущих ему механизмов декогерентизации ядерных спинов, обусловленных наличием примесных атомов, гетеропереходов, декогерентизацией электронных состояний в двумерном электронном газе,
- б) сохранение проблемы инициализации состояний ядерных спинов.

2.7.2. Ансамблевый ЯМР квантовый компьютер на естественных кристаллах

Рассмотренные выше варианты, как и модель Кейна, предполагают создание определенных **искусственных наноструктур**. Особняком стоит вариант ансамблевого компьютера, предложенный в [2.41]. В качестве кубитов в нем рассматриваются **ядерные спины фтора**, принадлежащие не искусственной структуре, а **естественному твердому кристаллу флюоропатита** ($\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$), которые располагаются в виде одномерных цепочек в параллельных плоскостях кристалла. Исходную поляризацию ядерных спинов предполагается достигать путем охлаждения кристалла до очень низких температур. Время релаксации ядерных спинов T_1 в этом случае в немагнитных кристаллах очень велико. 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 [2.7]. Другая проблема связана с необходимостью различать и детектировать ядерные спины в периодической структуре кристалла. Для ее решения предлагается использовать очень сильный статический одномерный в пределах кристалла градиент магнитного поля.

Предлагаемый квантовый компьютер состоит из ансамбля N одномерных цепочек, каждая из n ядерных спинов атомов ^{19}F с $I = 1/2$, в кристалле флюоропатита. Кристалл длиной 10 мкм и шириной 1 мкм монтируется 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. Время релаксации T_2 определяется механизмом диполь-дипольного уширения и если диполь-дипольное взаимодействие хорошо усредняется, то время декогерентизации будет приближаться к спин-решеточному времени релаксации T_1 , которое опре-

деляется тепловыми флуктуациями парамагнитных примесей и для достаточно хорошо очищенных кристаллов и низких температурах может достигать часов.

Эксперимент должен выполняться в высоком вакууме ($< 10^{-5}$ мм Нг). 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_j подвергаются действию радиочастотного поля, создаваемого катушке $b_x = 2b \cos\{\Omega \cos(\omega_m t) + \omega_j t\}$, где Ω — частота прохождения, которая должна быть меньше разности резонансных ядерных частот соседних цепочек $\Delta\omega$. Одновременное детектирование сигнала от многих плоскостей возможно при условии, если измерение для различных плоскостей производится на различных частотах модуляции ω_m . Сделанные 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 ^{28}Si создавались регулярные цепочки из атомов ^{29}Si , ядерные спины которых играли роль кубитов [2.42].

В [2.43] 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. Во-вторых, наличие достаточно большого ансамбля спинов позволяло бы не бояться проблем считывания и инициализации отдельных ядерных спинов.

Основной недостаток этого варианта связан с необходимостью создавать очень большие градиенты магнитного поля.

2.7.3. Ансамблевый ЯМР квантовый клеточный автомат

Основные принципы ансамблевого варианта твердотельного квантового компьютера, работающего по принципу *клеточного автомата*, обсуждались в ряде сообщений [2.44–2.47]. С.Ллойд [2.44, 2.46] рассмотрел систему из двухуровневых квантовых элементов, которыми могут быть и ядерные спины с $I = 1/2$, имеющую *периодическую* структуру типа

цепочки ABCABCABC..., где A,B,C — три различных типа ядерных спина с различающимися резонансными частотами. Предполагается, 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, зависимость резонансной частоты каждого спина от состояния соседних спинов. Так, например, резонансная частота ω_A спина A принимает значение ω_{01}^A , если спин C слева в основном состоянии 0, а спин B справа — в возбужденном (перевернутом) состоянии 1. Резонансный π -импульс на частоте ω_{01}^A будет переворачивать **одновременно все спины A** в периодической структуре, у которых спины слева и справа находятся, соответственно, в основном 0 и возбужденном 1 состояниях. При этом этот 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 ABC 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 кубита "1" — один из спинов ячейки находится в достаточно долго живущем неосновном возбужденном 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 может быть использован каскад унитарных операций обмена SWAP: $A \Rightarrow B, B \Rightarrow C, C \Rightarrow A, A \Rightarrow B, \dots$, действующих одновременно на все спины в периодической цепочке. Например, последовательность из π -импульсов с резонансными частотами $\omega_{10}^B, \omega_{11}^B, \omega_{01}^A, \omega_{11}^A, \omega_{10}^B, \omega_{11}^B$, производит передачу информации записанной на спине A (состояние 1) в некоторой ячейке ABC путем обмена состояниями между примыкающими спинами A и B (для спина A на конце цепочки π -импульс на другой частоте) во всей одномерной цепочке. В зависимости от того, в каком состоянии находятся спины C, то из шести импульсов работают только одна из троек [2.46].

В такой простой системе с помощью только соответствующей последовательности импульсов можно 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 [2.45], где рассматривалась периодическая структура типа ABCABCABC... в двух- и трехмерных структурах с ядерными спинами трех различных типов. 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 A, и имеющие отличную от всех других ядерных спинов резонансную частоту. Им может быть, в частности, один из трех атомов основного состава, если он находится на конце одномерной структуры, где он имеет только одного соседа с одной стороны. Этот примесный атом будет служить *портом* 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 A-спинам. Все операции будут выполняться селективным образом с помощью радиочастотных импульсов, если резонансные частоты 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 какому-либо 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 может содержать *более тысячи* кубитов. Независимые ЯМР квантовые компьютеры на таких искусственных 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 начальном 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" возможно производить с помощью методов ЯМР.

С.Бенжамин [2.47] показал, что для построения квантового компьютера, работающего на принципе клеточного автомата, достаточно *только двух* разных типов двухуровневых элементов — физических кубитов А и В, в частности, ядерных спинов, отличающихся резонансными частотами. Пусть каждый спин имеет основное $|\downarrow\rangle$ и возбужденное $|\uparrow\rangle$ состояния, которые могут образовывать и квантовую суперпозицию. В исходном состоянии состояния всех спинов инициализированы, то есть вся структура находится в состоянии $|\downarrow_A \downarrow_B \downarrow_A \dots \downarrow\rangle$, подобном двухподрешеточному ферромагнетику. Для кодирования битов квантовой информации здесь предлагается использовать состояние не трех, а четырех примыкающих спинов. Так логические состояния " $|0\rangle$ " и " $|1\rangle$ " 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 как однокубитовые так и двухкубитовые операции.

В качестве порта, где вводится и выводится информация, может быть использован некоторый донорный атом с отличающийся 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, что *вариант с чередующимися резонансными частотами, но с одинаковым направлением ядерных спинов*, на наш взгляд, не пригоден, поскольку из-за наличия отличной от нуля полной намагниченности, система будет *чувствительна к случайным внешним магнитным полям и граничным условиям*.

Если число спинов-кубитов, приходящихся на один порт (это и есть число кубитов L в этом случае) в линейной цепочке равно 10, то в двухмерном и трехмерном случаях, соответственно, их число будет 100 и 1000. Ансамбль большого числа N таких двухмерных и трехмерных параллельно работающих "искусственных молекул" в этом случае позволит обеспечить введение и считывание (измерение) информации ансамблевыми методами.

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 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 четырех физических кубитов обеспечивает более высокую степень помехозащищенности проводимых логических операций.

Переход к схеме квантовых клеточных автоматов позволяет преодолеть четвертую и пятую трудности схемы Кейна

К **недостаткам** можно отнести сравнительно сложную организацию логических операций над логическими кубитами.

Заключение: Вариант твердотельного ЯМР ансамблевого квантового компьютера с двумерным электронным газом требует использования высокоточной нанотехнологии (квантовые ямы и системы полосковых затворов), а варианты на естественных кристаллах предполагают использовать слишком большие градиенты магнитного поля.

Более перспективным представляется направление по разработке ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров с использованием **принципов квантового клеточного автомата**, которое потенциально допускает отказ от создания регулярных наноструктур в виде цепочки затворов.

2.8. Проблемы реализации ансамблевого кремниевого ЯМР квантового компьютера с полосковыми затворами

В этом разделе излагаются результаты исследований основных проблем, стоящих на пути реализации ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров с полосковыми затворами и показываются их преимущества перед схемой Кейна с индивидуальным обращением к кубитам.

2.8.1. Кремниевый ансамблевый ЯМР квантовый компьютер с полосковыми затворами

В качестве альтернативного варианта кремниевого многокубитового квантового компьютера, позволяющего преодолеть ряд трудностей схемы Кейна, нами было предложено использовать кремниевую структуру, содержащую **достаточно большой ансамбль** одинаковых «искусственных молекул» Кейна [2.25, 2.26, 2.2, 2.30, 2.31] с системой чередующихся полосковых (в отличие от модели Кейна) затворов шириной ≤ 10 нм типа **A** и **J** с двумерной периодической структурой из донорных атомов ^{31}P .

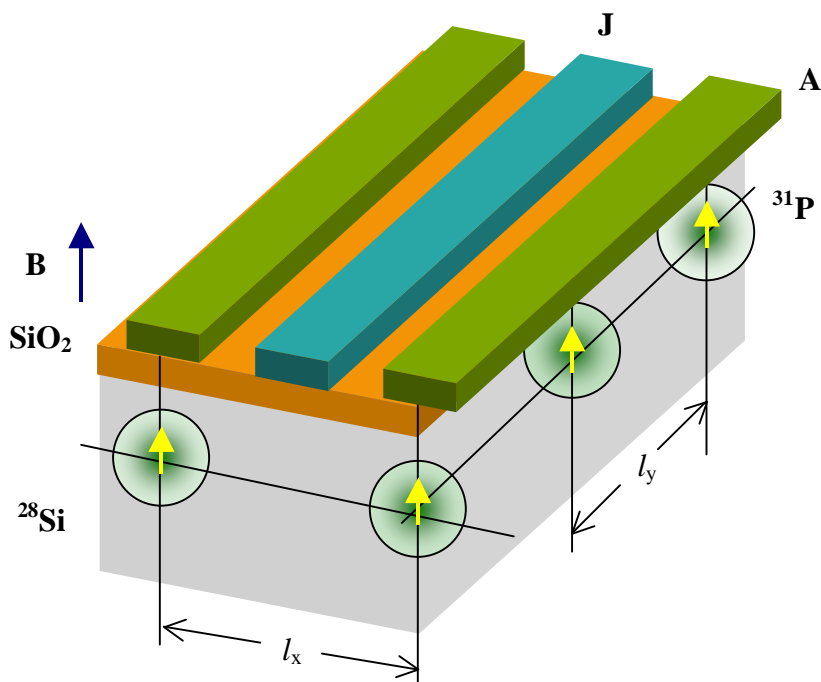


Рис. 2.5. Схема расположения донорных атомов ^{31}P под полосковыми затворами. Изображены две ячейки квантового регистра для трех элементов ансамбля.

Донорные атомы 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. 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). При этом можно ожидать, что из-за ансамблевого усреднения, в значительной снимаются трудности, связанные с нерегулярной осциллирующей зависимостью постоянной J от расстояния l_x между полосковыми затворами.

Здесь *возможны два случая*:

1. При значении $l_y \gg l$, когда косвенное спиновое взаимодействие между электронными спинами донорных атомов вдоль полосковых затворов (ось y) пренебрежимо мало, то есть $J(l_y) < T \ll \omega_S$, $J(l)$ 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 будет ниже показано, может быть *доступен измерению стандартными методами ЯМР*.

2. Более сложная ситуация возникает в случае, когда $l_y < l$, то есть, $J(l_y) \gg \omega_e$, $J(l) > kT$ и обменное взаимодействие между электронными спинами *вдоль полосковых затворов* способствует образованию искусственных двумерных донорных структур с *квазиодномерными антиферромагнитно упорядоченными* цепочками вдоль оси y , образуя две квазиодномерные магнитные подрешетки. При температурах значительно более низких, чем критическая температура Нееля в такой цепочке $T_{NS} \sim J(l_y)$, мы имеем *макроскопическое электронное спиновое квантовое состояние*.

При наличии внешнего поля, направленного по одному из направлений намагниченности подрешеток, ядерные резонансные частоты соседних ядерных спинов ω_A будут различны для каждой из магнитных одномерных подсистем под полосковым затвором: $\omega_A^\pm = |\omega_I \pm A/2|$, а ориентация ядерных спинов будет, соответственно, либо по полю, если $|\omega_I| > A/2$, либо по направлению электронного спина, если $|\omega_I| < A/2$.

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**.

Ядерные спины прецессируют в результирующем поле со слабо коррелированными фазами и не образуют чистого макроскопического квантового состояния. Для инициализации исходного состояния ядерных спинов нужно создать достаточно низкую спиновую температуру.

При $J(l) \ll \omega_S$ электронные спины в двух цепочках a и b под соседними полосковыми затворами в основном состоянии будут иметь одинаковую ориентацию (триплетные электронные состояния пар с $S = 1$, $M = M_a + M_b = -1$, Рис. 2.3), иначе говоря, основные состояния электронных спинов соседних антиферромагнитно упорядоченных цепочек будут в фазе.

Пусть теперь ядерные спины соседних цепочек благодаря различию постоянных сверхтонкого взаимодействия $A_a/2 < \omega_S < A_b/2$ (разные электрические потенциалы на затворах **A**) упорядочены по-разному. В цепочке a все ориентированы по направлению поля B ($m_a = +1/2$), а в соседней цепочке b — по направлению электронного спина, то есть для половины пар ядерных спинов из соседних цепочек имеет место $m_a = m_b = 1/2$, а для другой половины $m_a = -m_b = 1/2$. Путем адиабатического увеличения параметра J с помощью по-

тенциала на промежуточном полосковом затворе **J**, при прохождении точки пересечения электронных уровней, триплетные электронные пары двух соседних цепочек перейдут в синглетное состояние с $S = 0$, $M_a + M_b = 0$, то есть две антиферромагнитные цепочки оказываются сдвинутыми друг относительно друга на половину периода (будут в противофазе). В то же время электрон-ядерные пары двух соседних цепочек могут переходить из одного состояния в другое антипересекающееся состояние с одним и тем же значением полной проекции всех спинов: $m + M = m_a + m_b + M_a + M_b$ двумя способами, соответствующими двум значениям $m + M = 0, -1$. Соответственно, либо половина ядерных спинов а в парах с $m_a + m_b = 0$ будут переходить из состояния $m_a = 1/2$ в состояние $m_a = -1/2$ ($m_a + m_b = 0 \Rightarrow m_a + m_b = -1$), либо половина ядерных спинов b в парах с $m_a + m_b = 1$ будет переходить из состояния $m_b = 1/2$ в состояние $m_b = -1/2$ ($m_a + m_b = 1 \Rightarrow m_a + m_b = 0$). В результате в первом случае ядерные спины в цепочке а окажутся ориентированными в фазе со спинами в цепочке b, а во втором случае, все спины цепочки b будут иметь ориентацию, противоположную одинаково ориентированным спинам цепочки а. С помощью селективного радиочастотного π -импульса, настроенного на резонансную частоту одной из подрешеток ядерных спинов, можно будет инвертировать состояние соответствующей половины ядерных спинов в цепочке и тем самым выбирать пути преобразования состояния ядерной системы при адиабатическом изменении параметра J .

При одинаковых значениях постоянных A ядерные спины в зависимости от величины внешнего поля будут ориентированы в соседних цепочках либо по полю, либо по направлению электронного спина. В обоих случаях, если пары электронных спинов из соседних цепочек находятся в триплетном состоянии, то и ядерные спины тоже будут в триплетном состоянии. Переход пар электронных спинов из триплетного в синглетное состояние в этом случае будет происходить единственным путем, сопровождающимся переходом пар ядерных спинов из триплетного состояния $m_a + m_b = 1$ в синглетное состояние $m_a + m_b = 0$.

Паре электронов в синглетном состоянии энергетически более выгодным может оказаться быть на одном донорном атоме, и тогда это приведет к разрушению антиферромагнитного порядка в цепочках.

Основные недостатки рассмотренного ансамблевого варианта, как и модели Кейна, связаны с наличием системы затворов, флуктуации напряжения на которых являются одним из существенных механизмов декогерентизации квантовых состояний. Кроме того, наличие затворов может влиять на интенсивность и форму радиочастотных импульсов, вызывать дополнительный сдвиг резонансных частот и тем самым снижать точность выполнения логических операций. Наконец, для реализации рассматриваемой структуры из полосковых затворов по-прежнему требуется нанотехнология с разрешением порядка 1 нм.

2.8.2. Отношение сигнал-шум в ансамблевом жидкостном

ЯМР квантовом компьютере

Для измерения состояний ядерных спинов-кубитов в жидкостных ЯМР компьютерах используется стандартная техника ЯМР, работающая при комнатных температурах (Рис. 2.6). Образец в виде ампулы с жидкостным ансамблевым регистром помещается в поле постоянного магнита \mathbf{B} и переменное (линейно поляризованное в односоленоидной схеме) поле $\mathbf{b}(t)$, создаваемое напряжением $V_\omega(t)$

$$\mathbf{B}(t) = \mathbf{B} + \mathbf{b}(t) = B\mathbf{k} + 2b\cos(\omega t + \varphi)\mathbf{i}. \quad (2.47)$$

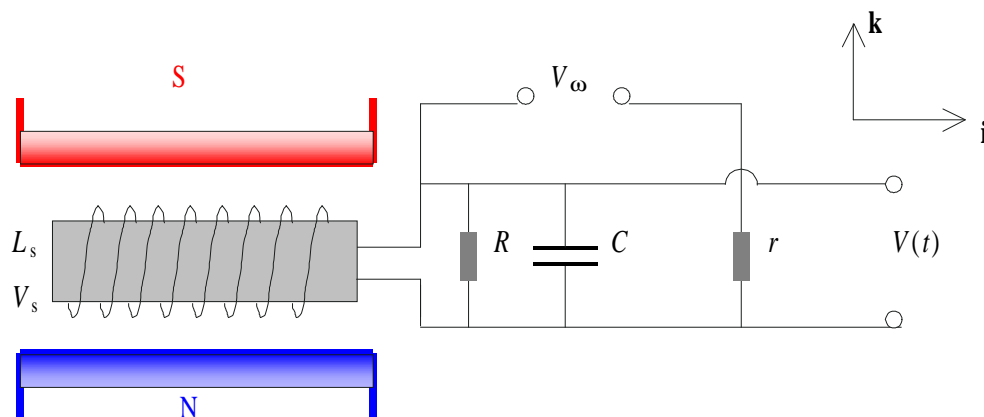


Рис. 2.6. Принципиальная односоленоидная схема ЯМР спектрометра. $L_s = \mu_0(KA)^2/V_s$ — индуктивность соленоида резонансного контура, V_s — объем соленоида, K — число и A — площадь витка соленоида, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-1}$ Гл²см³/Дж.

Амплитуда индуцированного радиочастотного напряжения $V(t)$ на выходе ЯМР спектрометра определяется выражением (в единицах СИ)

$$V(t) = \mu_0 Q_s K A \frac{dM_x}{dt} = \sqrt{\frac{\mu_0 Q_s R V_s}{\omega_A}} \frac{dM_x}{dt} \quad (2.48)$$

где для резонансной радиочастоты $\omega = \omega_A = (L_s C)^{-1/2}$, $Q_s = R/(\omega_A L_s) > 10^2$ — **добротность резонансного контура** в схеме с параллельным соединением выходного сопротивления с резонансным контуром (Рис. 2.4).

Максимальное значение считываемой ядерной намагниченности M_x (для непрерывной среды) при резонансном условии $\omega = \omega_A$, как это следует из анализа решений уравнений Блоха [2.32], определяется величиной амплитуды радиочастотного поля $b = 1/(\gamma\sqrt{T_{\perp 1} T_{\parallel 1}})$ и составляет $M_{x\max} = M_{z0}/2 = \gamma\hbar(N/V_s)P_0/4$, где P_0 — величина равновесного значения вектора Блоха, N — число ядерных спинов в объеме V_s .

В случае донорных атомов ^{31}P и при $\gamma_S/\gamma_I \gg X$ равновесное значение вектора Блоха P_{z0} определяется населенностями состояний, соответствующих двум нижним уровням (Рис. 2.2)

$$|0, 0\rangle = \sqrt{\alpha} |\uparrow_s \downarrow \uparrow\rangle - \sqrt{1-\alpha} |\downarrow_s \uparrow \uparrow\rangle, \quad |1, -1\rangle = |\downarrow_s \downarrow \uparrow\rangle, \quad (2.49)$$

отвечающих одному и тому же значению квантового числа электронного спина $M = -1/2$. Вероятности независимого заполнения этих уровней одновременно всеми L кубитами имеют следующий вид

$$(p(0, 0))^L = \frac{\exp(L\hbar\omega_A^+ / 2kT)}{(\exp(\hbar\omega_A^+ / 2kT) + \exp(-\hbar\omega_A^+ / 2kT))^L}, \quad (2.50)$$

$$(p(1, -1))^L = \frac{\exp(-L\hbar\omega_A^+ / 2kT)}{(\exp(\hbar\omega_A^+ / 2kT) + \exp(-\hbar\omega_A^+ / 2kT))^L}. \quad (2.51)$$

Максимально возможное значение поляризации ядерных спинов, отнесенное к одному элементу ансамбля L -кубитовых систем, определяющее максимально возможное значение интенсивности сигнала ЯМР в ансамблевом варианте квантового компьютера при конечных температурах, определяется выражением [2.30, 2.31]

$$P_{z \max} = \langle 0, 0 | \sigma_z | 0, 0 \rangle (p(0, 0))^L + \langle 1, -1 | \sigma_z | 1, -1 \rangle (p(1, -1))^L, \quad (2.52)$$

где матричные элементы

$$\langle 0, 0 | \sigma_z | 0, 0 \rangle = 1 - 2\alpha = \frac{X}{\sqrt{1+X^2}}, \quad \langle 1, -1 | \sigma_z | 1, -1 \rangle = -1. \quad (2.53)$$

В результате получим $P_{zm} = \varepsilon(L)$, где параметр

$$\varepsilon(L) = \left(\frac{X}{\sqrt{1+X^2}} \frac{\exp(L\hbar\omega_A^+ / 2kT)}{(\exp(\hbar\omega_A^+ / 2kT) + \exp(-\hbar\omega_A^+ / 2kT))^L} - \frac{\exp(-L\hbar\omega_A^+ / 2kT)}{(\exp(\hbar\omega_A^+ / 2kT) + \exp(-\hbar\omega_A^+ / 2kT))^L} \right). \quad (2.54)$$

определяет **максимально возможную вероятность**, с которой чистое состояние с полной ядерной поляризацией $P_1 = 1$ входит в квазичистое.

Для максимально возможной амплитуды ЯМР сигнала на выходе ансамблевого квантового компьютера получим (в единицах СИ):

$$|V_{\max}| = (\mu_0/4) Q_s K A \omega_A^+ (N/V_s) \gamma \hbar \varepsilon(L) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\mu_0 Q_s R \omega_A^+}{V_s}} N \gamma \hbar \varepsilon(L). \quad (2.55)$$

При среднеквадратичном значении напряжения на сопротивлении R , создаваемом тепловым шумом в измерительной цепи

$$V_N = \sqrt{4kTR\Delta\nu}, \quad (2.56)$$

где $\Delta\nu$ — ширина полосы усилителя, отношение сигнала к шуму принимает вид

$$(S/N) = |V_{\max}| / V_N \approx \frac{1}{8} \sqrt{\frac{\mu_0 \hbar Q_s \hbar \omega_A^+}{V_s \Delta\nu kT}} \gamma N \varepsilon(L). \quad (2.57)$$

В *слабых полях*, при $X \ll \exp(-L\hbar\omega_A^+/kT) < 1$ и $T \neq 0$, параметр $\varepsilon(L) \approx -\exp(-L\hbar\omega_A^+/kT)$, а при $T \rightarrow 0$, $\exp(-L\hbar\omega_A^+/kT) \ll X \ll 1$ будем иметь $\varepsilon(L) \approx X$, то есть *сигнал ЯМР существенно ослаблен*.

В *сильных полях*, при $X \gg 1$ (обычная ситуация) параметр $\varepsilon(L)$ принимает известный вид [2.1]:

$$\varepsilon(L) = \frac{2\text{sh}(L\hbar\omega_A^+/2kT)}{2^L \text{ch}(\hbar\omega_A^+/2kT)^L} \quad (2.58)$$

Откуда следует, что в *высокотемпературном пределе* $\hbar\omega_A^+/kT \ll 1$ мы имеем $\varepsilon(L) = L \exp(-L)\hbar\omega_A^+/kT$, то есть максимально возможная *амплитуда сигнала ЯМР экспоненциально уменьшается* с ростом числа кубитов L .

В частности, для двухкубитовых молекул ($L = 2$) используя $\varepsilon(L) \sim \hbar\omega_A^+/kT \sim 10^{-5}$, используя (2.57) и значения постоянных μ_0 , \hbar и γ_I , получим оценку для отношения сигнала к шуму (V_s — в см^{-3})

$$(S/N) \sim (Q/\Delta\nu V_s)^{1/2} N 10^{-16}. \quad (2.59)$$

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, $V_s \sim 1$ см^3 , $Q \sim 10^3$, он должен содержать число молекул (элементов ансамбля) $N > 10^{16}$.

В случае парамагнитной жидкости число полностью поляризованных ядерных спинов может быть увеличено путем использования динамической поляризации (эффект Оверхаузера). Используя для отношения гиромагнитных отношений электронов и ядер $\gamma_e/\gamma_I \sim 10^3$ мы получим, что в выражении для $\varepsilon(L)$ появляется дополнительный множитель $\omega_A^+/T \sim 10^3 \omega_A^+/T$.

Для того же значения N для числа кубитов L в качестве грубого приближения получим оценку

$$L2^{-L} > 10^{-3}, \quad (2.60)$$

откуда следует, что $L < 12$ кубитов.

Дополнительное усиление считываемого сигнала ЯМР может быть получено в парамагнитной жидкости с помощью методов двойного электронно-ядерного резонанса.

Принято считать [2.1], что предельное значение числа кубитов в жидкостных ЯМР квантовых компьютерах ограничено числом $L < 20 - 30$.

В *сильных полях*, при $X \gg 1$ (несколько тесла), и *при низких температурах* $\omega_A^+/T \gg 1$, как это следует из (2.58), параметр $\varepsilon(L) = 1$, с такой вероятностью происходит образование чистого полностью поляризованного основного квантового состояния с $P_0 = 1$. Сигнал ЯМР оказывается независимым от числа кубитов L и экспоненциального уменьше-

ния его не происходит. В этом случае практически не требуется никакой специальной процедуры инициализации состояний спинов.

Можно ожидать, 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. Но это неизбежно будет **твердотельный ЯМР ансамблевый квантовый компьютер**. Возникает вопрос: *Как создать такие низкие спиновые температуры?*

2.8.3. 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 [2.21, 2.23]. Для переходов с частотами ω_B и ω_C (Рис. 2.2 б) были найдены исключительно большие электронные продольные времена релаксации $\tau_{\parallel B} \approx \tau_{\parallel C}$ при низких температурах, которые достигали **одного часа** при $T = 1.25$ К и $B \sim 0,3$ Тл, не зависели от концентрации фосфора до $C \sim 10^{16}$ см $^{-3}$ и изменялись обратно пропорционально температуре решетки T .

Время релаксации $\tau_{\parallel S}$ для переходов с частотой ω_S , которые сопровождаются одновременным переворачиванием электронного и ядерного спинов (запрещенные переходы в первом приближении) при $T = 1.25$ К, $B \sim 0,3$ Тл и $C \sim 10^{16}$ см $^{-3}$ составляло более $\tau_{\parallel S} \sim 30$ часов $> \tau_{\parallel B}, \tau_{\parallel C}$.

Для структуры, изображенной на Рис. 2.2, имеем $d = 20$ нм, $l_x = 20$ нм, $l_y = 50$ нм, получим $l_{av} = (20 \cdot 20 \cdot 50)^{1/3} = 27$ нм и, соответственно, для концентрации донорных атомов $C = (l_{av})^{-3} = 5 \cdot 10^{16}$ см. Для такого значения C , согласно [2.23], мы имеем $\tau_{\parallel B} \sim 100$ с.

Дальнейшее увеличение времени релаксации может быть достигнуто уменьшением температуры решетки.

Исключительно большие времена продольной релаксации делают возможным долгоживущие ядерные неравновесные состояния, которые характеризуются сверхнизкими спиновыми температурами уже при температурах решетки порядка 1 К.

Требуемая инициализация ядерных квантовых состояний (практически полная поляризация ядерных спинов) может быть достигнута путем охлаждения до **спиновых температур** $T \leq 1$ мК.

Для получения спиновой температуры $T_I < 1$ мК в многокубитовом ансамбле, типа рассмотренного в подразделе **2.8.1**, в условиях, когда температура окружения только порядка

0,1 К, представляются 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 (с частотой ω_S на Рис.2.2 б) в двойном электрон-ядерном резонансе (**ENDOR**). Он получил название *солид-эффекта* [2.32].

В этом случае быстрофлуктуирующие случайные поля определяют только сравнительно медленные диссипативные процессы релаксации, а скорость расфазировки (декогерентизации) состояний ядерных спинов определяется в основном статическим разбросом резонансных частот в ансамбле. Рассмотренные ранее уравнения типа (1.92) могут быть использованы для полного моделирования процесса динамической поляризации в ансамбле двухспиновых систем. Здесь мы ограничимся, следуя [2.30, 2.31], более простым подходом, позволяющим рассмотреть существо солид-эффекта.

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

$$\begin{aligned} P_S &= p(1,1) + p(1,0) - p(1,-1) - p(0,0) , \\ P_I &= p(1,1) + p(0,0) - p(1,0) - p(1,-1) , \end{aligned} \quad (2.61)$$

где $p(F, M_F)$ – населенности состояний F, M_F (Рис. 2.2). Они удовлетворяют условию нормировки

$$p(1,1) + p(1,0) + p(1,-1) + p(0,0) = 1 . \quad (2.62)$$

Запишем теперь скоростные уравнения для населенностей (скорости релаксации, соответствующие переходам с частотами ω_A^\pm будем считать одинаковыми):

$$\begin{aligned} dp(0,0)/dt &= (p(1,1) - p(0,0)r_B^-) / \tau_{\parallel B} + (p(1,0) - p(0,0)r_D^-) / \tau_{\parallel D} + \\ &\quad + (p(1,-1) - p(0,0)r_A^+) / T_{\parallel A} , \\ dp(1,-1)/dt &= (p(1,0) - p(1,-1)r_C^-) / \tau_{\parallel C} + (p(1,1) - p(1,-1)) \cdot W_S + \\ &\quad + (p(0,0)r_A^+ - p(1,-1)) / T_{\parallel A} , \\ dp(1,0)/dt &= (p(1,-1)r_C^- - p(1,0)) / \tau_{\parallel C} + p(0,0)r_D^- - p(1,0) / \tau_{\parallel D} + \\ &\quad + (p(1,1) - p(1,0)r_A^-) / T_{\parallel A} , \\ dp(1,1)/dt &= (p(0,0)r_B^- - p(1,1)) / \tau_{\parallel B} + (p(1,-1) - p(1,1)) \cdot W_S + \\ &\quad + (p(1,0)r_A^- - p(1,1)) / T_{\parallel A} , \end{aligned} \quad (2.63)$$

где параметры (здесь снова используем единицы $\hbar = k = 1$) $r_{B,C,D} = \exp(-\omega_{B,C,D}/T)$, $r_A^\pm = \exp(-\omega_A^\pm/T)$ 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 $P_{I0} \sim \omega_A^+/T \ll 1$ поляризациям.

Предположим далее, что скорость индуцированных внешним СВЧ полем запрещенных электронных переходов $|1, 1\rangle \rightarrow |1, -1\rangle$ с частотой ω_S , сопровождающихся одновременным переворотом электронного и ядерного спинов W_S , и продольные времена релаксации удовлетворяют условию:

$$W_S^{-1} < \tau_{\parallel B} \approx \tau_{\parallel C} \ll T_{\parallel A}, \tau_{\parallel D}, \tau_{\parallel S}, \quad (2.64)$$

где $\tau_{\parallel D}, \tau_{\parallel S}$ — продольные времена релаксации электронных спинов для запрещенных переходов. В результате получим

$$\begin{aligned} dp(0,0)/dt &= p(1,1)/\tau_{\parallel B} + (p(1,-1) - p(0,0))/T_{\parallel A}, \\ dp(1,-1)/dt &= p(1,0)/\tau_{\parallel B} + ((p(1,1) - p(1,-1)) \cdot W_S + \\ &\quad + (p(0,0) - p(1,-1))/T_{\parallel A}, \\ dp(1,0)/dt &= -p(1,0)/\tau_{\parallel B} + (p(1,1) - p(1,0))/T_{\parallel A} + \\ dp(1,1)/dt &= -p(1,1)/\tau_{\parallel B} + (p(1,-1) - p(1,1)) \cdot W_S + \\ &\quad + (p(1,0) - p(1,1))/T_{\parallel A}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

С помощью уравнений (2.48), (2.49), (2.52) получим скоростные уравнения для P_S и P_I :

$$\begin{aligned} dP_S/dt &= -(P_S + P_I) \cdot W_S - (P_S + 1)/\tau_{\parallel B}, \\ dP_I/dt &= -(P_S + P_I) \cdot W_S - P_I/T_{\parallel A}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Условие стационарного насыщения ($W_S > 1/T_{\parallel A}$) перехода $|1,1\rangle \rightarrow |1,-1\rangle$ обеспечивает выравнивание населенностей $p(1,1) = p(1,-1)$, в результате которой мы получаем **полную ядерную спиновую поляризацию**

$$P_I = -P_S = p(0,0) = 1. \quad (2.67)$$

что эквивалентно охлаждению ядерных спинов до спиновых температур $< 10^{-3}$ 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 $T_{\parallel A} \sim 10$ часов [2.23].

Таким образом, может быть преодолена **первая трудность** схемы Кейна.

Оценим теперь, необходимую для насыщения СВЧ мощность. Скорость индуцированных внешним СВЧ полем запрещенных электронных переходов W_S , как известно [2.32], отличается от скорости разрешенных переходов с переворотом только одного спина W малым множителем пропорциональным $(B_S/B)^2$, где B_S — поле, создаваемое в результате диполь-дипольного взаимодействия ядерного и электронного спина. Процесс спиновой диффузии для простоты учитывать не будем. Запишем ее в виде

$$W_S \sim (B_S/B)^2 (\gamma_S b_1)^2 \tau_{\parallel S}^* / 2 = (B_S/B)^2 W, \quad (2.68)$$

где $(\overline{\Delta\omega_S^2})^{1/2} \approx 2\tau_{\parallel S}^*{}^{-1}$ — ширина резонансной линии для насыщаемого перехода, b_1 — амплитуда СВЧ поля. С другой стороны, приблизительно так же уменьшается и эффективная ско-

рость продольной релаксации $1/\tau_{\parallel S}$ для этих переходов по сравнению с разрешенными переходами $1/\tau_{\parallel S} \sim (B_S/B)^2 1/\tau_{\parallel B}$

В результате **условие насыщения** будет иметь вид [2.32]

$$W_S > 1/\tau_{\parallel S}, 1/T_{\parallel A} \text{ или } W > 1/\tau_{\parallel B}, (\gamma_S b_1)^2 \tau_{\perp S}^* \tau_{\parallel B} > 1, \quad (2.69)$$

то есть в наиболее благоприятном случае такой же как и для разрешенного перехода. Используя выражение для добротности Q_c СВЧ резонатора

$$Q_c \approx \omega_S b_1^2 V / (2\mu_0 P), \quad (2.70)$$

где V — объем СВЧ резонатора, и условие насыщения (2.69), оценим **рассеиваемую резонаторе мощность** при $(\gamma_S b_1)^2 \tau_{\perp S}^* \tau_{\parallel B} = 1$ следующим образом

$$P > \omega_S V W (\overline{\Delta\omega_S^2})^{1/2} / (2\mu_0 Q_c \gamma_S^2). \quad (2.71)$$

Например, принимая $W \sim 1/\tau_{\parallel B} \sim 10^3 \text{ с}^{-1}$, $\omega_S \sim 100 \text{ радГГц}$, $V \sim 1 \text{ см}^3$, $Q_c \sim 1000$ и $(\overline{\Delta\omega_S^2})^{1/2} \sim 10^8 \text{ с}^{-1}$ в качестве грубой оценки получим $P > 1 \text{ мВт}$. Заметим еще раз, что такая мощность будет рассеиваться только в процессе первоначального охлаждения спиновой системы.

2.8.4. Отношение сигнал-шум для ансамблевого кремниевого квантового компьютера

Для реализации ансамблевого кремниевого квантового регистра мы предлагаем вариант планарной схемы, которая представляет собой np параллельно работающих блоков, каждый из которых содержит N_0 параллельно соединенных L -кубитовых линейных «молекул» Кейна [2.30, 2.31]. Так что полное число «молекул» в ансамбле $N = n \cdot N_0 \cdot p$ (Рис.2.7)

Выходной сигнал от такого ансамбля параллельно работающих цепочек, как и в случае жидкостей будет пропорционален числу «молекул» N .

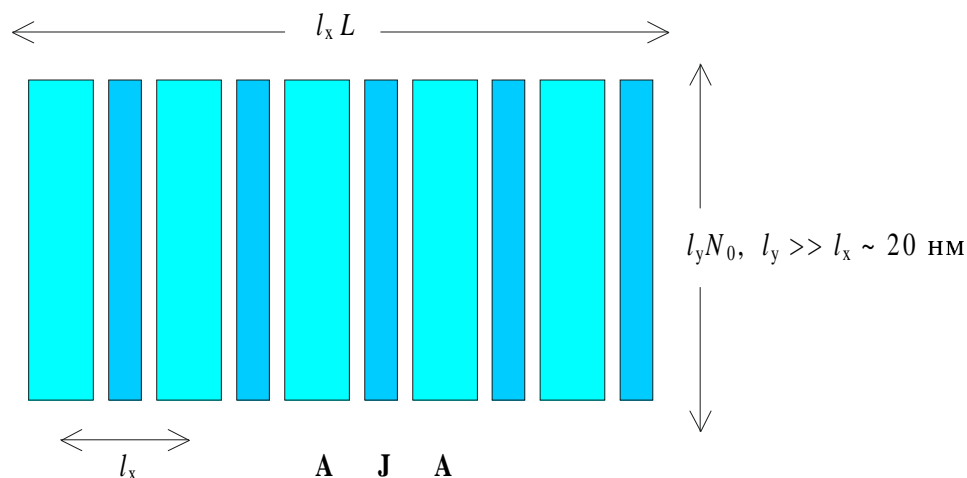


Рис. 2.7. Вид сверху схемы регулярного расположения полосковых затворов **A** (широкие линии) и **J** (узкие линии) в одном блоке. Толщина пластины ^{28}Si принята равной $\Delta \sim 1 \text{ мкм}$

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 $< 10^{-3}\text{К}$, не содержит малого множителя $\varepsilon(L) \approx L \exp(-L\hbar\omega_A^+ / KT)$. Величина ЯМР сигнала с точностью до несущественного множителя совпадает с величиной сигнала от макроскопического образца (см. Приложение ПЗ).

Полагая в выражении (2.57) $\hbar\omega_A^+ / kT \sim 1$ ($T \sim 0,1\text{К}$) и $\varepsilon(L) \sim 1$ в качестве оценки для необходимого отношения сигнал-шум будем иметь

$$(S/N) \sim (Q/V_s)^{1/2} N 10^{-10} > 1. \quad (2.72)$$

где эффективный объем ансамбля N молекул $V_s \sim N \cdot \Delta l_x l_y L$. Полагая теперь для оценки $\Delta = 1$ мм, $l_x = 20$ нм, $l_y = 50$ нм, число кубитов в «молекуле» $L = 1000$, а добротность резонансного контура при низких температурах $Q = 10^6$, получим, что сигнал ЯМР будет превышать шумовой сигнал при полном числе молекул $N = n \cdot p N_0 > 10^5$.

Для оценки величин n и p рассмотрим блок квадратной формы, у которой $50N_0p = 20 \cdot 1000$ n и $N_0 = 100$. В результате найдем $n \approx 16$, $p \approx 63$. Площадь всей структуры будет порядка 400×400 мкм². Таким образом, общий размер многокубитовой структуры оказывается достаточно малым для того, чтобы *эта структура могла быть размещена в зазоре магнита стандартного ЯМР спектрометра*.

Следовательно, становится возможным использование стандартной ЯМР техники для считывания информации, что существенно упрощает этот процесс и не требует высокочувствительных односпиновых измерительных устройств, рассматриваемых в вариантах Кейна.

В этом состоит основное преимущество ансамблевого варианта. Таким образом, преодолевается *вторая* трудность схемы Кейна.

Для выполнения логических квантовых операций, записи и считывания информации в случае ансамблевого подхода может быть использована хорошо разработанная многоимпульсная техника ЯМР высокого разрешения. Выполнение двухкубитовых логических операций осуществляется с помощью резонансных импульсов на характерной частоте $\omega_J \sim 100$ кГц (2.45). Для обеспечения помехоустойчивых вычислений ошибка в выполнении логических операций на один кубит не должна быть более $\sim 10^{-5}$. Отсюда следует, что ЯМР спектрометр должен обеспечивать разрешение $< 100\text{кГц} \cdot 10^{-5} \sim 1$ Гц.

Заметим здесь, что имеется возможность отказаться от системы управляющих резонансной частотой кубитов затворов **A**, 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 градиент $dB/dx \sim 1$ Тл/см.

2.8.4. Адиабатическая декогерентизация состояний ядерных спинов, обусловленная модуляцией секулярной части сверхтонкого взаимодействия

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 ($> 10^5$) в полномасштабном квантовом компьютере.

Модуляция ядерных спиновых резонансных частот $\Delta\omega(t)$, определяемая секулярной частью сверхтонкого взаимодействия электронных и ядерных спинов донорного атома ^{31}P , описывается выражением

$$\Delta\omega(t) = A(t) S_z(t) - A_0 \langle S_z \rangle, \quad (2.73)$$

где $A(t) = A_0 + \Delta A(t)$, $\Delta A(t)$ — модуляция постоянной сверхтонкой структуры, обусловленных флуктуациями потенциала на затворе **A** в квантовом регистре, исследовалась в работе [2.48], где были сделаны оценки для допустимого уровня такого рода шумов. Поэтому этот механизм декогерентизации здесь не рассматривается (назовем его внешним).

Для малой величины амплитуды модуляции, выражение (2.73) может быть представлено в виде двух слагаемых, соответствующих двум независимым механизмам адиабатической декогерентизации:

$$\Delta\omega(t) = \Delta\omega_S(t) + \Delta\omega_b(t) = A_0 (S_z(t) - \langle S_z \rangle) + \Delta A(t) \langle S_z \rangle. \quad (2.74)$$

Рассмотрим отдельно внутренний механизм декогерентизации, определяемый первым слагаемым в (2.74) [2.49, 2.50].

Корреляционная функция $f_S(t) = \langle \Delta\omega_S(t) \Delta\omega_S(0) \rangle$ 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 $\omega_0 > 1/\tau_2 \gg 1/\tau_1$ и мы получим

$$\langle \Delta\omega_S(t) \Delta\omega_S(0) \rangle = \langle \Delta\omega_S^2 \rangle \exp(-t/\tau_1) \quad (2.75)$$

и, соответственно,

$$\Gamma(t) = \langle \Delta\omega_S^2 \rangle \tau_1^2 (t/\tau_1 - 1 + \exp(-t/\tau_1)), \quad (2.76)$$

где

$$\langle \Delta\omega_S^2 \rangle = A^2 (\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2) = A^2 (1 - \text{th}^2(\hbar\omega_0/2kT)), \quad (2.77)$$

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

$$\Gamma(t) = \langle \Delta\omega^2 \rangle t^2 / 2, \quad (2.78)$$

откуда характерное время декогерентизации можно оценить из соотношения $\langle \Delta\omega^2 \rangle \approx 1/T_D^2$.

Необходимое для времени декогерентизации значение при тактовой частоте в ЯМР квантовых компьютеров $\sim 10^4$ 1/с не должно превышать нескольких секунд. Поэтому для $\hbar\omega_0/kT \gg 1$ следует написать

$$1/T_D^2 \approx 2A^2 \exp(-\gamma_s \hbar B / kT) < 1 c^{-2}, \quad (2.79)$$

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 при $B = 2$ Тл температурам решетки $T < 0,06$ К.

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 разделе 1.9, не являются адекватными, мы рассмотрим здесь двухфононную модель, учитывая только один из возможных комбинационных (рамановских) процессов двухфононного рассеяния, не сопровождающегося переворотом спина.

Параметр сверхтонкого взаимодействия запишем в представлении взаимодействия:

$$A(t) = A_0 + \Delta A(t) = A_0 \left[1 + \sum_{m \neq 1} g_{m,1} b_m^+ b_1 \exp(i(\omega_m - \omega_1)t) + g_{m,1}^* b_1^+ b_m \exp(-i(\omega_m - \omega_1)t) \right], \quad (2.80)$$

где b_1^+ и b_m — операторы испускания и поглощения фононов с частотами ω_1 и ω_m , $g_{m,1} \sim \zeta(\hbar/2Mv^2N_c)(\omega_m\omega_1)^{1/2}$ — постоянная связи с акустическими фононами, безразмерная постоянная ζ в наихудшем случае ~ 1 , v — скорость звука, N_c — полное число атомов в кристалле (для простоты рассматривается простая кубическая решетка, M — масса атома).

Для описания механизма декогерентизации, описываемого вторым слагаемым в (2.74) удобнее использовать непосредственно функцию $\Gamma(t)$ [2.50].

Учитывая, что при $(\hbar\omega_0/kT) \gg 1$ $\langle S_z \rangle \approx 1/2$

$$\int_0^t \Delta\omega_b(t) dt = (A_0/2) \sum_{m \neq 1} (\zeta_{m,1}(t) b_m^+ b_1 + \zeta_{m,1}^* b_1^+ b_m), \quad (2.81)$$

где $\zeta_{m,1}(t) = g_{m,1} i(1 - \exp(i\omega_{m,1}t)/\omega_{m,1})$, $\omega_{m,1} = \omega_m - \omega_1$, и $\langle b_m^+ b_1 \rangle = n(\omega_m, T) = (\exp(\omega_m/T) - 1)^{-1}$, и произведем усреднение по фононному ансамблю. В результате получим

$$\Gamma(t) = 1/4 \left\langle \left(\int_0^t \Delta\omega_b(t) dt \right)^2 \right\rangle =$$

$$= (A_0^2 / 4) \sum_{m,l} (\hbar / 2Mv^2 N)^2 (\omega_m \omega_l) (2n(\omega_m, T)n(\omega_l, T) + n(\omega_m, T) + n(\omega_l, T)) \frac{\sin^2(\omega_{m,l} t)}{\omega_{m,l}^2}. \quad (2.82)$$

Перейдем далее от суммирования по m к интегрированию по ω_m :

$$\sum_m \dots \rightarrow \frac{9N}{\Omega^3} \int_0^\Omega \omega_m^2 d\omega_m, \quad (2.83)$$

где $\Omega = v(6\pi^2)^{1/3}/a = k\Theta/\hbar$ — частота Дебая, a — постоянная решетки.

Учитывая далее, что максимальное значение отношение $\frac{\sin^2(\omega_{m,l} t)}{\omega_{m,l}^2}$ имеет место при

$\omega_{m,l} \rightarrow 0$ (почти упругое рассеяние фононов), запишем

$$\frac{\sin^2(\omega_{m,l} t)}{\omega_{m,l}^2} \approx \pi |t| \delta(\omega_{m,l}) \quad (2.84)$$

и найдем

$$\Gamma(t) = |t| \frac{81\pi}{8} (\hbar A_0 / Mv^2)^2 (T/\Theta)^7 (k\Theta/\hbar) \int_0^{\Theta/T} \frac{x^6 \exp x}{(\exp x - 1)^2} dx = |t| / T_D. \quad (2.85)$$

При $T/\Theta < 10^{-3}$ интеграл в (2.85) приблизительно равен $6! = 720$. Принимая для кремния $\Theta = 625$ К, $a = 5,4 \cdot 10^{-8}$ см, $v = 5 \cdot 10^5$ см/с, $M = 0,46 \cdot 10^{-29}$ Дж.с/см² [2.51], будем иметь

$$1/T_D \sim 0,7 \cdot 10^4 (T/\Theta)^7 \text{ с}^{-1} \quad (2.86)$$

Таким образом, в рассматриваемом случае при низких температурах ($T < 0,1$ К) фононный механизм адиабатической декогерентизации является несущественным по сравнению с *механизмом модуляции сверхтонкого взаимодействия*, обусловленной флуктуациями электронной спиновой поляризации.

2.8.5. 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 при высокой степени поляризации электронных спинов ($B/T > 30$ 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. атомы изотопов ²⁹Si. Диполь-дипольное магнитное взаимодействие, описываемого гамильтонианом

$$\mathbf{H}_{\text{IS}} = \hbar \sum_{i,\alpha\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) I_{\alpha} I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i, t), \quad (2.87)$$

где

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\gamma_I \gamma_{\text{I,imp}} \hbar}{r_i^3} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{3r_{i\alpha} r_{i\beta}}{r_i^2} \right), \quad (2.88)$$

$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-1}$ Тл²см³/Дж, $\gamma_I = 108$ радМГц/Тл — гиромагнитное отношение ядерного спина изотопа ³¹P, $\gamma_{\text{I,imp}} = -53$ радМГц/Тл — гиромагнитное отношение ядерного спина изотопа ²⁹Si, \mathbf{r}_i — радиус-вектор расстояния от ядерного спина-кубита до i -го примесного ядерного спина, $\gamma_{\text{I,imp}} \hbar I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i, t)$ — флуктуирующий магнитный момент примесного атома, создающего случайное локальное поле

$$\Delta B_{\alpha}(t) = - \sum_{i,\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) (I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i, t) - \langle I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i) \rangle) / \gamma_I. \quad (2.89)$$

среднее значение $\langle \gamma_I B_{\alpha}(t) \rangle = \sum_{i,\beta}^N D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i) \langle I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}_i) \rangle$ определяет сдвиг резонансной частоты кубита.

Функция корреляции для случайной модуляции резонансной частоты ядерного спина будет определяться выражением

$$\langle \Delta\omega(\tau) \Delta\omega(0) \rangle = C_{\text{I,imp}} \int \sum_{\beta} D_{z\beta}^2(\mathbf{r}) (\langle I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}, \tau) I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}, 0) \rangle - \langle I_{\beta,\text{imp}}(\mathbf{r}) \rangle^2) d\mathbf{r}, \quad (2.89)$$

где $C_{\text{I,imp}}$ — концентрация примесных атомов ²⁹Si (см⁻³).

В рассматриваемом случае адиабатической декогерентизации выражение для функции корреляции принимает вид

$$\langle \Delta\omega(\tau) \Delta\omega(0) \rangle = \langle \Delta\omega^2 \rangle \exp(-\tau / T_{\parallel,\text{imp}}), \quad (2.90)$$

где среднеквадратичное значение частоты модуляции

$$\langle \Delta\omega^2 \rangle = C_{\text{I,imp}} \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_I \gamma_{\text{I,imp}} \hbar \right)^2 \frac{16\pi}{15a^3} (\langle I_{z,\text{imp}}^2 \rangle - \langle I_{z,\text{imp}} \rangle^2), \quad (2.91)$$

$$\langle I_{z,\text{imp}}^2 \rangle - \langle I_{z,\text{imp}} \rangle^2 = (1 - \text{th}^2(\gamma_{\text{I,imp}} B \hbar / 2kT_I)) / 4, \quad (2.92)$$

a — минимальное расстояние до примесного ядерного спина, порядка постоянной решетки. Для кремния $a^{-3} \approx 5 \cdot 10^{22}$ см⁻³.

Полагая $T_{\parallel,\text{imp}} \sim 10^4$ с $\gg T_D$ (условие «жесткой решетки») и используя снова требование для времени декогерентизации $T_D > 1$ с, для определения допустимой концентрации изотопов ²⁹Si получим условие

$$1/T_D^2 \approx \langle \Delta\omega^2 \rangle = C_{\text{I,imp}} \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_I \gamma_{\text{I,imp}} \hbar \right)^2 \frac{4\pi}{15a^3} (1 - \text{th}^2(|\gamma_{\text{I,imp}}| B \hbar / 2kT_I)) < 1 \text{ с}^{-2}. \quad (2.93)$$

Для $V/T > 30$ Тл/К, получим весьма жесткое условие для допустимого значения концентрации примесных атомов $C_{I,imp} < 6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ($\sim 10^{-5}\%$ при естественной концентрации 4,7 %). Однако если спиновая температура T_I для ядерных спинов примесных изотопов соответствует значению, при которой имеет место почти полная их поляризация $|\gamma_{I,imp} | B\hbar / kT_I) > 1$, то есть для $T_I < 0,8$ 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 может быть достаточным. При этом концентрация других элементов содержащих изотопы с ядерными спинами с распространенностью $P < 100\%$ не должна превышать $10^{-2}/P$ %.

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, возможность создания многокубитового ЯМР квантового компьютера при *числе элементов ансамбля* $N \sim 10^6$ с использованием стандартной техники ЯМР или ENDOR-техники.

3. К основным механизмам декогерентизации квантовых состояний в кремниевых ансамблевых квантовых регистрах следует отнести *адиабатические процессы модуляция резонансной частоты*, обусловленную 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 отношения $V/T > 30$ Тл/К и уменьшения концентрации примесных атомов, содержащих ядерные спины.

Для подавления декогерентизации, обусловленной диполь-дипольным взаимодействием может быть использована хорошо известная *многоимпульсная техника ЯМР спектроскопии высокого разрешения* [2.7] в твердых телах.

2.9. Ансамблевый многокубитовый ЯМР квантовый клеточный автомат на структурах с антиферромагнитным упорядочением

В качестве одного из новых возможных варианта реализации ансамблевого квантового клеточного автомата мы предлагаем использовать структуры с антиферромагнитно упорядоченными электронными спинами [2.2, 2.52 - 2.56].

В частности это может быть достаточно большой ансамбль квазиодномерных антиферромагнитно-упорядоченных цепочек из донорных атомов ^{31}P в бесспиновом ($I = 0$) кристалле кремния ^{28}Si , слабо связанных между собой. При этом такой ансамбль может не иметь наноструктурных элементов типа затворов **A** и **B**. Такой ансамбль нетрудно обобщить и на двух- и трехмерные антиферромагнитно-упорядоченные структуры. Далее анализируются различные модели квантовых клеточных автоматов, которые могут рассматриваться в качестве элементов соответствующих ансамблевых устройств.

2.9.1. ЯМР квантовый клеточный автомат на основе изинговского антиферромагнетика

Рассмотрим простую одномерную модель антиферромагнетика, в которой каждый элемент представляется магнитным атомом, имеющим один электронный и один ядерный спин $I = 1/2$, связанных сверхтонким взаимодействием. Примером такой структуры является упомянутая цепочка донорных атомов ^{31}P , разделенных расстоянием l , при котором основные электронные состояния доноров перекрываются.

Ядерные резонансные частоты $\omega_{A,B}$ в одномерной цепочке $ABAB\dots$ зависят от магнитных квантовых чисел *соседних ядерных спинов слева $m_<$ и справа $m_>$* . Предполагая *изинговским* косвенное взаимодействие между ядерными спинами, то есть диагональным в вычислительном базисе, (случай слабого взаимодействия), запишем для них выражение ($\hbar = 1$)

$$\omega_{A,B}(m_< + m_>) \approx \left| -\gamma_1 B \pm A/2 - I_1(m_< + m_>) \right|, \quad (2.94)$$

где I_1 — постоянная секулярной части косвенного спин-спинового взаимодействия (см. подраздел **2.10.2**).

Если постоянная обменного взаимодействия $J \geq \gamma_s B \sim 534$ радГГц ($B \sim 3$ Тл), что соответствует расстоянию между донорами $l \sim 20$ нм, то критическая температура Нееля для антиферромагнитного упорядочения $T_{NS} \sim \hbar J/k > 4$ К (k — постоянная Больцмана), тогда как критическая температура для ядерного упорядочения $T_{NI} \sim \hbar I_1/k \sim \hbar A^2/Jk \sim 10^{-5}$ К. Различие резонансных частот ядерных спинов для по разному ориентированных соседних спинов составляет $\Delta\omega_1/2\pi \sim I_1 \sim 0,5$ МГц, тогда как резонансная частота $\omega_1/2\pi \sim 120$ МГц.

В магнитных полях $B \sim A/(2\gamma_I) \sim 3$ Тл и при температурах $T \sim 10^{-3}$ К ядерные спины атомов в каждой из подрешеток А и В антиферромагнитной цепочки будут ориентироваться с соответствии с ориентацией электронных спинов и образовывать в основном состоянии периодическую структуру типа АВ АВ...: $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots$, где $|\uparrow\rangle$ обозначает основное инциализированное состояние ядерного спина в положении А, а $|\downarrow\rangle$ — состояние ядерного спина в положении В, то есть мы получаем *гомоядерную* систему спинов с *двумя различными основными состояниями*.

$$\begin{array}{l} \text{Электронные спины } \mathbf{S} : \quad \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \\ \text{Ядерные спины } \quad \mathbf{I} : \quad \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \end{array}$$

Соответственно, ядерные спины будут иметь *два чередующихся значения ядерных резонансных частот*. Каждый ядерный спин в положениях А и В в этой схеме помимо основного состояния имеют, соответственно, возбужденное $|\downarrow\downarrow\rangle$ и $|\uparrow\uparrow\rangle$. Заметим, что время жизни (спин-решеточное время релаксации T_1) возбужденного состояния при низких температур, как уже отмечалось, очень велико.

Для организации ЯМР вычислительных операций в рассматриваемой структуре воспользуемся способами обращения к кубитам, аналогичными первоначально предложенными С.Бенжамином для цепочки из двух типов кубитов с чередующимися резонансными частотами в [2.47], не требующим индивидуального обращения к отдельным кубитам.

Каждый *логический кубит* информации будем представлять состояниями *четырёх* элементов: Основное состояние логического кубита "0" представляется ячейкой $|\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow\rangle$, тогда как состояние "1" — ячейкой $|\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow\rangle$. 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) и поэтому имеет другую резонансную частоту $\omega_A(-1/2)$ ($m_{<} + m_{>} = -1/2$) (см. Таблицу).

Соответствующий селективный резонансный радиочастотный $\pi_{A, m_{<} + m_{>} = \pi_{A, -1/2}$ -импульс будет инвертировать 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 инвертирует следующий ядерный спин (в положении В), с противоположными ориентациями соседних ядерных спинов в основном и возбужденном состояниях ($m_{<} + m_{>} = 0$) и, соответственно, с другой резонансной частотой, отличной от частоты

спинов, соседние ядерные спины которых в это время находятся в основном состоянии ($m_{<} + m_{>} = \pm 1$).

Таблица. π -импульсы для спинов в состояниях А и В

Соседние спиновые состояния для спина А	А ↓	↓ А ↓	↓ А ↑	↑ А ↓	↑ А ↑
Резонансная частота	$\omega_A(-1/2)$	$\omega_A(-1)$	$\omega_A(0)$	$\omega_A(0)$	$\omega_A(1)$
π -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	$\omega_B(1/2)$	$\omega_B(1)$	$\omega_B(0)$	$\omega_B(0)$	$\omega_B(-1)$
π -импульсы	$\pi_{B,1/2}$	$\pi_{B,1}$	$\pi_{B,0}$	$\pi_{B,0}$	$\pi_{B,-1}$

Таким образом, состояние логического кубита "0", то есть $|\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow\rangle$, формируется следующим образом (импульсы действуют на подчеркнутые слева спины):

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & \text{"0"} & \\ & & & & & \underline{\underline{}} & \\ \uparrow \downarrow & \downarrow \dots \pi_{A,-1/2} \Rightarrow & \downarrow \downarrow \uparrow \downarrow & \uparrow \dots \pi_{B,0} \Rightarrow & \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow & \uparrow \dots & \\ \bar{A} \ B & \ B & \ A \ \bar{B} \ A \ B & & \ A \ B \ A \ B & & \end{array} \quad (2.95)$$

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:

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & \text{"0"} & \\ & & & & & \underline{\underline{}} & \\ \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow & \uparrow \dots \pi_{A,0} \Rightarrow & \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow & \uparrow \dots \pi_{A,1/2} \Rightarrow & \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow & \uparrow \dots \pi_{B,0} \Rightarrow & \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \dots \\ \ A \ B \ \bar{A} \ B & \ \bar{A} & & & & & \ A \ B \ A \ B \end{array} \quad (2.96)$$

Назовем далее состояния $|\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow\rangle$ и $|\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow\rangle$ транслированными относительно ос-

новных логических состояний $|\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow\rangle$ и $|\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow\rangle$. В последующих операциях SWAP, как будет видно, они переходят в основные логические состояния.

Заметим, что для образования грубой ошибки в записанной информации, например, типа "0" \Rightarrow "1", следует перевернуть одновременно четыре спина. Отсюда следует, что рассмотренный способ кодирования состояний кубитов обладает *повышенной помехозащищенностью* по отношению к ошибкам такого типа.

Дальнейшее перемещение состояний кубитов по цепочке осуществляется с помощью по-

следовательности импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \dots$, представляющей операции SWAP:

$$\begin{array}{c}
 \text{"1"} \\
 \hline
 \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \dots \pi_{A,0} \Rightarrow \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \dots \pi_{B,0} \Rightarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \dots \pi_{A,0} \Rightarrow \\
 \text{A B } \bar{\text{A}} \text{ B} \qquad \qquad \qquad \bar{\text{B}} \qquad \qquad \qquad \bar{\text{A}}
 \end{array}$$

$$\begin{array}{c}
 \text{"1"} \\
 \hline
 \Rightarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \dots \pi_{B,0} \Rightarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \\
 \qquad \qquad \qquad \bar{\text{B}} \qquad \bar{\text{B}} \qquad \qquad \qquad \text{A B } \bar{\text{A}} \text{ B}
 \end{array} \tag{2.97}$$

и так далее.

Роль атомов-портов на конце цепочки могут играть, как в случае, рассматривавшемся в [2.45], 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", приходящихся на один порт до $> 10^3$, можно перейти к двумерным и трехмерным структурам с шахматным порядком в ориентации электронных спинов. Соответствующий шахматный порядок будут иметь и ориентированные ядерные спины.

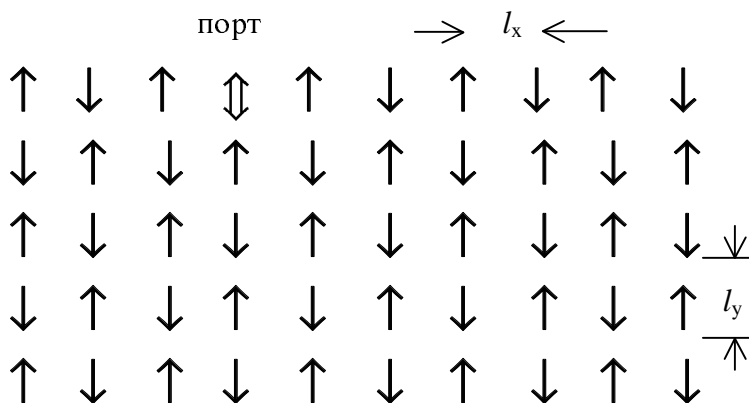


Рис. 2.8. Двухмерная структура с шахматным порядком ориентации электронных спинов.

Далее в разделе 2.12 рассматриваются варианты с естественными кристаллическими антиферромагнитными структурами.

2.9.2. Организация логических операций в квантовом ЯМР клеточном автомате

Рассмотрим часть цепочки (Рис. 2.9), которая содержит три логических кубита в состояниях "1", "0" и "1". Кроме логических кубитов, представляемых четырьмя спинами, как и в [2.47], введем вспомогательная *контрольная единица* CU, представляемая *шестью* спинами в следующих состояниях $\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow$. Отдельные кубиты пространственно отделены в цепочке на число ядерных спинов в основном состоянии, *кратное четырем*.

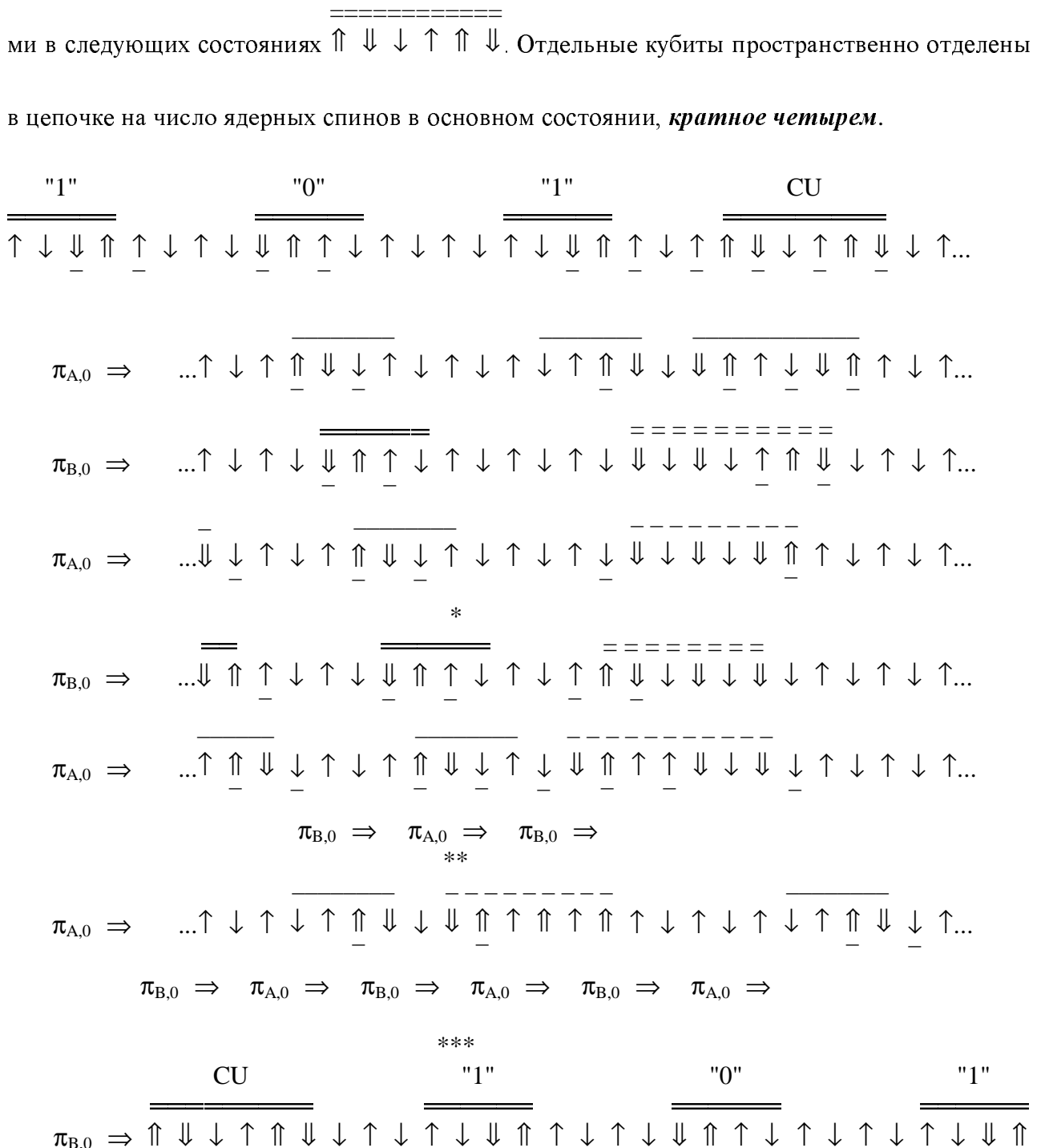


Рис. 2.9. Схема последовательности импульсов, осуществляющих операцию SWAP над логическими кубитами. Штриховые черты сверху обозначают области, где происходит изменение структуры логического кубита и контрольной единицы CU.

Поэтому на каждый кубит в цепочке приходится минимум восемь ядерных спинов (четыре для кодирования и четыре для пространственного разделения). Контрольная единица находится в некотором месте цепочки и отделена от ближайшего кубита нечетным числом спинов, находящихся в основном состоянии.

Под действием последовательности импульсов $\pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \pi_{B,0}, \pi_{A,0}, \dots$ кубиты перемещаются вправо, а контрольная единица SU влево, при этом форма кубитов и SU *сохраняются* (с точностью до транслирования). Контрольная единица SU проходит через кубиты в состояниях "1" и "0", оставляя их после взаимодействия *неизменными* и продолжает двигаться влево (Рис. 2.9).

Для выполнения *однокубитовых операций* используются $\pi_{A,1}$ и $\pi_{B,-1}$ -импульсы, а также более общие унитарные операторы $U_{A,1}$ и $U_{B,-1}$, действующие на отдельный спин в положении A и B с резонансными частотами, соответствующими *одинаковым возбужденным состояниям* обоих соседним ядерным спинам. Знак "+" относится к случаю, когда в возбужденных состояниях $|\uparrow\uparrow\rangle$ находятся оба соседних спина B и знак "-" когда в возбужденном состоянии $|\downarrow\downarrow\rangle$ находятся соседние спины A (см. Таблицу). Заметим, что если оператор U является простой инверсией состояния, то действие $U_{A,1}$ и $U_{B,-1}$ идентично действию импульсов $\pi_{A,1}$ и $\pi_{B,-1}$.

В тот момент, когда SU достигает середины пути при прохождении рассматриваемого кубита "1" или "0" (эти состояния отмечены одной и двумя звездочками на Рис. 2.9), операция SWAP прерывается и включается другая *вычислительная последовательность* из *шести* импульсов $\pi_{A,1}, \pi_{B,-1}, \pi_{B,0}, \pi_{A,1}, \pi_{B,0}, U_{A,1}$. Заканчивает эту последовательность унитарная операция $U_{A,1}$ (поворот в двумерном гильбертовом пространстве), которая действует только на один спин A в основном состоянии, находящийся между возбужденными спинами B и образует суперпозицию состояний спина A :

$$U_{A,1}|\uparrow\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (2.98)$$

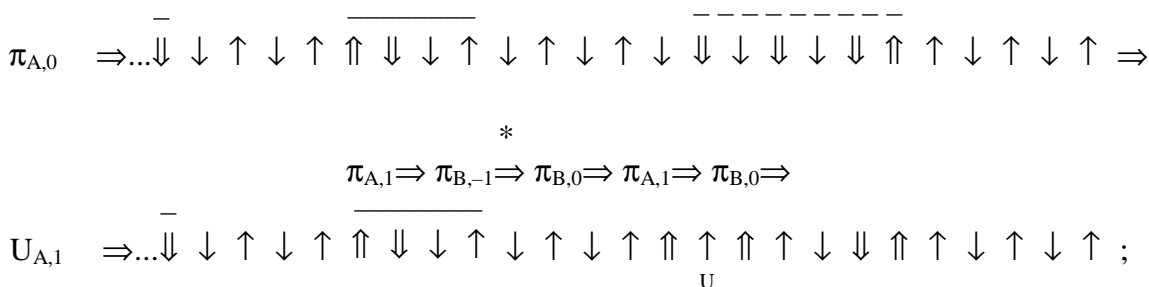


Рис. 2.10 Схема дополнительной вычислительной импульсной последовательности после стадии * Унитарная операция $U_{A,1}|\uparrow\rangle$ обозначается как $\uparrow \uparrow \uparrow$:
U

Схема дополнительной вычислительной последовательности импульсов после стадии, отмеченной одной звездочкой * показана на Рис.2.10.

Далее, за унитарной операцией $U_{A,1}$, выполняется та же полная последовательность импульсов, но в **обратном порядке**. При этом контрольная единица SU возвращается в исходное начальное состояние (первая строка на Рис. 2.9), а начальное состояние логического кубита "1" переходит в суперпозицию состояний:

$$\begin{array}{c} \text{"1"} \\ \hline \hline \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \end{array} \Rightarrow |\psi\rangle = a \begin{array}{c} \text{"1"} \\ \hline \hline \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \end{array} + b \begin{array}{c} \text{"0"} \\ \hline \hline \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \end{array}. \quad (2.99)$$

и перемещается налево.

Таким образом, в результате контрольная единица SU вместе с дополнительной вычислительной последовательностью импульсов осуществляет однокубитовую операцию образования суперпозиции двух логических кубитов. Заметим, что такая операция требует **семнадцати** элементарных импульсов.

Для выполнения **двухкубитовой операции** потребуется применение другой более длительной последовательности вычислительных импульсов. Так, при выполнении операции **CNOT** она должна быть такой, чтобы контрольная единица SU , проходя контролирующий кубит в состоянии "0", изменяла свою форму таким образом, чтобы после последующего прохождения контролируемого кубита, последний не изменял своего состояния, а проходя контролируемый кубит в состоянии "1" изменяла свою форму иначе и производила инверсию его состояния при последующем прохождении контролируемого кубита (Пример последовательности импульсов, выполняющих операцию **CNOT** приведен в **Приложении П4.**).

2.9.3. ЯМР квантовый клеточный автомат с несимметричным взаимодействием ядерного спина с соседними спинами

Вместо системы искусственных молекул в виде цепочек из донорных атомов можно предложить также органические кристаллы с диэлектрическими свойствами при низких температурах, состоящие из слабо взаимодействующих между собой **квазиодномерных цепочек**.

Например, ими могут быть сравнительно хорошо изученные цепочки полиацетилена (полиен) [2.57] с химической структурой (изотопы ^{12}C с $I = 0$), изображенной на Рис. 2.11, с **антиферромагнитным** упорядочением электронных спинов, осуществляющих связь атомов водорода с атомами углерода и имеющих, соответственно, чередующуюся начальную поляризацию протонов.

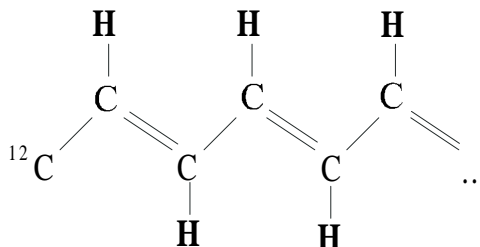


Рис. 2.11. Химическая структура полиацетилен (полиэна)

Особенностью такой структуры, в отличие от рассматриваемой в предыдущем разделе, является *несимметрия косвенного взаимодействия* отдельного ядерного спина с правым $I_{L<}$ и левым $I_{L>}$ соседним спином (одинарные и двойные химические связи).

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 [2.58]. Он рассмотрел одномерную цепочку 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 выключение правых (А-В) *или* левых (В-А) взаимодействий *одновременно у всех кубитов цепочки*. В результате в системе образуется либо фаза α , либо фаза β из одинаково взаимодействующих А-В или В-А пар. На всех парах каждой фазы одновременно выполняются любые двухкубитовые операции. При этом роль, как логических кубитов, так и контрольной единицы CU играют в отличие от предыдущего случая не группы, а отдельные спины. После проведения SWAP операции, производится переключение правых и левых взаимодействий при этом логический кубит перемещается по регистру направо, а контрольная единица налево. 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. Очевидно, что предложенная в [2.58] схема, непосредственно переносится и на рассматриваемые нами антиферромагнитные гомоядерные структуры.

Усложнение здесь связано с необходимостью переключения левых и правых взаимодействий. В качестве одного из способов таких 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.

Однако для выключения и включения указанных взаимодействий в случае их несимметрии в этой схеме квантового автомата можно было бы, как нам представляется, *обойтись и без электрических электродов*.

Для этого можно воспользоваться *методом насыщения резонанса* запрещенных при идеальном изотропном гайзенберговском взаимодействии переходов между запутанными состояниями $|0, 0\rangle = \sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$, и $|1, 0\rangle = \sqrt{1/2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, разделенными для соответствующих пар ядерных спинов энергиями I_{\leftarrow} или I_{\rightarrow} (см. Рис.1.5 и 2.3). В результате произойдет выравнивание населенностей этих состояний, что эквивалентно, если отвлечься от влияния взаимодействий с другими спинами, выключению взаимодействия для рассматриваемой пары ядерных спинов.

В рассматриваемом случае 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 двухспиновой системы. Вместо двух полностью запутанных состояний в этом случае двухспиновой системы мы получаем *четыре запутанных состояния*. При переходе к периодической квазиодномерной цепочке соответствующие уровни превращаются в зоны, с шириной, определяемой взаимодействием между ядерными спинами соседних ячеек [2.59].

В слабых полях при не очень сильной анизотропии косвенного обменного взаимодействия основное состояние цепочки ядерных спинов типа кольца будет не полностью запутанным (см. раздел 1.6). Если зеemanовская энергия ядерных спинов в магнитном поле больше энергии взаимодействия между ядерными спинами, основным состоянием является незапутанное состояние со спинами, ориентированными, соответственно, в каждой подрешетке по полю и против поля. Не полностью запутанными состояниями является теперь пара вышележащих состояний. Вынужденные переходы между этими и двумя вышележащими не полностью запутанными состояниями, расположенными между незапутанными состояниями, уже не являются запрещенными.

Учитывая большие значения времен релаксации при низких температурах, можно ожидать, что насыщение переходов между теми или другими парами из четырех состояний будет достигнуто при умеренных значениях напряженности радиочастотного поля.

Здесь, как и в предыдущих случаях, переход к ансамблевому варианту обещает определенные преимущества.

Для оценки возможности селективного насыщения таких переходов и окончательной оценки перспективности обсуждаемого варианте квантового регистра, потребуется проведения экспериментальных исследований по определению спектра ЯМР, ширин отдельных линий и времен релаксации подобных органических структур с антиферромагнитным упорядочением электронных спинов.

2.9.4. 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 ядерный спин $I = 1/2$, фуллеренах C_{60} был предложен Дж.Твамли [2.60]. Эндоатомы располагаются в геометрическом центре клетки фуллерена, их основное электронное состояние является кватретом $S = 3/2$. Они хорошо экранированы от внешних электрических полей. Предполагается разместить такие молекул на поверхности кремния (100)-2х вплотную к друг другу (расстояние между атомами $\sim 1\text{нм}$). Электронные волновые функции сильно сжаты внутри клеток C_{60} и поэтому электронное обменное взаимодействие между эндоатомами отсутствует. Очень резкие ЭПР спектры этих молекул показывают, что продольные времена релаксации при $T \sim 7\text{К}$ составляют $\sim 1\text{с}$, а поперечные $\sim 20\text{мкс}$ независимо от температуры.

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 гамильтониан электрон-ядерной спиновой системы пары АВ ($A = ^{15}\text{N}@C_{60}$, $B = ^{31}\text{P}@C_{60}$) в виде (знак \otimes опущен)

$$\mathbf{H} = \omega_S \mathbf{S}_{Az} - \omega_{AI} \mathbf{I}_{Az} + A_A \mathbf{S}_{Az} \mathbf{I}_{Az} + \omega_S \mathbf{S}_{Bz} - \omega_{BI} \mathbf{I}_{Bz} + A_B \mathbf{S}_{Bz} \mathbf{I}_{Bz} + J \mathbf{S}_{Az} \mathbf{S}_{Bz} , \quad (2.100)$$

где $J \sim 50 / r^3$ МГц, постоянные сверхтонкого взаимодействия для эндоатомов $A_A = 21,2$ МГц и $A_B = 136,4$ МГц (для ^{31}P в кремнии $A = 116$ 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 (2.100). В [2.60] 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 с помощью соответствующей последовательности радио и СВЧ импульсов можно с высокой точностью исключить это сверхтонкое взаимодействие. Это позволяет сохранять информацию на состояниях ядерных спинов в течение очень большого времени между логическими операциями.

При выполнении логической квантовой операции U внутренние электронные кубиты используются в качестве локальной «шины», по которой передается квантовая информация, записанная на ядерных спинах. Шина внутренних электронных кубитов вначале алгоритма переводится в основное исходное состояние ($|M_S\rangle = |-1/2\rangle$ для всех молекул) (инициализация) и затем после выполнения операции U возвращается в основное состояние.

Алгоритм состоим в следующем [2.60]:

а) Квантовая информация записывается на состояниях ядерных спинов молекул A и B при сохранении основных электронных состояний.

б) Производится обмен квантовой информации (электрон-ядерная операция SWAP), записанной во всех молекулах B от их ядер к их электронным внутренним кубитам.

в) Для выполнения унитарной операции U над некоторыми выделенными молекулами A производится обращение состояний электронных кубитов у всех молекул A , при условии определенных состояний соседних электронных кубитов B .

г) Производится обратный обмен информацией от электронов к ядерным спинам (операция SWAP) молекул B . В этот момент все внутренние электронные кубиты возвращаются в свое основное состояние за исключением выделенных молекул A .

д) Производится операция контролируемое U (например электрон-ядерная операция CNOT) над ядерными спинами всех молекул, внутренние электронные состояния которых используются как контролирующие.

е) Наконец, выполняются в обратном порядке операции г), в), б). Все внутренние электронные кубиты возвращаются в исходное состояние, а состояния ядерных спинов 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 предлагаются различные высокочувствительные методы [2.60].

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) Использование гетероядерной структуры с двумя типами содержащих ядерные спины эндоатомов ^{15}N и ^{31}P , из которых ^{15}N в отличие от ^{31}P имеет распространенность в природе 0,366 %, а бесспиновый изотоп ^{12}C имеет распространенность 98,9 %, может привести к

процессам декогерентизации ядерных спиновых состояний, если не прибегать к 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, играющих 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 резонансные частоты ядерных спинов эндоатомов будут 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 с двумя резонансными частотами позволяет исключить многочисленные металлические шины, затворы и многочастотные генераторы импульсов, требуемые для локального управления кубитами, в результате чего существенно упрощается конструкция квантового регистра и исчезает механизм декогерентизации, связанный с электрическими шумами.

б) Сложности, связанные с конструкцией компьютера и организацией квантовых операций переносятся на программное обеспечение квантового клеточного автомата.

в) Квантовые клеточные автоматы возможно способны выполнять программы, которые не доступны обычным квантовым схемам. Например, операции построенные из определенного числа двухкубитовых операций CNOT и однокубитовых операций Адамара, относящиеся к группе Клиффорда, на одностороннем (one-way) квантовом компьютере могут быть выполнены за *один шаг* [2.61].

г) Важным свойством является возможность запараллелить квантовые вычислительные операции при использовании ансамблевого подхода, что может также существенно упростить и считывание информации.

2.10. 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 также и некоторые *естественные кристаллы* с ядерными спинами $I = 1/2$ у основных атомов, в частности, антиферромагнетики на основе диэлектрических *соединений редкоземельных и переходных элементов* или диамагнитные кристаллы с дипольным антиферромагнитным упорядочением ядерных спинов.

Далее будет проведен анализ основных свойств электрон-ядерной спиновой системы антиферромагнетика, существенных для ЯМР квантовых операций на основе таких структур.

2.10.1. Гамильтониан электрон-ядерной системы спинов в антиферромагнетике

Ансамбль N независимых "молекул", с одинаковыми локализованными магнитными атомами с *одним электронным* ($S = 1/2$) и *одним ядерным* спином $I = 1/2$, могут образовывать систему регулярных однодоменных цепочек. Такая цепочка может состоять из *двух* магнитных подцепочек (подрешеток) **A** и **B** из $L \gg 1$ магнитных атомов, вставленных друг в друга, и отличающихся преимущественным направлением намагниченности (*антиферромагнитный* тип).

В качестве «молекул» могут рассматриваться также и определенные двух- и трехмерные структуры из магнитных атомов конечных размеров, образованных в кристаллическом твердом теле.

Исходный гамильтониан для *двух* магнитных подрешеток (положение атомов подрешеток нумеруется индексами i и j) с числом L атомов в каждой подрешетке представим в виде суммы:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_Z + \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}_{dd} + \mathbf{H}_B + \Delta\mathbf{H}_I = \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B + \Delta\mathbf{H}_I. \quad (2.101)$$

Подсистема, описываемая в (2.101) гамильтонианом \mathbf{H}_S , учитывает *зеemanовское* взаимодействие электронных спинов \mathbf{H}_Z с внешним полем **B**, направленным по оси z , *косвенное обменное* взаимодействие \mathbf{H}_{ex} и *диполь-дипольное магнитное* взаимодействие \mathbf{H}_{dd} электронных спинов. Она является *окружением* по отношению к подсистеме ядерных спинов. Гамильтониан \mathbf{H}_B определяется степенями свободы кристаллической решетки (фононы). Бу-

дем предполагать здесь, что электроны проводимости и примесные магнитные атомы без ядерных спинов отсутствуют, а вклад спин-орбитального взаимодействия в отдельном атоме не учитывается.

Диполь-дипольное магнитное взаимодействие электронных спинов \mathbf{H}_{dd} удобно разделить на **близкодействующую** (в пределах ближайших соседей) и **дальнодействующую** части. Дальнодействующая часть **диполь-дипольного** взаимодействия между электронными спинами ответственна за размагничивающее поле и обычно 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 электростатического происхождения (включающей и косвенный обмен) с ближайшими соседями (другой подрешетки) антиферромагнитного типа \mathbf{H}_{ex} . С учетом этой анизотропии гамильтониан электронной спиновой ($S = 1/2$) подсистемы в операторных обозначениях, без использования символа прямого произведения \otimes , имеет вид (здесь снова энергия в единицах частоты, $\omega_S = \gamma_S B$) [2.62]:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_S = \mathbf{H}_Z + \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}_{dd} = \omega_S \left(\sum_i^L \mathbf{S}_{Az}(i) + \sum_j^L \mathbf{S}_{Bz}(j) \right) + \\ + \sum_{i, \delta}^L J_{i, i+\delta} \left(\xi \mathbf{S}_{Ax}(i) \cdot \mathbf{S}_{Bx}(i+\delta) + \eta \mathbf{S}_{Ay}(i) \cdot \mathbf{S}_{By}(i+\delta) + \mathbf{S}_{Az}(i) \cdot \mathbf{S}_{Bz}(i+\delta) \right), \end{aligned} \quad (2.102)$$

где $-1 \leq \xi, \eta \leq 1$, $\delta = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm Z/2$, Z — число ближайших соседних магнитных атомов, участвующих в близкодействующем (будем называть его также "обменным") анизотропном взаимодействии.

Далее мы ограничимся рассмотрением симметричной антиферромагнитной **одноосной** структуры (ромбоэдрический, тетрагональный или гексагональный кристалл) с легкой осью симметрии, параллельной внешнему полю, для которой гамильтониан (2.102) представим в виде (здесь $J_{i, i+\delta} = J > 0$, $J\xi = J\eta = J_{\perp}$):

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_S = \omega_S \cdot \left(\sum_i^L \mathbf{S}_{Az}(i) + \sum_j^L \mathbf{S}_{Bz}(j) \right) + \\ + \sum_{i, \delta}^L \{ J_{\perp} / 2 (\mathbf{S}_A^+(i) \cdot \mathbf{S}_B^-(i+\delta) + \mathbf{S}_A^-(i) \cdot \mathbf{S}_B^+(i+\delta)) + J \mathbf{S}_{Az}(i) \cdot \mathbf{S}_{Bz}(i+\delta) \}, \end{aligned} \quad (2.103)$$

где $0 \leq J - J_{\perp} = J_A$ — постоянная анизотропии. Случай $J_{\perp}/J \ll 1$ соответствует наличию легкой оси антиферромагнетизма, параллельной оси z (направление внешнего поля \mathbf{B}).

Принятые здесь обозначения переходят в обозначения, использованные в [2.63, 2.64], путем замены в выражении (2.103) $J_{\perp} \Rightarrow \gamma_S \mu_0 H_E / (Z |\langle 2S_{A(B)z} \rangle|)$, $J - J_{\perp} \Rightarrow \gamma_S \mu_0 H_A / (Z |\langle 2S_{A(B)z} \rangle|)$, где H_E и H_A — так называемые эффективные поля обмена и анизотропии.

В условиях низких температур электронные спины находятся преимущественно в основном состоянии, а их отклонения от основного состояния малы и могут рассматриваться в приближении *спиновых волн*.

Перейдем далее к *операторам 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 (**Приложение П5**).

Гамильтониан симметричной структуры антиферромагнетика типа «легкая ось» принимает вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_S = & -LJZ/2 + \sum_{\mathbf{q}} \{J^+ a^+(\mathbf{q})a(\mathbf{q}) + J^- b^+(-\mathbf{q})b(-\mathbf{q}) + \\ & + Z\gamma_{\mathbf{q}} J_{\perp} (a^+(\mathbf{q})b^+(-\mathbf{q}) + a(\mathbf{q})b(-\mathbf{q}))\}, \end{aligned} \quad (2.104)$$

где для решетки с центром инверсии имеем

$$J^{\pm} = (JZ \pm \omega_S), \quad \gamma_{\mathbf{q}} = \gamma_{-\mathbf{q}} = 1/Z \sum_{\delta} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}), \quad \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} = 0. \quad (2.105)$$

В частности, для простой тетрагональной решетки (a, c — постоянные решетки)

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \gamma_{-\mathbf{q}} = \cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z c / 3, \quad Z = 6. \quad (2.106)$$

Для диагонализации гамильтониана (2.104) перейдем к новым двухкомпонентным операторам рождения и уничтожения бозевских квазичастиц–антиферромагнонов $\xi_{\pm}^+(\mathbf{q})$ и $\xi_{\pm}(\mathbf{q})$ с помощью преобразования Боголюбова-Тябликова, которое для рассматриваемого случая запишем в виде [2.65]

$$a(\mathbf{q}) = u_{\mathbf{q}} \xi_{+}(\mathbf{q}) + v_{\mathbf{q}} \xi_{-}^+(-\mathbf{q}), \quad b(-\mathbf{q}) = v_{\mathbf{q}} \xi_{+}^+(\mathbf{q}) + u_{\mathbf{q}} \xi_{-}(-\mathbf{q}), \quad (2.107)$$

где для новых бозевских операторов имеют место перестановочные соотношения

$$[\xi_{\pm}(\mathbf{q}), \xi_{\pm}^+(\mathbf{q}')] = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'},$$

$$[\xi_{\pm}(q), \xi_{\pm}(q')] = [\xi_{\pm}^+(q), \xi_{\pm}^+(q')] = [\xi_{\pm}(q), \xi_{\pm}^+(q')] = [\xi_{\pm}^+(q), \xi_{\pm}(q')] = 0, \quad (2.108)$$

Из четырех собственных значений оператора \mathbf{H}_S условию устойчивости основного состояния спиновой системы антиферромагнетика с легкой осью соответствуют *два положительных* собственных значения энергии спиновых волн [2.62]

$$E_{\pm}(\mathbf{q}, B) = E(\mathbf{q}, 0) \pm \omega_S > 0, \quad E(\mathbf{q}, 0) = JZ \sqrt{1 - (J_{\perp}/J)^2 \gamma_{\mathbf{q}}^2}, \quad (2.109)$$

при этом коэффициенты преобразования [2.65]

$$u_q^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (J_\perp/J)^2 \gamma_q^2}} + 1 \right), \quad v_q^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (J_\perp/J)^2 \gamma_q^2}} - 1 \right), \quad (2.110)$$

Антипараллельная ориентация электронной спиновой поляризации подрешеток в продольном поле сохраняется до критического поля $B_{sf} = \mu_0 \sqrt{(2H_E + H_A)H_A}$, при котором наступает неустойчивость спиновых волн и происходит *ориентационный фазовый переход* из коллинеарного состояния в неколлинеарную *флон-фазу*.

Для гамильтониана электронных спинов в новом базисе теперь получим

$$\mathbf{H}_S = -LJZ/2 - \sum_{\mathbf{q}} JZ(1 - \sqrt{1 - (J_\perp/J)^2 \gamma_q^2}) + \sum_{\mathbf{q}} (E_+(\mathbf{q}, B)N_+(\mathbf{q}) + E_-(\mathbf{q}, B)N_-(\mathbf{q})). \quad (2.111)$$

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 $\mathbf{q} \Rightarrow 0 \quad \gamma_q \Rightarrow 1$:

$$E_\pm(0, B) = E(0, 0) \pm \omega_s = JZ\sqrt{1 - (J_\perp/J)^2} \pm \omega_s = \gamma_s \mu_0 \sqrt{(2H_E + H_A)H_A} \pm \omega_s \quad (2.112)$$

сохраняют положительное значение, то есть антиферромагнетики с легкой осью антиферромагнетизма имеют *щель в энергетическом спектре* $E_\pm(0, B) > 0$, в условиях, когда поле B не превосходит критического значения $B_{sf} \equiv \gamma_s \mu_0 \sqrt{(2H_E + H_A)H_A}$, при котором теряется устойчивость спиновых волн 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 [2.62, 2.65]

$$\begin{aligned} \langle S_{Az} \rangle &= 1/2 - \langle n_A \rangle = \\ &= 1/2 - 1/L \sum_{\mathbf{q}} \langle a^+(\mathbf{q})a(\mathbf{q}) \rangle = 1/2 - 1/L \sum_{\mathbf{q}} (u_q^2 N_+(\mathbf{q}) + v_q^2 (1 + N_-(\mathbf{q}))) = 1/2 - P(T) - \psi, \end{aligned} \quad (2.113)$$

где так называемое квантовое сокращение электронного спина

$$\psi = 1/L \sum_{\mathbf{q}} v_q^2 = 1/2L \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (J_\perp/J)^2 \gamma_q^2}} - 1 \right) < 1/2L \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_q^2}} - 1 \right). \quad (2.114)$$

Для оценки последней суммы воспользуемся результатом, полученным Андерсоном для простой кубической решетки [2.62]. Получим, что лежит в пределах:

$$0 \text{ (для } J_\perp = 0) < \psi < 0,078. \quad (2.115)$$

Для *теплового сокращения спина*

$$P(T) = 1/L \sum_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{q}}^2 + v_{\mathbf{q}}^2) (N_+(\mathbf{q}) + N_-(\mathbf{q})), \quad (2.116)$$

при низких температурах, учитывая (2.109), получим

$$\begin{aligned} P(T) &= 1/L \sum_{\mathbf{q}} \frac{JZ}{E(\mathbf{q},0)} (\exp(E_+(\mathbf{q},B)/T - 1)^{-1} + (\exp(E_-(\mathbf{q},B)/T - 1)^{-1}) \approx \\ &\approx 1/L \sum_{\mathbf{q}} \frac{JZ}{E(\mathbf{q},0)} 2\text{ch}(\omega_s/T) \exp(-E(0,0)/T) \end{aligned} \quad (2.117)$$

Мы видим, что для антиферромагнетика типа *легкой оси*, когда гамильтониан электронных спинов для одноосного кристалла имеет вид (2.103) при $\mathbf{q} \Rightarrow 0$, $T \ll E(0,0)$ тепловое сокращение $P(T) \Rightarrow 0$, то есть в основном электронном спиновом состоянии тепловые флуктуации практически *отсутствуют*. Сокращение электронного спина ψ , определяемое только квантовыми флуктуациями, как это следует из (2.115), оказывается *достаточно малым*. Оно строго отсутствует при $J_{\perp} = 0$ (модель Изинга). Заметим, что в случае антиферромагнетика типа легкой плоскости ($\psi \neq 0$), частота ЯМР зависит от состояния соседних спинов в большей степени, чем в случае легкой оси [2.65].

Использование приближения Тябликова (**Приложение П5**) позволяет распространить результат (2.111) на конечные температуры, при этом вместо простой формулы возникает система связанных трансцендентных уравнений для $\langle S_{Az} \rangle$ и $\langle S_{Bz} \rangle$ [2.65]. Однако оно здесь не требуется и мы можем принять, что в антиферромагнетиках типа легкой оси сокращением спина можно пренебречь.

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 [2.66]. Если фазовую скорость спиновой волны оценить, как Ja , где постоянная обменного взаимодействия $J \sim 10^{12} \text{с}^{-1}$, a — постоянная решетки, то длина когерентности спиновых волн в антиферромагнетике соответствует диапазону $10^6 a - 10^2 a$, то есть достаточно велика.

2.10.2. Косвенное взаимодействие между ядерными спинами в антиферромагнетике

Гамильтониан $\Delta \mathbf{H}_I$ в (2.101) определяется *зеemanовским* взаимодействием ядерных спинов с внешним полем, *сверхтонким* взаимодействием с своими электронами в магнитных атомах и магнитным *диполь-дипольным взаимодействием* с электронными спинами других атомов:

$$\begin{aligned} \Delta H_I = & -\omega_1 \left(\sum_i^L \mathbf{I}_{A_z}(i) + \sum_j^L \mathbf{I}_{B_z}(j) \right) + \sum_{\alpha,\beta} A_{\alpha\beta} \left(\sum_i^L (\mathbf{S}_{A_\alpha}(i) \cdot \mathbf{I}_{A_\beta}) + \sum_j^L (\mathbf{S}_{B_\alpha}(j) \cdot \mathbf{I}_{B_\beta}(j)) \right) - \\ & - \sum_{\alpha,\beta} \sum_{ij}^L D_{\alpha\beta,ij} \cdot \delta_{j,i+\delta} (\mathbf{S}_{A_\alpha}(i) \cdot \mathbf{I}_{B_\beta}(j) + \mathbf{I}_{A_\alpha}(i) \cdot \mathbf{S}_{B_\beta}(j)), \end{aligned} \quad (2.118)$$

где

$$D_{\alpha\beta,ij} = (\mu_0/4\pi) \gamma_S \gamma_I \hbar (\delta_{\alpha\beta} r_{ij}^2 - 3 r_{\alpha ij} r_{\beta ij}) / r_{ij}^5, \quad (2.119)$$

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-1} \text{ Тл}^2 \text{ см}^3 / \text{Дж}, \quad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = -\mathbf{r}_{i,j} \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|.$$

Анизотропия сверхтонкого взаимодействия определяется вкладом диполь-дипольного взаимодействия ядерного спина со своим электроном, состояние которого содержит примесь состояний, отличных от S-состояния. Далее предположим, что антиферромагнитная среда трансляционно-инвариантна и Z ближайших соседних атомов расположены таким симметричным образом, что

$$D_{\alpha\beta,i,i+\delta} = D_{\alpha\beta,i,i-\delta} = D_{\alpha\beta,i+\delta,i} = D_{\alpha\beta,\delta}. \quad (2.120)$$

Прямое диполь-дипольное магнитное взаимодействие *между ядерными спинами мало* по сравнению с косвенным взаимодействием через электронные состояния атомов и далее не учитывается.

Полагая, что магнитное поле направлено по оси симметрии *легкоосного антиферромагнетика* (ось z) и учитывая, что при низких температурах сокращение электронного спина мало, то есть спины подрешеток практически полностью поляризованы по ($\langle S_{Az} \rangle \approx 1/2$) и против поля ($\langle S_{Bz} \rangle \approx -1/2$), в качестве исходного гамильтониана для ядерных спинов в *двухподрешеточном одномерном антиферромагнетике* (2.107) с учетом (2.109) будем иметь:

$$\begin{aligned} \Delta H_I = & \sum_{i=1}^L (-\omega_1 + A_{\parallel} / 2 - Z D_{zz}) \cdot \mathbf{I}_{A_z}(i) + \sum_{j=1}^L (-\omega_1 - A_{\parallel} / 2 + Z D_{zz}) \cdot \mathbf{I}_{B_z}(j) + \\ & + \sum_{\alpha,\beta}^3 (1 - \delta_{\alpha z} \delta_{\beta z}) \cdot \{ A_{\alpha\beta} \left(\sum_{i=1}^L (\mathbf{I}_{A_\alpha}(i) \cdot \mathbf{S}_{A_\beta}(i) + \sum_{j=1}^L \mathbf{I}_{B_\alpha}(j) \cdot \mathbf{S}_{B_\beta}(j) + \right. \\ & \left. + \sum_{\delta}^Z D_{\alpha\beta,\delta} \left(\sum_{i=1}^L \mathbf{I}_{A_\beta}(i) \cdot \mathbf{S}_{B_\alpha}(i+\delta) + \sum_{j=1}^L \mathbf{S}_{A_\alpha}(j+\delta) \cdot \mathbf{I}_{B_\beta}(j) \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.121)$$

где для диагональных элементов тензора $A_{\alpha\beta}$ использованы обозначения $A_{zz} = A_{\parallel}$ и $A_{xx} = A_{yy} = A_{\perp}$. Часть сверхтонкого поля, зависящая от диагонального элемента тензора A_{\parallel} и тензора диполь-дипольного взаимодействия ядерных спинов с электронными спинами Z

ближайших соседей $Z D_{zz} \equiv \sum_{\delta=1}^Z D_{zz,\delta}$ определяют несущественный постоянный сдвиг резонансных частот ЯМР в упорядоченной системе электронных спинов:

$$(\omega^{\pm} = -\omega_1 \pm A_{\parallel} / 2 \mp Z D_{zz}). \quad (2.122)$$

Как следует из соображений симметрии, у тензора $A_{\alpha\beta}$ одноосных кристаллов, которые и представляют интерес для дальнейшего, симметричные недиагональные элементы $A_{zx} = A_{zy} = 0$, но могут быть отличны от нуля антисимметричные недиагональные элементы $A_{xy} = -A_{yx}$. Однако если анизотропия мала $|A_{\perp} - A_{\parallel}|$, $|A_{xy}| \ll A_{\parallel}$ то антисимметричную часть можно не учитывать [2.67].

Диагональные элементы диполь-дипольного взаимодействия D_{xx} , D_{yy} обычно малы по сравнению со сверхтонким взаимодействием с собственным электронным спином, и учитываться не будут. Но отличные от нуля *недиагональные элементы* взаимодействия, содержащие параметры $D_{xz,ij}$, $D_{yz,ij}$, ответственные за адиабатическую декогерентизацию квантовых состояний ядерных спинов и за продольную часть *косвенного* взаимодействия мы далее *сохраним*

$$D_{z,\delta}^+ = D_{z,-\delta}^+ = D_{xz,\delta} + iD_{yz,\delta} = -3(\mu_0/4\pi)\gamma_S\gamma_I\hbar\cos\theta_\delta\exp(i\varphi_\delta)/r_\delta^3, \quad (2.123)$$

где углы θ_δ и φ_δ определяют направление вектора $\mathbf{r}_{i,i+\delta} = \mathbf{r}_\delta$.

Для гамильтониана ядерной спиновой системы окончательно получим

$$\Delta\mathbf{H}_I = \omega^+ \sum_{i=1}^L \mathbf{I}_{A_z}(i) + \omega^- \sum_{j=1}^L \mathbf{I}_{B_z}(j) + \Delta\mathbf{H}_{SI} + \text{herm. conjugate}, \quad (2.124)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{H}_{SI} = & A_{\perp}/2 \left\{ \sum_{i=1}^L \mathbf{S}_A^+(i) \cdot \mathbf{I}_A^-(i) + \sum_{j=1}^L \mathbf{S}_B^+(j) \cdot \mathbf{I}_B^-(j) \right\} - \\ & - \sum_{\delta=1}^Z D_{z,\delta}^+ / 2 \left\{ \sum_{i=1}^L \mathbf{I}_{A_z}(i) \cdot \mathbf{S}_B^-(i+\delta) + \sum_{j=1}^L \mathbf{S}_A^-(j+\delta) \cdot \mathbf{I}_{B_z}(j) \right\} \end{aligned} \quad (2.125)$$

– гамильтониан взаимодействия ядерных спинов с электронами своих и соседних атомов.

Переходя в (2.125) в представление спиновых волн, получим

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{H}_{SI} = & A_{\perp} / 2 \cdot \sqrt{1/L} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{i=1}^L (u_{\mathbf{q}} \xi_+^+(\mathbf{q}) + v_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \xi_-^+(-\mathbf{q})) \mathbf{I}_A^-(i) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i) + \right. \\ & \left. + \sum_{j=1}^L (v_{\mathbf{q}} \xi_+^+(\mathbf{q}) + u_{\mathbf{q}} \xi_-^+(-\mathbf{q})) \mathbf{I}_B^-(j) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) \right\} - \\ & - \sum_{\delta}^Z D_{z,\delta}^+ / 2\sqrt{1/L} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{i=1}^L (v_{\mathbf{q}} \xi_+^+(\mathbf{q}) + u_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \xi_-^+(-\mathbf{q})) \mathbf{I}_{A_z}(i) \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_\delta)) + \right. \\ & \left. + \sum_{j=1}^L (u_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \xi_+^+(\mathbf{q}) + v_{\mathbf{q}} \xi_-^+(-\mathbf{q})) \mathbf{I}_{B_z}(j) \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_\delta)) \right\} \end{aligned} \quad (2.126)$$

описывает взаимодействие ядерных спинов со спиновыми волнами в электронной спиновой системе антиферромагнетика.

Косвенное взаимодействие между ядерными спинами, вообще говоря, осуществляется как через спиновые волны, так и через фононы. Из-за магнитоупругого взаимодействия соб-

ственными колебаниями системы являются связанные магнон-фононные моды [2.59]. Однако в условиях очень низких температурах вклад фононных мод не играет существенной роли. Роль окружения для ядерных спинов играет тогда только электронная система и возбуждаемые в ней спиновые волны.

Рассматривая далее оператор $\Delta\mathbf{H}_{\text{SI}}$ как возмущение, имеющее недиагональные матричные элементы относительно электронных состояний, найдем выражение для эффективного гамильтониана ядерных спинов, производя вычисление во втором порядке теории возмущений для основного состояния электронной системы.

Недиагональные матричные элементы $\langle 0 | \Delta\mathbf{H}_{\text{SI}} | E_{\pm}(\mathbf{q}) \rangle$ выражаются через матричные элементы магнонных операторов $\xi_{\pm}(\mathbf{q}) = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$, $\xi_{\pm}^{\pm}(\mathbf{q}) = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$. Энергии двух магнонных состояний

$$E_{\pm}(\mathbf{q}, B) = JZ\sqrt{1 - (J_{\perp}/J)^2\gamma_{\mathbf{q}}^2} \pm \omega_{\text{S}} = E(\mathbf{q}, 0) \pm \omega_{\text{S}} > 0. \quad (2.127)$$

В результате получим выражение для эффективного гамильтониана одноосного антиферромагнетика, который находится в основном электронном состоянии, учитывающее *зеemannовскую* часть, *обобщенное косвенное сул-накамуровское* взаимодействие с *учетом недиагональной части диполь-дипольного взаимодействия*:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{I,eff}} &= \omega^+ \sum_{i=1}^L \mathbf{I}_{\text{Az}}(i) + \omega^- \sum_{j=1}^L \mathbf{I}_{\text{Bz}}(j) - \sum_{\mathbf{q}} \left| \langle 0 | \Delta\mathbf{H}_{\text{I}\xi} | E_{-}(\mathbf{q}, 0) \rangle \right|^2 (1/E_{-}(\mathbf{q}, B) + 1/E_{+}(\mathbf{q}, B)) = \\ &= \sum_{i=1}^L (\omega^+ + b/2) \mathbf{I}_{\text{Az}}(i) + \sum_{j=1}^L (\omega^- - b/2) \mathbf{I}_{\text{Bz}}(j) - d/2 \cdot \left(\sum_{i=1}^L \mathbf{I}_{\text{Az}}^2 + \sum_{j=1}^L \mathbf{I}_{\text{Bz}}^2 \right) - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'}^L \{ B_{i,i'} (\mathbf{I}_{\text{A}}^+(i) \mathbf{I}_{\text{A}}^-(i') + \mathbf{I}_{\text{A}}^-(i) \mathbf{I}_{\text{A}}^+(i')) + I_{i,i'} \mathbf{I}_{\text{Az}}(i) \mathbf{I}_{\text{Az}}(i') \} - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{j \neq j'}^L \{ B_{j,j'} (\mathbf{I}_{\text{B}}^+(j) \mathbf{I}_{\text{B}}^-(j') + \mathbf{I}_{\text{B}}^-(j) \mathbf{I}_{\text{B}}^+(j')) + I_{j,j'} \mathbf{I}_{\text{Bz}}(j) \mathbf{I}_{\text{Bz}}(j') \} - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^L \{ C_{i,j} (\mathbf{I}_{\text{A}}^+(i) \mathbf{I}_{\text{B}}^-(j) + \mathbf{I}_{\text{A}}^-(i) \mathbf{I}_{\text{B}}^+(j)) + I_{i,j} \mathbf{I}_{\text{Az}}(i) \mathbf{I}_{\text{Bz}}(j) \} - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'}^L E_{i,i'}^+ (\mathbf{I}_{\text{A}}^-(i) \mathbf{I}_{\text{Az}}(i') + \mathbf{I}_{\text{Az}}(i') \mathbf{I}_{\text{A}}^-(i)) - \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'}^L E_{i,i'}^- (\mathbf{I}_{\text{A}}^+(i) \mathbf{I}_{\text{Az}}(i') + \mathbf{I}_{\text{Az}}(i') \mathbf{I}_{\text{A}}^+(i)) - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^L F_{i,j}^+ (\mathbf{I}_{\text{A}}^-(i) \mathbf{I}_{\text{Bz}}(j) + \mathbf{I}_{\text{Az}}(i) \mathbf{I}_{\text{B}}^-(j)) - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^L F_{i,j}^- (\mathbf{I}_{\text{A}}^+(i) \mathbf{I}_{\text{Bz}}(j) + \mathbf{I}_{\text{Az}}(i) \mathbf{I}_{\text{B}}^+(j)) - \end{aligned} \quad (2.128)$$

где в результате простых, но громоздких преобразований будем иметь

$$b = A_{\perp}^2 / L \sum_{\mathbf{q}} E(\mathbf{q}, 0) / (E(\mathbf{q}, 0)^2 - \omega_{\text{S}}^2), \quad d = 1 / L \sum_{\mathbf{q}} \left| \sum_{\delta}^Z D_{z,\delta}^+ \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}) \right|^2 JZ / (E(\mathbf{q}, 0)^2 - \omega_{\text{S}}^2)$$

$$\begin{aligned}
B_{i,i'} &= A_{\perp}^2 / 2L \sum_{\mathbf{q}} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,i'}) JZ / (E(\mathbf{q},0)^2 - \omega_s^2), \\
I_{i,i'} &= 1/L \sum_{\mathbf{q}} \left| \sum_{\delta}^Z D_{z,\delta}^+ \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}) \right|^2 \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,i'}) JZ / (E(\mathbf{q},0)^2 - \omega_s^2) \\
C_{i,j} &= A_{\perp}^2 / 2L \sum_{\mathbf{q}} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,j}) J_{\perp} Z \gamma_{\mathbf{q}} / (E(\mathbf{q},0)^2 - \omega_s^2) \\
D_{i,j} &= 1/L \sum_{\mathbf{q}} \left| \sum_{\delta}^Z D_{z,\delta}^+ \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}) \right|^2 \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,i'}) J_{\perp} Z / (E(\mathbf{q},0)^2 - \omega_s^2) \\
E_{i,i'}^{\pm} &= A_{\perp} / 2L \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\delta}^Z D_{z,\delta}^{\pm} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}) J_{\perp} Z \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,i'}) / (E(\mathbf{q},0)^2 - \omega_s^2), \\
F_{i,j}^{\pm} &= A_{\perp} / L \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\delta}^Z (D_{z,\delta}^{\pm} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}) JZ \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{i,i'}) / (E(\mathbf{q},0)^2 - \omega_s^2)). \tag{2.129}
\end{aligned}$$

Если не учитывать диполь-дипольное взаимодействие ядерных спинов с электронными спинами соседних атомов, то для одноосного кристалла косвенное взаимодействие через магноты, обусловленное сверхтонким взаимодействием, будет иметь место, между *поперечными* составляющими ядерных спинов как внутри каждой из подрешеток, так и для разных подрешеток, то есть является *несекулярной* (не коммутирует с невозмущенным гамильтонианом) и, следовательно, не влияет на адиабатическую декогерентизацию. Указанное косвенное взаимодействие, называемое *сул-накамуровким*, оказывается и основным механизмом релаксации состояний ядерных спинов при низких температурах.

Выполненный нами учет недиагональных составляющих диполь-дипольного взаимодействия ядерных магнитных моментов с электронными спинами соседних атомов приводит к появлению и дополнительных недиагональных, а также и секулярных составляющих косвенного взаимодействия между ядерными спинами.

Как следует из выражений (2.129) основной вклад в суммы по \mathbf{q} дают слагаемые, при которых $E(\mathbf{q},0)^2 - \omega_s^2 \Rightarrow 0$. Вблизи антиферромагнитного резонанса это соответствует малым значениям \mathbf{q} . Для оценки характерных значений \mathbf{q} запишем для простой кубической решетки запишем $\gamma_{\mathbf{q}} \approx 1 - 3(qa)^2 / 2$, где a — постоянная решетки. Характерный радиус косвенного взаимодействия ядерных спинов b_0 принадлежащих различным атомам в антиферромагнетике определяется через обратную величину волнового вектора \mathbf{q} .

В результате получим оценку

$$b_0 \approx a \frac{J_{\perp}}{\sqrt{2E(0,0)(E(0,0) - \omega_s)}}, \tag{2.130}$$

из которой следует, что эффективный радиус ядерных взаимодействий в антиферромагнетике может быть вблизи антиферромагнитного резонанса достаточно большим.

Однако при определенном подборе параметров эффективный радиус взаимодействия может быть сделан близким к постоянной решетки, и тогда можно будет учитывать взаимодействие ядерных спинов одной подрешетки А только с соседними спинами другой подрешетки В. Тогда в качестве *модельного гамильтониана* примем основную *секулярную* (коммутирующую с невозмущенным гамильтонианом $\mathbf{H}_0 = \omega^+ \sum_{i=1}^L \mathbf{I}_{A_z}(i) + \omega^- \sum_{j=1}^L \mathbf{I}_{B_z}(j)$) часть гамильтониана (2.128)

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_I = & \sum_{i=1}^L (\omega^+ + b/2 - d/2 \cdot \mathbf{I}_{A_z}(i)) \cdot \mathbf{I}_{A_z}(i) + \sum_{j=1}^L (\omega^- - b/2 - d/2 \cdot \mathbf{I}_{B_z}(j)) \cdot \mathbf{I}_{B_z}(j) - \\ & - \sum_{i=1, \delta}^L (1/6) \{ (I_{i,i+\delta} - 2C_{i,i+\delta}) (3\mathbf{I}_{A_z}(i)\mathbf{I}_{B_z}(i+\delta) - \mathbf{I}_A(i)\mathbf{I}_B(i+\delta)) + \\ & + (I_{i,i+\delta} + 4C_{i,i+\delta}) \mathbf{I}_A(i) \cdot \mathbf{I}_B(i+\delta) \}. \end{aligned} \quad (2.131)$$

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} и B можно добиться существенного уменьшения этого взаимодействия $(I_{i,i+\delta} - 2C_{i,i+\delta}) \rightarrow 0$.

Последнее слагаемое приводит к некоторому, так называемому «обменному» сужению резонансных линий [2.32]. Отметим, что *это «обменное» взаимодействие* между ядерными спинами *имеет ферромагнитный характер* (отрицательно).

Из выражения (2.131) для линейной цепочки с антиферромагнитным упорядочением, вводя обозначения: $\delta = \pm 1$, $I_{i,i+\delta}/2 = I_1$, $I_{zA(B)}(i-1) = m_{<}$, $I_{zA(B)}(i+1) = m_{>}$ и полагая $d \ll b$, выделим часть, определяющую только резонансные частоты ядерных спинов подрешеток А и В:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_I = & \sum_{i=1}^L (-\omega_1 + (A_{\parallel} + b)/2 - ZD_{zz} - I_1(m_{<} + m_{>})) \cdot \mathbf{I}_{A_z}(i) + \\ = & \sum_{i=1}^L (-\omega_1 - (A_{\parallel} + b)/2 + ZD_{zz} - I_1(m_{<} + m_{>})) \cdot \mathbf{I}_{B_z}(i). \end{aligned} \quad (2.132)$$

Мы видим, что с точностью до обозначений значения резонансных частот совпадают с использованными ранее $\omega_{A,B}(m_{<} + m_{>})$ в (2.94).

2.10.3. Декогерентизация состояний ядерных спинов в легкоосных антиферромагнетиках

Процессы релаксации квантовых состояний ядерных спинов в антиферромагнетиках при низких температурах определяется с активной ролью электронных спин-волновых процессов [2.59, 2.68]. Время продольной релаксации ядерных спинов в этом случае очень велико,

поскольку из-за большой разности энергий ядерных переходов и антиферромагнонов одномагنونные диссипативные 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 Мори [2.59], запишем в наших обозначениях:

$$1/T_2 \sim (A_{\perp}^2/J_{\perp}) (T/J_{\perp})^3 (E(0,0)/T) \exp(-E(0,0)/T), \quad (2.133)$$

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 [2.59]

$$\sqrt{M_2} \approx (1/10) \frac{A_{\perp}^2}{(J - J_{\perp})^{1/2} J_{\perp}^{1/2}}, \quad (2.134)$$

откуда для $J \sim J_{\perp} \sim 10^{13}$ радГц, $A_{\perp} \sim 10^8$ радГц, получим оценку $\sqrt{M_2} \sim 100$ радГц. Характерное поперечное время релаксации (то есть декогерентизации), определяемое этим механизмом, составит 10^{-2} с, что является недостаточно большой величиной для полномасштабных ЯМР квантовых компьютеров.

Однако время декогерентизации в этом случае может быть увеличено, если учесть отмеченную выше возможность существенного уменьшения секулярной части «псевдодипольного» взаимодействия путем выбора соответствующих параметров.

Существенного увеличения времени поперечной ядерной релаксации (однокубитовой декогерентизации), определяемой указанной частью секулярного гамильтониана в (2.131), 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 [2.7, 2.69].

Выше рассмотренное относится к однокубитовой релаксации и декогерентизации в системах, в которых отсутствуют когерентные запутанные состояния. Состояние же многокубитового квантового регистра в виде антиферромагнитной цепочки, как отмечалось в разде-

ле **1.6**, может быть содержать запутанные состояния. Запутанность в квантовом регистре может возникать также в результате квантовых операций.

Вернемся теперь к рассмотрению двухподрешеточные *цепочки ядерных спинов* в виде кольца. Поскольку сул-накамуровское «обменное» взаимодействие между ядерными спинами имеет ферромагнитный характер, и если предполагать, что эффективные резонансные частоты подрешеток $\omega_1 \neq \omega_2$ имеют разные знаки (2.131), то заменяя в уравнении Брейта-Раби (2.20) $A \rightarrow -I_1$ и $\omega_S \rightarrow \omega_1$, $\omega_I \rightarrow \omega_2$ получим, что при

$$(\omega_1 + \omega_2)^2 > I_1(\omega_1 - \omega_2) \quad (2.135)$$

основным является *триpletное запутанное двухкубитовое состояние* ядерных спинов $|1, 0\rangle$. Инициализация основного состояния в этом случае может быть достигнута установлением достаточно большого значения внешнего магнитного поля (несколько тесла), при котором неравенство (2.146) оборачивается.

Приведенная матрица плотности запутанного состояния пары ядерных спинов в кольце с одинаковым числом спинов в каждой подрешетке принимает вид (раздел **1.6**)

$$\rho = \begin{pmatrix} v_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_+ & z & 0 \\ 0 & z^* & w_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_- \end{pmatrix}, \quad v_+ + v_- + w_+ + w_- = 1, \quad (1.72)$$

то есть содержит недиагональные элементы z .

При воздействии на это состояние случайного поля динамика этой матрицы в адиабатическом приближении будет описываться выражением

$$\rho(t) = U(t)^{-1} \rho U(t) =, \quad (2.136)$$

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} v_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_+ & z \exp(-i(\varphi_1 - \varphi_2)) & 0 \\ 0 & z^* \exp(i(\varphi_1 - \varphi_2)) & w_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_- \end{pmatrix}.$$

После усреднения по распределению (1.168), аналогично выполненному выше для декремента декогерентизации получим выражения, совпадающие с (1.171). Следовательно при некоррелированных случайных воздействиях будет происходить декогерентизация запутанного основного состояния ядерных спинов кольца и переход его в незапутанное смешанное состояние с диагональной приведенной матрицей плотности. Для полностью коррелированных случайных воздействий запутанность будет сохраняться.

Как отмечалось в разделе **1.6** согласованность состояний двух соседних кубитов из-за вклада состояний других кубитов изменяется с числом кубитов и его четностью в цепочке. Это свойство является проявлением эффектов спаривания в конечной системе спинов $I = 1/2$

с образованием синглетных пар. Многочастичные системы с синглетными спаренными состояниями рассматривались в атомной и ядерной спектроскопии еще в 50-х годах прошлого века. Группа преобразований в подпространстве векторов таких состояний получила название симплектической. Для характеристики квантовых состояний таких систем было введено квантовое число *старшинство* s (seniority), равное числу оставшихся не спаренными частиц. Для ансамбля двухкубитовых систем старшинство оказывается хорошим квантовым числом при отсутствии внешнего поля и изотропном гайзенберговском взаимодействии. [2.70].

Для подавления эффектов декогерентизации помимо упомянутого выше когерентного усреднения обычно предлагается использовать изоляцию системы кубитов от окружения и специальные коды коррекции квантовых ошибок. Другой способ основан на кодировании логических кубитов на многокубитовых состояниях, которые нечувствительны к более общим воздействиям со стороны окружения, чем рассмотрено выше, то есть, чтобы они оставались в DFS в течение всего времени действия операции.

Необходимым и достаточным условием для свободной от декогерентизации динамики логических кубитов в некотором подпространстве является принадлежность всех базисных состояний DFS к *одномерным* неприводимым представлениям группы Паули P_L . Иначе говоря это *синглетные* базисные состояния [2.71].

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 запутанными состояниями четырех физических кубитов с *нулевым полным моментом* [2.72]:

$$\begin{aligned} |0\rangle_L &= (1/2) (|01\rangle - |10\rangle) \otimes (|01\rangle - |10\rangle) = \\ &= (1/2) (|0101\rangle + |1010\rangle - |1001\rangle - |0110\rangle), \end{aligned} \quad (2.137)$$

$$\begin{aligned} |1\rangle_L &= (1/3)^{1/2} (|11\rangle \otimes |00\rangle + |00\rangle \otimes |11\rangle - \\ &\quad - (1/2)(|01\rangle + |10\rangle) \otimes (|01\rangle + |10\rangle) = \\ &= (1/12)^{1/2} (2|1100\rangle + 2|0011\rangle - |0101\rangle - |1010\rangle - |0110\rangle - |1001\rangle). \end{aligned} \quad (2.138)$$

Они соответствуют состояниям, построенным на синглетных и триплетных состояниях пар физических кубитов.

2.10.4 Основные требования к антиферромагнитным кристаллам

Полученные выше результаты позволяют сформулировать основные общие требования к естественным антиферромагнитным структурам, которые могут быть использованы для создания ансамблевых ЯМР квантовых компьютеров, работающих на принципах клеточного автомата:

1. Рабочая температура T антиферромагнитной структуры должна соответствовать полностью упорядоченному антиферромагнетику, то есть $T_{NS} > T$, где T_{NS} — 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 квантовых состояний в электрон-ядерной структуре, рассмотренные в подразделах **2.8.4** и **2.10.3**, 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 желательно 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 $I = 1/2$, $\gamma_1 = -21,8$ радМГц/Гл 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 [2.51]) ^{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 потребуется очистка. По-видимому, в качестве вариантов систем могут рассматриваться 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 **ферримагнитным упорядочением** электронных спинов следует считать **мало пригодными** из-за их высокой чувствительности 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.

Можно рассмотреть и диэлектрические кристаллы с ядерным дипольным антиферромагнитным упорядочением ядерных спинов, такие как CaF_2 , где ядра ^{19}F (^{40}Ca 96,9%, ^{42}Ca ^{44}Ca

без спина, ^{43}Ca со спином $7/2$ и в 14 раз меньшим, чем у ^{19}F гироманнитным отношением имеет распространенность $0,13\%$ и не играет роли) образуют простую кубическую решетку. В таком кристалле при критических температурах $T_c = 0,34$ мК в полях $\mathbf{B} \parallel [001]$ возникает **продольная антиферромагнитная структура**. Она характеризуется двумя подрешетками, где в следующих друг за другом плоскостях, перпендикулярных оси $[110]$, намагниченность попеременно параллельна и антипараллельна направлению внешнего поля $[001]$ [2.73].

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 отпадает необходимость использования высокоточной нанотехнологии.
2. Для упорядочения электронных спинов достаточно перейти к температурам ниже температур фазового перехода в антиферромагнитное состояние T_{NS} , 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 спинами.
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 кубитами и измерения их состояний.
4. Определенные преимущества могут иметь ЯМР квантовые компьютеры, работающие на принципе клеточного автомата.

В настоящее время состояние современной высокоточной технологии и технологии высокочистых материалов уже сейчас позволяют приступить к экспериментальным работам по созданию элементов полупроводниковых ЯМР квантовых компьютеров. Уже созданы простейшие фрагменты или прототипы такого компьютера. Создание многокубитовых твердотельных структур — более далекая перспектива. Она 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 практике ЯМР, существенных с точки зрения их приложения для квантовых компьютеров и квантовых вычислений.

Ряду таких направлений, являющихся физической основой ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров, и была посвящена *первая Глава*. В ней рассмотрены такие общие вопросы, как *проблема инициализации* состояния многокубитового квантового регистра, методы описания релаксационных процессов и, в частности, *процессов декогерентизации*, для спиновых состояний в твердых телах.

Анализ особенностей произвольных релаксационных процессов многокубитовых спиновых систем с учетом образования запутанных квантовых состояний кубитов позволил нам произвести также обобщение феноменологических уравнений Блоха и Линдблада, учиты-

вающее немарковский характер случайных воздействий. В таком виде эти уравнения является достаточно общей теоретической основой моделирования как квантовых операций, так любых релаксационных процессов состояний кубитов в твердотельном спиновом (ядерном или электронном) ансамблевом квантовом регистре.

Одним из наиболее существенных требований к квантовым системам, используемым для построения квантовых компьютеров, является *подавление процессов декогерентизации*, являющихся одними из наиболее быстрых среди других релаксационных процессов. Для описания процессов декогерентизации квантовых состояний кубитов в твердых телах, учитывающих немарковский характер случайных процессов, была разработана полуклассическая адиабатическую модель декогерентизации, которая была использована для определения условий, обеспечивающих необходимый уровень подавления декогерентизации.

Нами был проведен также анализ проблемы возрастающей экспоненциально с числом квантовых ЯМР операций временной цены алгоритма факторизации Шора в ЯМР квантовых компьютерах и дано обоснование новой возможности, основанной на использовании квантового вейвлет-преобразования для решения этой проблемы.

Вторая Глава посвящена вопросам реализации ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров. По поводу возможности реализации полномасштабных квантовых компьютеров было высказано значительное число скептических замечаний, указывающих на существование ряда, казалось бы неразрешимых проблем. Нами были проанализированы некоторые из этих проблем и намечены способы их решения. В частности, отмечаемая проблема появления исключения неконтролируемых фазовых множителей со случайными аналоговыми фазами у составляющих суперпозиции базисных состояний, существенная для отдельного квантового регистра, естественным образом решается в ансамблевых квантовых регистрах. Другая проблема, связанная с увеличением вероятности ошибки при переходе к высшим двоичным разрядам в регистре в принципе решается, как показано в этой Главе, с помощью соответствующих связанных кодов и усреднения в ансамблевом квантовом регистре.

Проведенный детальный анализ схемы полномасштабного квантового компьютера с индивидуальным обращением к кубитам, предложенной Кейном, позволил нам произвести определенное ее развитие и выявил основные трудности.

Для преодоления этих трудностей нами было предложено перейти к использованию ансамблевого подхода и дано детальное обоснование перспективности ансамблевой схемы многокубитового полупроводникового ЯМР квантового компьютера на атомах ^{31}P с полосковыми затворами. Был проведен анализ конкретных механизмов декогерентизации в такой схеме и указаны способы ее подавления. Была также показана возможность использования стандартной техники ЯМР для измерения и контроля состояний кубитов, а также возмож-

ность использования динамической поляризации (типа солид-эффекта Абрагама) для инициализации ядерных спинов-кубитов в ансамблевом ЯМР квантовом компьютере, не прибегая к охлаждению всей структуры до микрокельвиновых температур.

Наконец, была предложена схема ансамблевого ЯМР квантового клеточного автомата на антиферромагнитной структуре, которая позволяет оказаться от сложной системы полосковых затворов, дан детальный вывод ядерного спинового гамильтониана, учитывающего взаимодействие ядерных спинов с внешним полем, косвенное взаимодействие через собственные и соседние электронные спины, обобщающее известное сул-накамуровское взаимодействие. Рассмотрены особенности декогерентизации состояний ядерных кубитов в антиферромагнитной цепочке. Обсуждается также возможность использования в качестве среды, содержащих ядерные спины-кубиты, естественных антиферромагнетиков, для которых формулируются необходимые требования.

Итак, как показали результаты проведенных исследований, использование предложенного ансамблевого подхода при создании разных вариантов ЯМР квантовых компьютеров *позволяют решить ряд проблем, стоящих на пути реализации твердотельных ЯМР квантовых компьютеров:*

1. В результате ансамблевого усреднения исключается влияние неконтролируемых случайных 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 исключительно 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. Кроме того, 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 и

ядерные спины, 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.

В заключение укажем на некоторые остающиеся *нерешенные проблемы*:

1. Отсутствует практическая разработка методов квантовых измерения состояний отдельного ядерного спина или их малых групп.

2. Не изучено влияние неидеальности управляющих кубитами импульсных последовательностей и многоуровневой сверхтонкой структуры энергетического спектра в многоспиновой системе на декогерентизацию квантовых состояний.

3. Не разработаны способы подавления декогерентизации, определяемой шумами в электронной измерительной системе.

4. Не изучены процессы декогерентизации многокубитовых состояний в естественных антиферромагнитных структурах.

5. Не опробованы уже разработанные квантовые методы коррекции ошибок для многокубитовых систем.

6. Совершенно неизученной остается интересная возможность использования кристаллических структур типа спиновых стекол со случайными значениями обменного взаимодействия между соседними электронными спинами, в которых могут образоваться случайным образом по принципу протекания (percolation) необходимые цепочки с антиферромагнитным типом упорядочения электронных спинов.

Автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю благодарность академику К.А.Валиеву за поддержку этой работы и стимулирующие обсуждения.

Приложение ПЗ. Сигнал ЯМР от ансамбля ядерных спинов

Рассмотрим образец, содержащий $N = n \cdot p \cdot N_0$ ядерных спинов, расположенных в плоскости $z = 0$ кремниевой пластины с регулярным интервалом вдоль параллельно включенных полосковых затворов в блоках. Это число равно числу независимых «молекул» в ансамбле. Спины, которые соответствуют цепочкам под полосковыми затворами при резонансе в каждом блоке, ориентированы вдоль оси x (ось соленоида) и находятся в одинаковых состояниях. Считываемый ЯМР сигнал будет определяется выражением.

$$|V_{\max}| = Q\omega_A \frac{K}{X} \int_{-X/2A}^{X/2} \int B_{x,\max}(x, y, z) dy dz | dx \quad (\text{ПЗ.1})$$

где $X = nLl_x$ — приблизительно соответствует длине соленоида, а

$$B_{x,\max}(x, y, z) = \frac{\mu_0 \gamma_1 \hbar}{16\pi} \sum_{n_i=-n/2}^{n/2} \sum_{p_i=-pN_0/2}^{pN_0/2} \frac{-2(x - Ll_x n_i)^2 + (y - l_y p_i)^2 + z^2}{[(x - Ll_x n_i)^2 + (y - l_y p_i)^2 + z^2]^{5/2}} \quad (\text{ПЗ.2})$$

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 $A = D \cdot \delta$ ($D = l_y \cdot pN_0, \delta \ll D$).

Для выполнения суммирования как по n_i , так и p_i воспользуемся *формулой суммирования Пуассона*, в форме :

$$\sum_{p_i=-pN_0/2}^{pN_0/2} f(l_y p_i) = \frac{pN_0}{D} \sum_{v=-\infty}^{\infty} \int_{-D/2}^{D/2} f(\xi) \exp(iv2\pi\xi/l_y) d\xi. \quad (\text{ПЗ.3})$$

Поскольку осциллирующие слагаемые с $v \neq 0$ при последующем интегрировании по x, y усредняются, их опустим в (ПЗ.3) и запишем

$$|V_{\max}| = \frac{\mu_0 Q K \omega_A \gamma_1 \hbar n p N_0}{8\pi X^2 D} \int_{-X/2}^{X/2} dx \int_{-X/2}^{X/2} d\eta \int_0^{\delta/2} dz \left| \int_{-D/2}^{D/2} \int_{-D/2}^{D/2} \frac{-2(x-\eta)^2 + (y-\xi)^2 + z^2}{[(x-\eta)^2 + (y-\xi)^2 + z^2]^{5/2}} dy d\xi \right|. \quad (\text{ПЗ.4})$$

Учитывая $D^2 \gg z^2$, после интегрирования (ПЗ.4) по y, ξ , получим

$$|V_{\max}| = \frac{\mu_0 Q K \omega_A \gamma_1 \hbar n p N_0}{8\pi X^2 D} \int_{-X/2}^{X/2} dx \int_{-X/2}^{X/2} d\eta \int_0^{\delta/2} dz \left\{ \frac{-2[(x-\eta)^2 - z^2]D^2}{[(x-\eta)^2 + z^2]^2 [D^2 + (x-\eta)^2]^{1/2}} + \frac{2z^2}{[(x-\eta)^2 + z^2]^{3/2}} \right\}. \quad (\text{ПЗ.4})$$

Интегрируя далее по z и сохраняя только логарифмически растущее при $2|x-\eta| \rightarrow 0$ слагаемое, найдем

$$|V_{\max}| \approx \frac{\mu_0 Q K \omega_A \gamma_1 \hbar n p N_0}{4\pi X^2 D} \int_{-X/2}^{X/2} dx \int_{-X/2}^{X/2} d\eta \ln(\delta / |x-\eta|) = (\mu_0 / 4) Q K A \omega_A \frac{N}{V_s} \gamma_1 \hbar \cdot \frac{X}{\pi D} \cdot \ln \frac{X}{\delta \sqrt{e}}, \quad (\text{ПЗ.5})$$

где $V_s = AX, N = npN_0, e = 2,716\dots$

Мы видим, что выражение (ПЗ.5) отличается от (2.55) при $\varepsilon(L) = 1$ несущественным множителем $\frac{X}{\pi D} \cdot \ln \frac{X}{\delta \sqrt{e}}$, порядка нескольких единиц.

Приложение П4. Двухкубитовая операция CNOT в одномерном ЯМР квантовом клеточном автомате

Чтобы осуществить двухкубитовую операцию контролируемое НЕ (CNOT) следует приложить другую последовательность импульсов. Один из кубитов называют *контролирующим*, а другой — *контролируемым*. 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".

Рассмотрим теперь состояние квантового регистра, показанное на первой строке Рис. 2.5 и приложим после стадии *** импульс $\pi_{A,1}$. Результат представлен на Рис. П4.1.

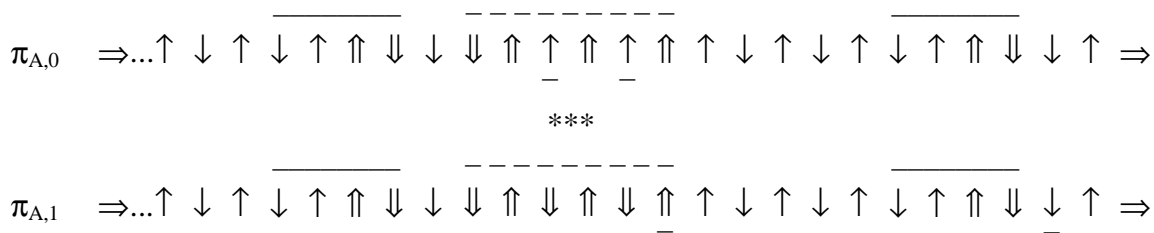


Рис. П4.1. Результат действия импульса $\pi_{A,1}$ после стадии ***.

Можно видеть, что CU проходит через кубит "1" и продолжает движение до середины кубита "0". Но в этом процессе сама CU изменяется от $\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow$ до (только при прохождении "0"!), а сам кубит "0" разрушается (Рис. П4.1).

Теперь снова приложим обменную последовательность импульсов:

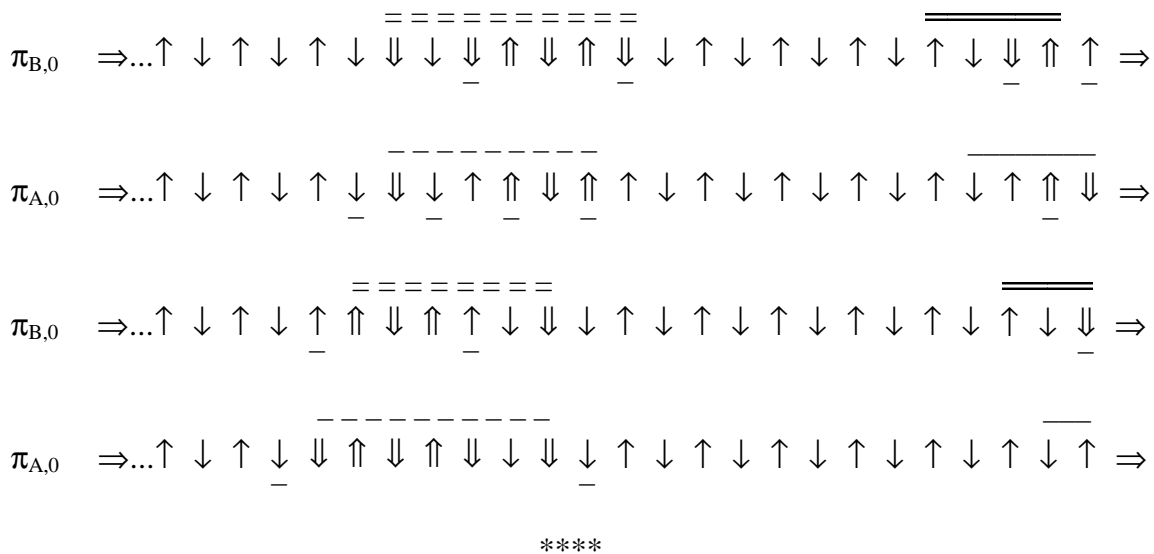


Рис. П4.2. Схема обменной импульсной последовательности, следующей за импульсом $\pi_{A,1}$ на Рис. П4.1.

Пусть, *контролирующий* кубит в операции CNOT находится в состоянии "0". CU изменяет свою форму после его прохождения. При достижении стадии, отмеченной **** на Рис. П4.2, приложим последовательность: $\pi_{A,1} \Rightarrow \pi_{B,-1} \Rightarrow \pi_{B,0} \Rightarrow \pi_{A,0} \Rightarrow \pi_{A,1} \Rightarrow \pi_{B,0} \Rightarrow \pi_{A,0} \Rightarrow \pi_{B,-1} \Rightarrow \pi_{A,1}$. Результат представлен на Рис. П4.3:

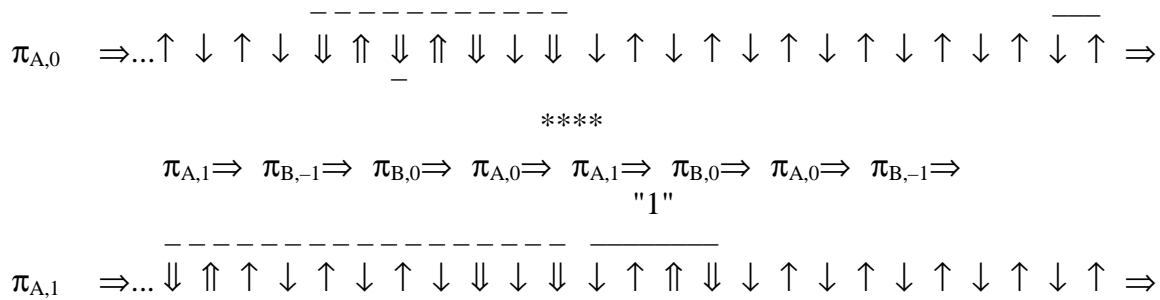


Рис. П4.3. Схема импульсной последовательности, следующей за стадией ****

Последняя операция инверсии, как видно в этом случае, **не влияет** на контролируемый кубит в состоянии "1", как и должно быть для вентиля CNOT. Обратная последовательность возвращает СУ и кубиты в их начальные состояния.

Возвратимся теперь к Рис. 2.7 и продолжим после стадии **, когда СУ проходит контролирующий кубит в состоянии "1", приведенную выше последовательность импульсов (Рис. П4.4):

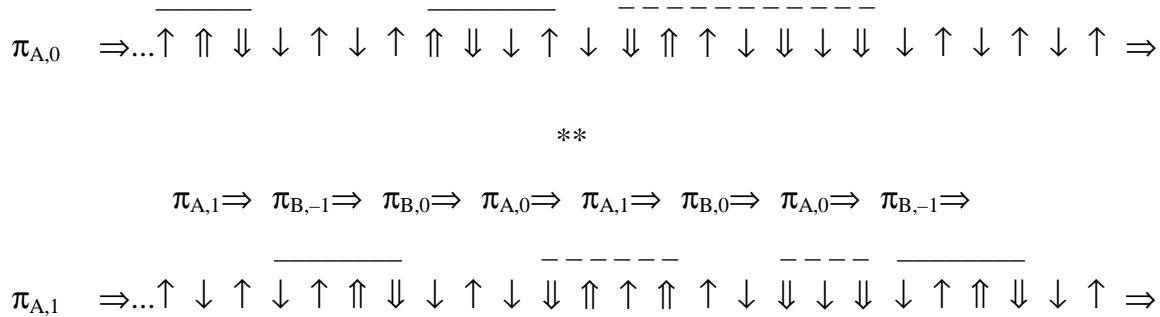


Рис. П4.4. Схема импульсной последовательности после стадии **, когда СУ проходит кубит "1"

Теперь выполним обратную последовательность (Рис. П4.5).

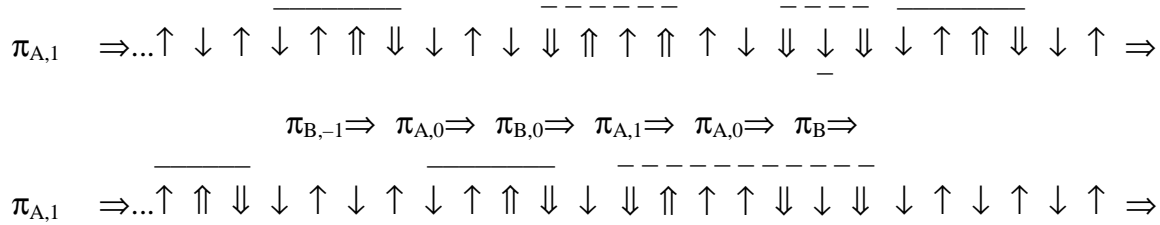
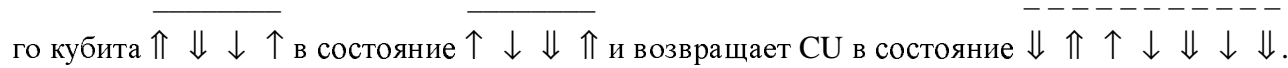


Рис. П4.5. Схема обратной импульсной последовательности.

В результате эта импульсная последовательность преобразует состояние контролируемо-



Таким образом, после приложения предыдущей последовательности импульсов в обратном порядке, состояние контролируемого кубита инвертируется, как и должно быть для вентиля CNOT, если состояние контролирующего кубита "1".

Приложение П5. Спин-волновое приближение для подсистемы электронных спинов в антиферромагнетике и приближение Тябликова

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 A , в частности, будем иметь

$$\begin{aligned} a_i^+ &= \mathbf{S}_A^- = \mathbf{S}_{Ax} - i\mathbf{S}_{Ay} = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = \sqrt{1/L} \sum_{\mathbf{q}} a^+(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i), \\ a_i &= \mathbf{S}_A^+ = \mathbf{S}_{Ax} + i\mathbf{S}_{Ay} = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = \sqrt{1/L} \sum_{\mathbf{q}} a(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_i). \end{aligned} \quad (\text{П5.1})$$

В условиях низких температур они аналогичны бозевским операторам за исключением того, что числа заполнения $n_A = a_i^+ a_i$, в отличие от бозонов, принимают только два значения 0 и 1 (как для фермиевских частиц).

В \mathbf{q} -представлении правила коммутации имеют вид

$$[a(\mathbf{q}), a^+(\mathbf{q}')] = 2 \mathbf{S}_{Az} = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - 2\sqrt{1/L} / \rho(\mathbf{q} - \mathbf{q}'),$$

$$[b(\mathbf{q}), b^+(\mathbf{q}')] = 2 \mathbf{S}_{Bz} = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - 2\sqrt{1/L} / \tau(\mathbf{q} - \mathbf{q}'),$$

$$[a(\mathbf{q}), a(\mathbf{q}')] = [a(\mathbf{q}), b(\mathbf{q}')] = 0, \quad [a(\mathbf{q}), b^+(\mathbf{q}')] = [b(\mathbf{q}), a^+(\mathbf{q}')] = 0, \quad (\text{П5.2})$$

$$\rho(\mathbf{q}) = \sqrt{1/L} \sum_{\mathbf{k}} a^+(\mathbf{k}) a(\mathbf{q} + \mathbf{k}) = \rho^+(-\mathbf{q}), \quad \tau(\mathbf{q}) = \sqrt{1/L} \sum_{\mathbf{k}} b^+(\mathbf{k}) b(\mathbf{q} + \mathbf{k}) = \tau^+(-\mathbf{q}), \quad (\text{П5.3})$$

при этом

$$n_A^2(i) = n_A(i), \quad \sqrt{1/L} \sum_{\mathbf{k}} \rho^+(\mathbf{k}) \rho(\mathbf{q} + \mathbf{k}) = \rho(\mathbf{q}). \quad (\text{П5.4})$$

Здесь учтено, что при $L \gg 1$ сумма

$$1/L \sum_i \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_i) = \delta_{\mathbf{k}0}. \quad (\text{П5.5})$$

Для среднего значения оператора \mathbf{S}_{Az} , в частности, получим

$$\langle S_{Az} \rangle = 1/2 - 1/L \sum_{\mathbf{q}} \langle a^+(\mathbf{q}) a(\mathbf{q}) \rangle = 1/2 - \langle n_A \rangle = 1/2 - \sqrt{1/L} \langle \rho(0) \rangle, \quad (\text{П5.6})$$

где $\langle n_A \rangle = \langle a^+ a \rangle = \sqrt{1/L} \langle \rho(0) \rangle$ — среднее *сокращение спина* на узле подрешетки A в спин-волновом приближении.

Приближение Тябликова [2.62] состоит в пренебрежении флуктуациями параметров дальнего порядка, описываемых операторами \mathbf{S}_{Az} и \mathbf{S}_{Bz} , то есть в замене правых частей коммутаторов (П5.2) их средними значениями

$$\begin{aligned}\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - 2\sqrt{1/L} \rho(\mathbf{q} - \mathbf{q}') &\Rightarrow 2\langle S_{Az} \rangle \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = (1 - 2\langle n_A \rangle) \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \\ \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - 2\sqrt{1/L} \pi(\mathbf{q} - \mathbf{q}') &\Rightarrow -2\langle S_{Bz} \rangle \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = (1 - 2\langle n_B \rangle) \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}.\end{aligned}\quad (\text{П5.7})$$

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, когда $\langle n_{A(B)} \rangle \leq 1$.

С точностью до квадратичных относительно операторов $a(\mathbf{q})$ и $b(-\mathbf{q})$ гамильтониан симметричной модели антиферромагнетика типа «легкая ось» с $\xi = \eta$ (2.103) принимает вид [2.65]:

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_S = -LJZ/2 + \sum_{\mathbf{q}} \{ J^+ a^+(\mathbf{q})a(\mathbf{q}) + J^- b^+(-\mathbf{q})b(-\mathbf{q}) + \\ + Z\gamma_{\mathbf{q}} J_{\perp} (a^+(\mathbf{q})b^+(-\mathbf{q}) + a(\mathbf{q})b(-\mathbf{q})) \},\end{aligned}\quad (\text{П5.8})$$

где для решетки с центром инверсии имеем

$$J^{\pm} = (JZ \pm \omega_S), \quad \gamma_{\mathbf{q}} = \gamma_{-\mathbf{q}} = 1/Z \sum_{\delta} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\delta}), \quad \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} = 0. \quad (\text{П5.9})$$

В частности, для простой тетрагональной решетки (a, c — постоянные решетки)

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \gamma_{-\mathbf{q}} = (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z c)/3, \quad Z = 6. \quad (\text{П5.10})$$

Литература к Главе II

- 2.1. Jones J.A. NMR Quantum Computation: a Critical Evaluation // 2000, Fortschr. der Phys., 2000, v.48, № 9–11, pp.909–924.
- 2.2. Валиев К.А., Кокин А.А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. 2-ое издание, — Москва–Ижевск : НИЦ РХД, 2002, 320 с.
- 2.3. 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.

- 2.4. *Dür W., Cirac C.I., Tarrach R.* Separability and Distrillability of Multiparticle Quantum Systems. // *Phys. Rev. Lett.*, 1999, v.**83**, № 17, pp.3562–3565.
- 2.5. *DiVincenzo D.P.* The Physical Implementation of Quantum Computation. // *Fortschr. der Phys.*, 2000, v.**48**, № 9–11, pp.771–783.
- 2.6. *Nielsen M.A., Chuang I.I.* Quantum Computation and Quantum Information. —Cambridge Univ. Press, 2000, 676p.
- 2.7. *Haeberele 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.Скороцкого и Э.Т.Липпмаа. — М.: Мир, 1980, 504с.
- 2.8. *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 : Сб. "Квантовый компьютер & квантовые вычисления" I. — Ижевск: НИЦ РХД, 1999, с.71–100.
- 2.9. *Kak S.* The Initialization Problem in Quantum Computing. // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0010109 v2.
- 2.10. *Kak S.* Statistical Constraints on State Preparation for a Quantum Computer. // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0010109 v2.
- 2.11. *Kak S.* Are Quantum Computing Models Realistic? // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0110040 v3.
- 2.12. *Kak S.* Uncertainty in Quantum Computation. // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0206006.
- 2.13. *Kak S.* General Qubit Errors Cannot Be Corrected. // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0206144.
- 2.14. *Dyakonov M.I.* Quantum computing: A View from the Enemy Camp. // E-print LANL, 2001, arXiv: cond-mat/0110326.
- 2.15. *Goodman J.W.* Statistical Optics –N.Y.: John Willey & Sons, 1985, 550p. / Гудмен Дж. Статистическая оптика. / Перев. с англ. **А.А.Юкина**, под ред. Г.В.Скороцкого. –М: Мир, 1988, 528 с.
- 2.16. *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.
- 2.17. *Kane B.E.* A silicon-based nuclear spin quantum computer. // *Nature*, 1998, v.**393**, N.5, pp.133–137.

- 2.18. *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).
- 2.19. *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.
- 2.20. *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.
- 2.21. *Feher 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.
- 2.22. *Kane B.E., McAlpine 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.
- 2.23. *Feher, G, Gere E.A.*, Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. II/ Electron Spin Relaxation Effects. // *Phys. Rev.*, 1959, v.**114**, №5, pp.1245–1256.
- 2.24. *Kane B.E.* Silicon-Based Quantum Computation. // *Fortschr. der Phys.*, 2001, v.**48**, № 9–11, pp.1023–1041.
- 2.25. *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.
- 2.26. *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.
- 2.27. *Валиев К.А., Кокин А.А., Ларионов 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.
- 2.28. *Larionov A.A., Fedichkin L.E., Kokin A.A., Valiev K. A.* Nuclear Magnetic Resonance Spectrum of ^{31}P Donors in Silicon Quantum Computer. // Abstract book, 8th Inter. Symp. Nanostructures: Physics and Technology. St.Peterburg, June, 2000, pp.542–545.
- 2.29. *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.
- 2.30. *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.

- 2.31. *Kokin A.A., Valiev K.A.* Problems in Realization of Large-Scale Ensemble Silicon-Based NMR Quantum Computers. // *Quantum Computers & Computing*, 2002, v.3, N.1, pp.25–45.
- 2.32. *Abragam A.* The Principles of Nuclear Magnetism. —Oxford: Clarendon Press, 1961. / *Абрагам. Ядерный магнетизм.* / Перевод с англ. участием **А.А.Кокина** под ред. Г.В.Скроцкого. —М.: ИИЛ, 1963, 552с.
- 2.33. *Валиев К.А.* Магнитный резонанс на ядрах парамагнитных атомов. // *ЖЭТФ*, 1957, т.33, вып.4(10), с.1045–1047.
- 2.34. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного —М.: Гос.Изд. Физматлит, 1958, с.678.
- 2.35. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. —М: Наука, 1974, с.752.
- 2.36. *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.
- 2.37. *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.
- 2.38. *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.
- 2.39. *Privman V., Vagner I.D., Kventsel G.* Quantum Computation in Quantum-Hall Systems. // *Phys. Lett.*, 1998, v.A239, 2 March, pp.141–146.
- 2.40. *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.
- 2.41. *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.
- 2.42. *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.
- 2.43. *Fel'man E.B., Lacelle S.* Perspectives on a Solid State NMR Quantum Computer // E-print LANL, 2001, arXiv:quant-ph/0108106.
- 2.44. *Lloyd, S.,* A Potentially Realizable Quantum Computer, *Science*, 1993, vol. 261, pp.1569–1571.
- 2.45. *Wei, H., Xue, X., Morgera, S.D.,* NMR Quantum Automata in Doped Crystals, 1998, E-print LANL: quant-ph/9805059.

- 2.46. *Lloyd, S.*, Programming Pulse Driven Quantum Computers. E-print LANL: quant-ph/9912086.
- 2.47. *Benjamin S.C.* Schemes for Parallel Quantum Computation Without Local Control of Qubits // *Phys.Rev.*, 2000, v.**A61**, pp.020301(R).
- 2.48. *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.
- 2.49. **Кокин А.А.** Декогерентизация квантовых состояний и ее подавление в твердотельных ядерных магнитно-резонансных (ЯМР) квантовых компьютерах. // Тезисы доклада, XXIX-Междунар. Зимн. Школа физиков-теоретиков «Коуровка-2002», Кунгур, Февраль, 2002, стр.157–158.
- 2.50. **Кокин А.А.** Decoherence of Quantum States and Its Suppression in Ensemble Large-Scale Solid State NMR Quantum Computers. // Тезисы доклада, Международный симпозиум «Quantum Informatics» QI-2002, Звенигород, 2002, Proceeding. of SPIE 2003., // E-print LANL, 2002, arXiv:quant-ph/0211096.
- 2.51. Физические величины. Справочник. Под ред. И.С.Григорьева, Е.З.Мейлихова —М.: Энергоатомиздат, 1991, 1232 с.
- 2.52. **Кокин А.А.** Модель ядерного магнито-резонансного квантового компьютера на основе антиферромагнитной структуры. // Тезисы доклада, XXVIII Зимняя школа физиков-теоретиков. Екатеринбург, Февраль, 2000 с.38.
- 2.53. **Кокин А.А.** A Model for Ensemble NMR Quantum Computer Using Antiferromagnetic Structure. // E-print LANL, 2000, arXiv: quant-ph/0002034, 17p.
- 2.54. **Кокин А.А.** A Model for NMR Quantum Cellular Automata Using Antiferromagnetic Structure. // *Quantum Computers & Computing*, 2001, v.**2**, N.1, pp.54–67.
- 2.55. **Кокин А.А.** An Antiferromagnet-Based NMR Quantum Computer. // Abstract book, Euro-Asian Symp. EASTMAG–2001, February., Ekaterinburg. p.3.
- 2.56. **Кокин А.А.** An Antiferromagnet-Based NMR Quantum Computer. // *Phys. Metal. Metallogr.*, 2001, v.**91**, Suppl.1, pp.S150–S156.
- 2.57. *S.A.Brasovskii S.F. 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.
- 2.58. *Benjamin S.C.* Quantum Computing Without Local Control of Qubit-Qubit Interactions. // *Phys. Rev. Lett.*, 2002, v.**88**, № 1, pp.017904-1–017904-4.
- 2.59. *Туров Е.А., Петров М.А.* Ядерный магнитный резонанс в ферро- и антиферромагнетиках. —М.: Наука 1969, 260с.

- 2.60. *Twamley J.* Quantum Cellular Automata Quantum Computing with Endohedral Fullerenes. // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0210202.
- 2.61. *Raussendorf R., Briegel H.J.* Computational Model Underlying the One-Way Quantum Computer // E-print LANL, 2002, arXiv: quant-ph/0108067 v.2.
- 2.62. *Тябликов С.В.* Методы квантовой теории магнетизма. — М.: Наука, 1975, 528с.
- 2.63. *Туров Е.А.* Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов. — М.: АН СССР, 1963, 224 с.
- 2.64. *Туров Е.А., Колчанов А.В., Меньшенин В.В., Мирсаев И.Ф., Николаев В.В.* Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. — М.: Физматлит, 2001, 560с.
- 2.65. *Лымарь В.М., Рудой Ю.Г.* Обобщенное приближение Хартри-Фока для антиферромагнетика(антиферромагнитная фаза). Глава IV Дополнения к книге [2.62].
- 2.66. *Туров Е.А.* Ширина линии ферромагнитного резонансного поглощения. Сборник Ферромагнитный резонанс — М.: Гос.Изд. Физматлит, 1961, с.215.
- 2.67. *Куркин М.И., Туров Е.А.* ЯМР в магнито-упорядоченных веществах и его применение. — М.: Наука, 1990, 246с.
- 2.68. *Куркин М.И., Иванов С.В., Куневич А.В.* Ядерная магнитная релаксация в магнитоупорядоченных веществах. // Препринт, ИФМ УНЦ АН СССР, — Свердловск, 1984, с.45.
- 2.69. *Viola L., Lloyd S.* Dynamical Suppression of Decoherence in Two-State Quantum Systems. // Phys. Rev., 1998, v.**A58**, pp.2733–2745.
- 2.70. *Bayman B.F.* Some Lectures on Groups and Their Applications to Spectroscopy — Copenhagen: Univ. Instit. Teor. Fysik, 1957. / Б.Ф.Бейман Лекции по применению теории групп в ядерной спектроскопии / Перев. с англ. Под ред. А.З.Долгиноваю — М.: Гос. Изд. Физматлит, 1961, с.228.
- 2.71. *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, // E-print LANL, 1999, quant-ph/9909058.
- 2.72. *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, // E-print LANL, 2000, arXiv:quant-ph/0004064, 40p.
- 2.73. *Abragam A., Goldman M.* Nuclear Magnetism: Order & Disorder. — Oxford: Clarendon Press, 1982 / *Абрагам А., Гольдман М.* Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок в 2-х томах / Перевод с англ. под ред. Г.В.Скороцкого. — М.: Мир, 1984, 300+360 с.