

О ВЫПОЛНЕНИИ КВАНТОВОГО АДИАБАТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА ФАКТОРИЗАЦИИ НА ДВУХ КУДИТАХ

В. Е. Зобов, А. С. Ермилов*

*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 19 ноября 2011 г.

Рассматривается выполнение адиабатического квантового алгоритма факторизации на двух кудитах с числом уровней d_1 и d_2 . Предложен способ получения изменяющегося во времени эффективного гамильтониана с помощью последовательности операторов поворота, селективных по переходам между соседними уровнями кудита. Найдена последовательность импульсов радиочастотного магнитного поля и выполнено численное моделирование факторизации чисел 35, 21 и 15 на двух квадрупольных ядрах со спинами $3/2$ ($d_1 = 4$) и 1 ($d_2 = 3$).

1. ВВЕДЕНИЕ

Для воплощения основных идей и достоинств квантовых вычислений достаточно рассмотрения операций с двухуровневыми квантовыми системами — кубитами [1]. Значительно чаще в природе встречаются многоуровневые квантовые системы. Лишние уровни можно попросту игнорировать, но они создают помехи, если близки по энергетической шкале. Такие помехи приходится устранять [2, 3]. Предпочтительнее использовать дополнительные состояния, соответствующие этим уровням, непосредственно в процессе вычисления. Например, в работе [4] предложено использовать третий уровень для реализации вентиля Тоффоли на кубитах. Эффективность такого подхода продемонстрирована в экспериментах на фотонных [5] и сверхпроводящих [6] системах. Еще более перспективной представляется реализация квантовых алгоритмов непосредственно на многоуровневых системах (кудитах, при наличии d уровней) [7, 8]. С использованием представлений виртуальных кубитов квантовые вычисления можно проводить уже на уровнях одного кудита: квадрупольного ядра [9–14], молекулярного магнетика [15] или ридберговского атома [16]. Однако для реализации всех преимуществ квантовых вычислений над классическими следует перейти к многокудитным системам и многоуровневой логике [7, 8, 17–22].

Одним из достоинств многокудитных систем по сравнению с многокубитными является возмож-

ность обеспечения одинакового размера вычислительного базиса меньшим числом физических элементов. Уменьшение числа элементов должно облегчить управление ими, однако способы управления кудитами еще недостаточно разработаны. Для квадрупольных ядер ($d = 2I + 1$, где I — спин ядра), на которых выполнено большое количество экспериментов (см., например, работы [10–14, 23, 24]), обзор способов управления дан в работе [25]. В работе [26] мы рассмотрели выполнение квантового алгоритма поиска порядка подстановки на двух кудитах с $d_1 = 8$ и $d_2 = 4$ вместо пяти кубитов, использованных в работе [27] для экспериментальной реализации методом ЯМР такого алгоритма для подстановки из четырех элементов.

Квантовые вычисления могут быть осуществлены не только с помощью схем из вентиля [1], но и посредством адиабатического изменения гамильтониана [28–31] от начального гамильтониана $H(0) = H_c$, основное состояние $|\Psi(0)\rangle$ которого легко приготовить, к конечному гамильтониану $H(T) = H_p$, основное состояние $|\Psi(T)\rangle$ которого кодирует решение поставленной задачи. При реализации квантовых адиабатических алгоритмов [28–31] или квантового отжига [30, 32] система находится в основном состоянии, что позволяет надеяться на большую устойчивость к помехам. Таким путем можно решить задачу, например, об основном состоянии в модели Изинга [32] или же сложные комбинаторные задачи [28–31]. Недавно,

*E-mail: rsa@iph.krasn.ru

например, был предложен [31] и реализован методом ЯМР на трех кубитах, представленных спинами $I = 1/2$ [33], адиабатический квантовый алгоритм факторизации (разбиения числа $N = pq$ на множители). Алгоритм основан на поиске основного состояния системы, минимизирующего весовую функцию $W = (N - pq)^2$. Отметим, что в случае классического компьютера задача факторизации большого числа относится к классу экспоненциально сложных задач, но при решении на квантовом компьютере с помощью известного алгоритма Шора ее сложность меняется на полиномиальную. Вопрос о достижимости экспоненциального ускорения при адиабатическом вычислении остается дискуссионным [34].

Способы реализации указанного адиабатического алгоритма факторизации на кубитах не рассматривались и составляют предмет предлагаемой работы. Мы рассмотрим выполнение этого алгоритма на двух кубитах, d_1 и d_2 . Поскольку для любого четного числа известна как минимум одна пара множителей ($N = 2p$), учитывать будем лишь варианты нечетных чисел. Таким образом, максимальный размер факторизируемого числа $N = (2d_1 - 1)(2d_2 - 1)$. Использованных в эксперименте [33] трех спинов оказалось достаточно для адиабатической факторизации числа 21. В нашем случае для факторизации числа 21 достаточно $d_1 = 4$, $d_2 = 2$, тогда как при $d_1 = 4$, $d_2 = 3$ уже можно факторизовать число 35. Для реализации на кубитах понадобилось бы четыре спина $I = 1/2$, для управления которыми надо было бы создать четырехспиновое эффективное взаимодействие (в добавление к трехспиновому, необходимому при факторизации числа 21 в работе [33]). Для двух спинов многочастичного взаимодействия не надо. Однако для управления кубитами необходимы операторы, селективные по переходам между уровнями, вместо операторов, селективных по спинам, которые применяют для управления кубитами. В разд. 2 нами предложен способ построения зависящего от времени эффективного гамильтониана для многоуровневых систем с помощью операторов поворота, селективных по переходам между уровнями. В качестве примера в разд. 3 мы взяли два квадрупольных ядра со спинами $I_1 = 3/2$ ($d_1 = 4$) и $I_2 = 1$ ($d_2 = 3$). Спин $3/2$ имеет, например, ядро ^{23}Na , квантовые алгоритмы на котором были реализованы экспериментально методом ЯМР в работах [10–12]. Спином $I = 1$ обладает ядро дейтерия ^2H , ЯМР-управление состоянием которого выполнено в работе [23]. Для управления такими системами применяются импульсы радиочастотного (РЧ) магнитного поля, селективные по переходам меж-

ду соседними уровнями [10, 11, 13, 23]. Квантовые алгоритмы на системах из двух квадрупольных ядер, связанных спин-спиновым взаимодействием, пока не реализованы. Мы найдем соответствующие последовательности РЧ-импульсов и выполним компьютерное моделирование квантового адиабатического алгоритма факторизации.

2. ПОЛУЧЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА С ПОМОЩЬЮ ОПЕРАТОРОВ ПОВОРОТА, СЕЛЕКТИВНЫХ ПО ПЕРЕХОДАМ

Гамильтониан двух выбранных ядер, помещенных в аксиально-симметричное кристаллическое поле и в сильное постоянное магнитное поле, представим в виде [35]

$$H_0 = -\omega_1 I_1^z - \omega_2 I_2^z + q_1 \left[(I_1^z)^2 - \frac{1}{3} I_1(I_1 + 1) \right] + q_2 \left[(I_2^z)^2 - \frac{1}{3} I_2(I_2 + 1) \right] - J I_1^z I_2^z, \quad (1)$$

где $\omega_j = B_0 \gamma_j$ — ларморова частота спина j , q_1 и q_2 — соответствующие квадрупольные константы, J — константа спин-спинового взаимодействия, I_j^z — оператор проекции спина соответствующего ядра на направление постоянного магнитного поля (ось z). Энергию будем измерять в частотных единицах и полагать $\hbar = 1$. В качестве вычислительного базиса используем собственные функции $|m_1, m_2\rangle$ операторов I_1^z и I_2^z со значениями проекций соответственно m_1 и m_2 . Пронумеруем функции натуральными числами, начиная с основного уровня; например, $n = I_j - m_j + 1$ для одного спина.

Адиабатический алгоритм осуществляется с помощью зависящего от времени гамильтониана, который непрерывно изменяется, например, по линейному закону:

$$H(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right) H_c + \left(\frac{t}{T}\right) H_p, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (2)$$

Если гамильтониан изменяется достаточно медленно, то квантовая адиабатическая теорема гарантирует, что квантовый компьютер будет с большой вероятностью находиться в основном состоянии [28–34].

Весовой функции $W = (N - pq)^2$ соответствует гамильтониан

$$H_p = Q [N - (d_1 - 2I_1^z)(d_2 - 2I_2^z)]^2, \quad (3)$$

где $d_j = 2I_j + 1$, а Q — масштабный множитель, необходимый для обеспечения соизмеримости с гамильтонианом (1). Если $N = pq$, то основное состояние гамильтониана H_p с равной нулю энергией достигается при $p = d_1 - 2I_1^z$, $q = d_2 - 2I_2^z$, т. е. при

$$I_1^z = \frac{d_1 - p}{2}, \quad I_2^z = \frac{d_2 - q}{2}.$$

Для получения ответа нужно измерить проекции спинов.

В качестве начального состояния возьмем равносуперпозиционное состояние

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle = |S\rangle &= \left(\frac{1}{d_1} \sum_{n=1}^{n=d_1} |n\rangle \right) \otimes \left(\frac{1}{d_2} \sum_{k=1}^{k=d_2} |k\rangle \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{d_1 d_2}} \sum_{m_1=-I_1}^{m_1=I_1} \sum_{m_2=-I_2}^{m_2=I_2} |m_1, m_2\rangle. \end{aligned}$$

Подобное состояние для системы из спинов $I = 1/2$ получают с помощью вентилей Адамара, а в качестве начального гамильтониана обычно выбирают $H_c = \omega \sum_j I_j^x$. В случае кудитов ($I > 1/2$) состояние $|S\rangle$ не является собственным состоянием такого гамильтониана. Состояние $|S\rangle$ может быть получено из основного состояния гамильтониана (1) с максимальными проекциями $|I_1, I_2\rangle$ двух спинов на ось z с помощью оператора квантового преобразования Фурье (quantum Fourier transform, QFT):

$$|S\rangle = F|I_1, I_2\rangle,$$

где $F = F_1 \otimes F_2$, $F_j = \text{QFT}_{d_j}$ ($j = 1, 2$),

$$\text{QFT}_d = \frac{1}{\sqrt{d}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \sigma & \sigma^2 & \dots & \sigma^{d-1} \\ 1 & \sigma^2 & \sigma^4 & \dots & \sigma^{2(d-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \sigma^{d-1} & \sigma^{2(d-1)} & \dots & \sigma^{(d-1)^2} \end{pmatrix},$$

$$\sigma = \exp\left(\frac{2\pi i}{d}\right).$$

Поскольку $|S\rangle$ должно быть основным состоянием гамильтониана H_c , в качестве оператора H_c возьмем оператор

$$H_c = (F_1 \otimes F_2) \cdot H_0 \cdot (F_1 \otimes F_2)^{-1}. \quad (4)$$

Следуя работе [33], оператор адиабатической эволюции за время $T = \Delta t M$ с гамильтонианом, изменяющимся по линейному закону (2), представим в виде произведения операторов эволюции на последовательности из M малых временных интервалов Δt :

$$U_T = \hat{P} \exp\left(-i \int_0^T H(t) dt\right) = \prod_{m=0}^M U_m, \quad (5)$$

где \hat{P} — оператор упорядочения во времени. На каждом таком интервале будем пренебрегать изменением гамильтониана (2) и приближенно представлять оператор эволюции в виде произведения трех некоммутирующих операторов:

$$\begin{aligned} U_m &= \exp\left[-i\left(1 - \frac{m}{M}\right) \frac{\Delta t H_c}{2}\right] \times \\ &\times \exp\left(-i \Delta t H_p \frac{m}{M}\right) \exp\left[-i\left(1 - \frac{m}{M}\right) \frac{\Delta t H_c}{2}\right], \quad (6) \end{aligned}$$

где m — дискретное время ($0 \leq m \leq M$).

Нужные операторы в (6) будем получать с помощью операторов поворотов $\{\theta\}_{\alpha,j}^{k \leftrightarrow n}$, селективных по переходам между уровнями спина j , где θ — угол поворота вокруг оси α ($\alpha = x, y, z$), k и n — номера уровней, изменяющиеся от единицы до d_j . В матричном виде

$$\begin{aligned} \{\theta\}_{y,j}^{k \leftrightarrow n} &= \begin{bmatrix} E_{k-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} & 0 & -\sin \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & E_{n-k-1} & 0 & 0 \\ 0 & \sin \frac{\theta}{2} & 0 & \cos \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{d_j-n} \end{bmatrix}, \\ \{\theta\}_{z,j}^{k \leftrightarrow n} &= \begin{bmatrix} E_{k-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-i \frac{\theta}{2}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{n-k-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(i \frac{\theta}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{d_j-n} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь E_k — единичная матрица размерности k . Матрица x -поворота отличается от матрицы y -поворота равными $-i$ коэффициентами перед обоими синусами.

Для реализации селективного поворота будем включать в течение конечного времени t_p ($t_p \gg 1/\omega$) магнитное РЧ-поле с амплитудой B_{rf} и частотой ω . Во вращающейся с частотой ω системе координат [35] изменение состояния во времени задается оператором эволюции

$$U_p(t) = e^{-iHt}$$

с не зависящим от времени гамильтонианом H :

$$H = H_0 + \omega(I_1^z + I_2^z) - \Omega_1(I_1^x \cos \varphi + I_1^y \sin \varphi) - \Omega_2(I_2^x \cos \varphi + I_2^y \sin \varphi).$$

Здесь $\Omega_j = \gamma_j B_{rf}$. Фаза φ РЧ-поля определяет направление поля во вращающейся системе координат. При $\varphi = 0$ поворот происходит вокруг оси x ($\alpha = x$, x -поворот), при $\varphi = \pi/2$ — вокруг оси y ($\alpha = y$, y -поворот). При этом если выбрать частоту переменного поля равной частоте переходов между уровнями энергии, $\omega = \varepsilon_n - \varepsilon_k$, то в первую очередь будут изменяться состояния, соответствующие данным уровням, и мы получим селективный поворот $\{\theta\}_{\alpha,j}^{k \leftrightarrow n}$ на угол $\theta = t_p \Omega_j I_{jkn}$, где I_{jkn} — модуль матричного элемента оператора I_j^x . Амплитуда РЧ-импульса должна удовлетворять условию селективности: $J \ll \Omega_j \ll q_j$. Для поворотов, требующих вращения вокруг оси z , будем применять составной РЧ-импульс:

$$\{\theta\}_{z,j}^{k \leftrightarrow n} = \{-\pi/2\}_{y,j}^{k \leftrightarrow n} \{\theta\}_{x,j}^{k \leftrightarrow n} \{\pi/2\}_{y,j}^{k \leftrightarrow n}. \quad (8)$$

Перейдем к построению в выражении (6) оператора эволюции с H_p :

$$H_p/Q = C(N) + A(N)I_1^z + B(N)I_2^z + 4d_2^2(I_1^z)^2 + 4d_1^2(I_2^z)^2 + D(N)I_1^z I_2^z - 8d_1(I_2^z)^2 I_1^z - 8d_2(I_1^z)^2 I_2^z + 16(I_1^z)^2 (I_2^z)^2, \quad (9)$$

где

$$C(N) = (N - d_1 d_2)^2, \quad A(N) = 4d_2(N - d_1 d_2),$$

$$B(N) = 4d_1(N - d_1 d_2), \quad D(N) = -8(N - 2d_1 d_2).$$

Оператор эволюции с гамильтонианом (9) может быть записан в виде произведения экспоненциальных операторов, соответствующих слагаемым в (9). Константа $C(N)$, входящая в гамильтониан, хоть и

зависит от N , но дает лишь общий фазовый множитель, поэтому ее можно не учитывать.

Операторы с одночастичными взаимодействиями могут быть реализованы с помощью последовательности операторов селективных z -поворотов следующим образом.

Для целочисленных спинов I

$$\exp(-i\theta I^z) = W_+^1(I)W_-^1(I), \quad (10)$$

где

$$W_+^1(K) = \prod_{m=1}^K \left\{ 2\theta \left[mI - \frac{m}{2}(m-1) \right] \right\}_z^{m \leftrightarrow m+1},$$

$$W_-^1(K) = \prod_{m=1}^K \left\{ 2\theta \left[mI - \frac{m}{2}(m-1) \right] \right\}_z^{d-m \leftrightarrow d-m+1},$$

для полуцелых спинов I

$$\exp(-i\theta I^z) = W_+^1\left(I - \frac{1}{2}\right) W_-^1\left(I - \frac{1}{2}\right) \times \left\{ 2\theta \left[I \left(I + \frac{1}{2} \right) - \left(I - \frac{1}{2} \right) \right] \right\}_z^{I+1/2 \leftrightarrow I+3/2}. \quad (11)$$

Для квадратов одночастичных операторов для целочисленных спинов I находим

$$\exp\{-i\varphi [(I^z)^2 + E_d A]\} = W_+^2(I)W_-^2(I), \quad (12)$$

где

$$W_+^2(K) = \prod_{m=1}^K \left\{ 2\varphi \left[\sum_{n=0}^{n=m-1} (I-n)^2 + mA \right] \right\}_z^{m \leftrightarrow m+1},$$

$$W_-^2(K) = \prod_{m=1}^K \left\{ -2\varphi \left[\sum_{n=0}^{n=m-1} (I-n)^2 + mA \right] \right\}_z^{d-m \leftrightarrow d-m+1}, \quad (13)$$

для полуцелых спинов I —

$$\exp\{-i\varphi [(I^z)^2 + E_d A]\} = W_+^2\left(I - \frac{1}{2}\right) W_-^2\left(I - \frac{1}{2}\right), \quad (14)$$

$$A = -\frac{I(I+1)}{3} = -\frac{d^2-1}{12}.$$

Операторы с двухчастичными взаимодействиями,

$$U(\lambda, p_1, p_2) = \exp[-i\lambda(I_2^z)^{p_2}(I_1^z)^{p_1}], \quad (15)$$

$$p_1, p_2 = 1, 2,$$

строятся путем составления нескольких интервалов свободной эволюции под действием гамильтониана (1) с длительностями, кратными периоду $2\pi/q_1, 2\pi/q_2, 2\pi/\omega_1, 2\pi/\omega_2$, и наборов операторов 180-градусных y -поворотов. При таких длительностях в операторе эволюции останется только вклад спин-спинового взаимодействия:

$$U(t) = \exp(itH_0) = U(tJ, 1, 1) = \exp(-itJI_2^zI_1^z). \quad (16)$$

Оба оператора, (15) и (16), представлены диагональными матрицами с матричными элементами в виде экспонент $\exp(-i\Phi_m)$, $m = 1, 2, \dots, d_1d_2$ с разными фазами. Эти фазовые множители будем переставлять местами с помощью селективных операторов поворота на 180° . Например, в операторе $\{-\pi\}_y^{n\leftrightarrow k}U(t)\{\pi\}_y^{n\leftrightarrow k}$ обменяются местами $\exp(-i\Phi_n)$ и $\exp(-i\Phi_k)$.

Заметим, что если переставить местами матричные элементы оператора I_z , симметричные относительно середины, то произойдет инверсия знака оператора:

$$\Pi_d^\mp I_z \Pi_d = -I_z, \quad (17)$$

где для целочисленных спинов

$$\Pi_d = \{\pi\}_y^{1\leftrightarrow d}\{\pi\}_y^{2\leftrightarrow d-1} \dots \{\pi\}_y^{(d-1)/2\leftrightarrow (d+3)/2},$$

а для полуцелых

$$\Pi_d = \{\pi\}_y^{1\leftrightarrow d}\{\pi\}_y^{2\leftrightarrow d-1} \dots \{\pi\}_y^{d/2\leftrightarrow d/2+1},$$

Π_d^\mp — эрмитово-сопряженный оператор. Отметим, что операторы на «запрещенных» переходах могут быть получены через цепочку переходов между ближайшими уровнями:

$$\begin{aligned} \{\pi\}_y^{k\leftrightarrow d+1-k} &= \\ &= \{\pi\}_y^{k\leftrightarrow k+1}\{\pi\}_y^{k+1\leftrightarrow k+2} \dots \{\pi\}_y^{d-k\leftrightarrow d-k+1} \times \\ &\quad \times \{\pi\}_y^{d-k-1\leftrightarrow d-k} \dots \{\pi\}_y^{k\leftrightarrow k+1}. \end{aligned}$$

На основании (17) получаем

$$U(t)\Pi_{d_1}^\mp U(t)\Pi_{d_1} = U(t)\Pi_{d_2}^\mp U(t)\Pi_{d_2} = E_1 \otimes E_2. \quad (18)$$

Здесь и далее E_j — единичная матрица размерности d_j .

Если мы подействуем в произведении (18) на второй оператор $U(t)$ операторами селективного поворота между уровнями n и $n+1$ первого спина, то получим матрицу, совпадающую по виду с матрицей селективного поворота $\{\theta_2\}_{z,1}^{n\leftrightarrow n+1} \otimes E_2$, но с углом поворота, зависящим от состояния второго спина (с этими оговорками сохраним знак прямого произведения):

$$U(t)\{-\pi\}_{y,1}^{n\leftrightarrow n+1}\Pi_{d_1}^\mp U(t)\Pi_{d_1}\{\pi\}_{y,1}^{n\leftrightarrow n+1} = \{2tJI_2^z\}_{z,1}^{n\leftrightarrow n+1} \otimes E_2. \quad (19)$$

Для получения поворота противоположного знака, $\{-\theta\}_{z,1}^{n\leftrightarrow n+1}$, надо подействовать теми же селективными поворотами на первый оператор $U(t)$ в (19). Таким образом, если мы образуем два произведения вида (13) из преобразованных пар операторов эволюции (19) при изменяющихся от сомножителя к сомножителю длительностях,

$$2t_mJI_2^z = 2\varphi_2 \left[\sum_{n=0}^{m-1} (I_1 - n)^2 + mA_1 \right],$$

где

$$\varphi_2 = \tau JI_2^z, \quad \frac{t_m}{\tau} = \left[\sum_{n=0}^{m-1} (I_1 - n)^2 + mA_1 \right], \quad (20)$$

то мы получим оператор

$$\exp\{-i\varphi_2 [(I_1^z)^2 + E_1A_1]\} = \exp\{-i\tau JI_2^z [(I_1^z)^2 + E_1A_1]\}. \quad (21)$$

Действуя аналогично на состояния второго спина, можно получить оператор

$$\exp\{-i\tau I_1^z [(I_2^z)^2 + E_2A_2]\}, \quad (22)$$

а если сначала подействовать на один спин, а потом на другой, то получим

$$\exp\{-i\tau [(I_1^z)^2 + E_1A_1] [(I_2^z)^2 + E_2A_2]\}. \quad (23)$$

Определим по указанным правилам полное произведение операторов, дающее оператор эволюции $\exp(-i\Delta t H_p m/M)$. Домножив, согласно формулам (6) и (4), это произведение на операторы

$$\exp(-itH_c) = F \exp(-itH_0)F^{-1} \quad (24)$$

и подставив в (5), мы найдем в виде произведения искомый оператор эволюции, соответствующий такому изменению эффективного гамильтониана (2) во времени, которое требуется для выполнения алгоритма.

3. РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА НА СИСТЕМЕ ИЗ ДВУХ КВАДРУПОЛЬНЫХ ЯДЕР

Выполним моделирование работы алгоритма. В качестве примера возьмем два квадрупольных ядра со спинами $I_1 = 3/2$ ($d_1 = 4$) и $I_2 = 1$ ($d_2 = 3$). В данном конкретном случае общие формулы предыдущего раздела можно упростить, воспользовавшись свойствами

$$(I_1^z)^2 = 2|I_1^z| - 3E_1/4, \quad (I_2^z)^2 = |I_2^z|, \quad (25)$$

где $|I_i^z|$ — матрица с модулями величин спиновых проекций на диагонали. Гамильтониан (3) преобразуется к следующему виду:

$$H_p/Q = C(N) + A(N)I_1^z + B(N)I_2^z + 72|I_1^z| + 52|I_2^z| + D(N)I_1^z I_2^z - 64I_1^z |I_2^z| - 96|I_1^z| I_2^z + 32|I_1^z| |I_2^z|, \quad (26)$$

где

$$A(N) = 12(N - 12), \quad B(N) = 4(4N - 39),$$

$$D(N) = -8(N - 24).$$

Основное состояние H_p для каждого N будет давать искомые множители:

1) $N = 35$: $|\Psi(T)\rangle = |-3/2, -1\rangle$ с $I_1^z = -3/2$ ($p = 7$), $I_2^z = -1$ ($q = 5$);

1) $N = 21$: $|\Psi(T)\rangle = |-3/2, 0\rangle$ с $I_1^z = -3/2$ ($p = 7$), $I_2^z = 0$ ($q = 3$);

3) $N = 15$: двукратно вырожденное состояние $|\Psi(T)\rangle = |-1/2, 0\rangle/\sqrt{2} + |1/2, -1\rangle/\sqrt{2}$ с $I_1^z = -1/2$ ($p = 5$), $I_2^z = 0$ ($q = 3$) и $I_1^z = 1/2$ ($p = 3$), $I_2^z = -1$ ($q = 5$).

Операторы с одночастичными взаимодействиями могут быть реализованы с помощью последовательности операторов селективных z -поворотов следующим образом:

$$\begin{aligned} \exp(-i\theta I_1^z) &= \{3\theta\}_{z,1}^{1\leftrightarrow 2} \{4\theta\}_{z,1}^{2\leftrightarrow 3} \{3\theta\}_{z,1}^{3\leftrightarrow 4}, \\ \exp(-i\theta I_2^z) &= \{2\theta\}_{z,2}^{1\leftrightarrow 2} \{2\theta\}_{z,2}^{2\leftrightarrow 3}, \\ \exp(-i3\varphi |I_2^z|) &= \{2\varphi\}_{z,2}^{1\leftrightarrow 2} \{-2\varphi\}_{z,2}^{2\leftrightarrow 3} \times \\ &\quad \times \exp(-i2\varphi E_2), \\ \exp(-i\varphi |I_1^z|) &= \{\varphi\}_{z,1}^{1\leftrightarrow 2} \{-\varphi\}_{z,1}^{3\leftrightarrow 4} \exp(-i\varphi E_1). \end{aligned} \quad (27)$$

Операторы с двухчастичными взаимодействиями получим путем включения интервалов свободной эволюции операторов 180-градусных y -поворотов:

$$\begin{aligned} \exp(-it4JI_2^z |I_1^z|) &= \exp(-itJI_2^z 4E_1) \{-\pi\}_{y,1}^{3\leftrightarrow 4} \times \\ &\times \{-\pi\}_{y,1}^{2\leftrightarrow 3} \{-\pi\}_{y,1}^{3\leftrightarrow 4} \exp(-itJI_2^z I_1^z) \times \\ &\times \{\pi\}_{y,1}^{3\leftrightarrow 4} \{-\pi\}_{y,1}^{1\leftrightarrow 2} \exp(-itJI_2^z I_1^z) \{\pi\}_{y,1}^{1\leftrightarrow 2} \times \\ &\quad \times \{\pi\}_{y,1}^{2\leftrightarrow 3} \{\pi\}_{y,1}^{3\leftrightarrow 4}, \quad (28) \\ \exp(-it3JI_1^z |I_2^z|) &= \exp(-itJI_1^z 2E_2) \times \\ &\times \{-\pi\}_{y,2}^{2\leftrightarrow 3} \exp(-itJI_2^z I_1^z) \times \\ &\times \{-\pi\}_{y,2}^{1\leftrightarrow 2} \exp(-itJI_2^z I_1^z) \times \\ &\quad \times \{\pi\}_{y,2}^{1\leftrightarrow 2} \{\pi\}_{y,2}^{2\leftrightarrow 3}. \end{aligned}$$

Определенное по указанным правилам полное произведение операторов, дающее оператор эволюции $\exp(-i\Delta t H_p m/M)$, приведено в Приложении. Согласно (6), это произведение следует умножить на операторы $\exp(-itH_c)$. При получении H_c (4) оказалось возможным использовать более простое преобразование, опустив в разложениях для операторов квантового преобразования Фурье [26, 36] фазовые сдвиги и часть операторов y -поворотов:

$$\begin{aligned} U_F &= \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{y,1}^{3\leftrightarrow 4} \left\{ 2 \arccos \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \right\}_{y,1}^{2\leftrightarrow 3} \times \\ &\times \left\{ \frac{2\pi}{3} \right\}_{y,1}^{1\leftrightarrow 2} \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{y,2}^{2\leftrightarrow 3} \left\{ 2 \arccos \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \right\}_{y,2}^{1\leftrightarrow 2}, \quad (29) \\ \exp(-itH_c) &= U_F \exp(-itH_0) U_F^{-1}. \end{aligned}$$

Подставив полученные произведения в (5), найдем оператор эволюции, реализующий алгоритм факторизации. При расчетах будем использовать свойство произведения соседних сомножителей в (5):

$$\begin{aligned} U_F \exp\{-i[1 - (m+1)/M]\Delta t H_0\} U_F^{-1} U_F \times \\ \times \exp\{-i[1 - m/M]\Delta t H_0\} U_F^{-1} = \\ = U_F \exp(i\Delta t H_0/M) U_F^{-1}. \end{aligned}$$

4. РАСЧЕТ И ОБСУЖДЕНИЕ

В предыдущем разделе мы получили последовательность селективных РЧ-импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции. Для недопущения фазовых искажений длительность РЧ-импульсов должна быть кратной периоду $2\pi/q_1$. Поэтому при выбранной амплитуде Ω_2 РЧ-поля мы задаем длительности импульсов с точностью до целой части периода $2\pi/q_1$. По найденным операторным последовательностям мы выполнили моделирование реализации алгоритма факторизации для чисел $N = 15, 21, 35$ при разных значениях параметров. Полученные конечные состояния $|\Psi\rangle = U_T |\Psi(0)\rangle$ системы сравнивались с теоретически

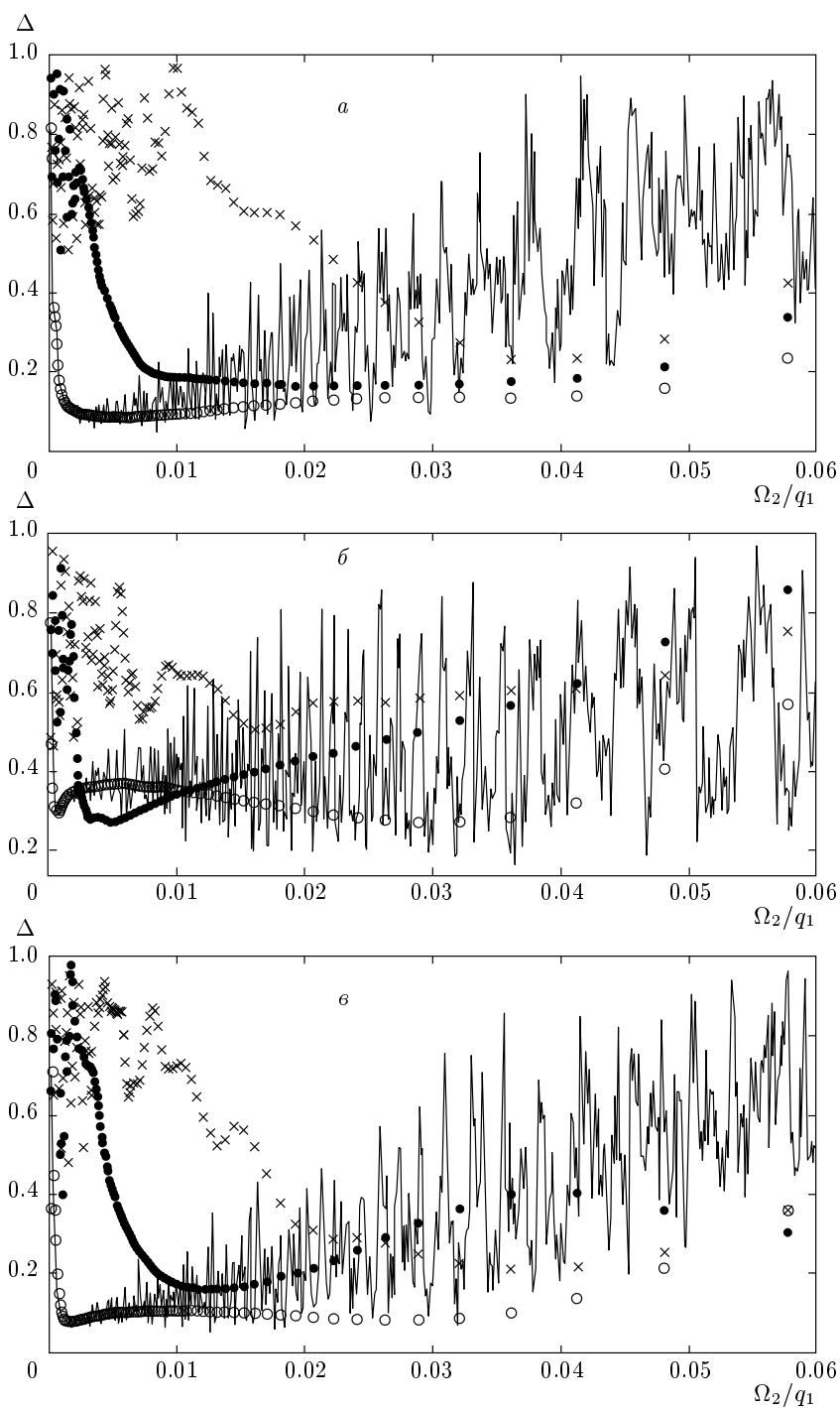


Рис. 1. Ошибка $\Delta = 1 - |\langle \Psi | \Psi_{theor} \rangle|$ реализации адиабатического алгоритма факторизации для трех чисел: *a* — $N = 35$ при $Q = q_1/8.08$; *б* — $N = 21$ при $Q = q_1/3.6$; *в* — $N = 15$ при $Q = q_1/2.8$, в зависимости от амплитуды Ω_2/q_1 РЧ-поля при трех величинах спин-спинового взаимодействия: $J/q_1 = 10^{-6}$ (светлые кружки и ломаная линия), $J/q_1 = 10^{-5}$ (темные кружки), $J/q_1 = 5 \cdot 10^{-5}$ (кресты). Значения других параметров: $M = 20$, $\omega_1 = 30q_1$, $\omega_2 = 50q_1$, $q_2 = 2q_1$, $\Delta t q_1 = \pi/100$

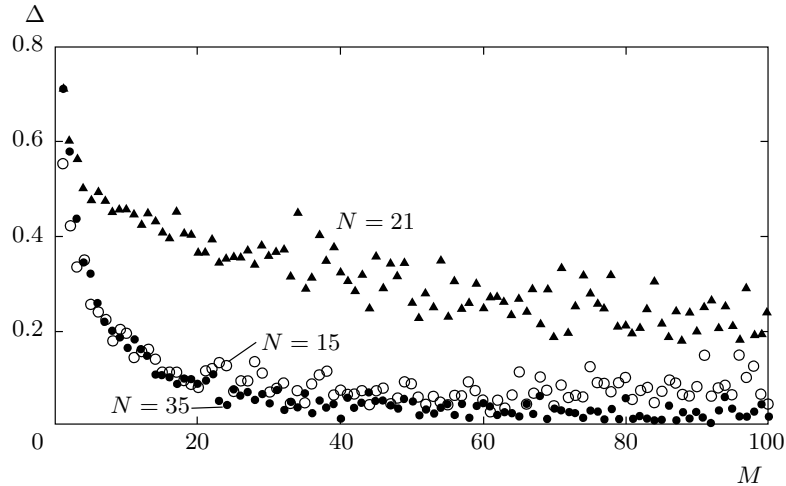


Рис. 2. Ошибка $\Delta = 1 - |\langle \Psi | \Psi_{theor} \rangle|$ реализации адиабатического алгоритма факторизации для трех чисел в зависимости от времени эволюции $M = T/\Delta t$ при $\omega_1 = 30q_1, \omega_2 = 50q_1, q_2 = 2q_1, J/q_1 = 10^{-6}, \Delta t q_1 = \pi/100$ и следующих значениях зависящих от N параметров: $\Omega/q_1 = 0.005, Q = q_1/8.08$ для $N = 35$; $\Omega/q_1 = 0.005, Q = q_1/3.6$ для $N = 21$ и $\Omega/q_1 = 0.0016, Q = q_1/2.8$ для $N = 15$

ожидаемыми значениями $|\Psi\rangle_{theor} = |\Psi(T)\rangle$. Величины ошибок реализации определялись по формуле

$$\Delta = 1 - |\langle \Psi | \Psi_{theor} \rangle|. \quad (30)$$

Результаты моделирования приведены на рисунках в виде зависимостей от Ω_2 ($\Omega_1 = \Omega_2 \gamma_1 / \gamma_2 = 0.6\Omega_2$) и M . Значения других параметров, Δt и Q , от которых также наблюдается сильная зависимость, подбирались из условия минимальности ошибки.

Зависимости ошибки от амплитуды РЧ-поля, показанные на рис. 1 ломаными линиями, демонстрируют сильные осцилляции, вызванные фазовыми искажениями. Для их устранения мы внесли изменения в процедуру расчета амплитуд РЧ-импульсов. Сначала выбираем амплитуду $\Omega_2 = q_1/2k\sqrt{2}$ РЧ-поля для реализации $\pi/2$ -импульса на спине 2 за время $t_p = 2\pi k/q_1$. При таком значении поля определяем длительности других импульсов с точностью до целой части периодов $2\pi/q_1$. После этого, если понадобится, немного изменяем амплитуду РЧ-поля каждого импульса для получения точного значения требуемого угла поворота. Рассчитанные зависимости показаны на рис. 1 символами. Оставшаяся ошибка обусловлена двумя основными причинами. Во-первых, РЧ-импульс помимо селективного поворота на выбранном переходе действует на остальные нерезонансные переходы. Эта ошибка растет при увеличении амплитуды РЧ-импульса. Во-вторых, спин-спиновое взаимодействие изменяет состояние системы во время действия РЧ-импуль-

сов. Эта ошибка растет при уменьшении амплитуды РЧ-импульса. В результате совместного действия получаются зависимости с минимумами, значения ошибки в которых растут с ростом J (монотонно при $N = 35$ и $N = 15$, немонотонно при $N = 21$).

Зависимости ошибки реализации от длительности адиабатической эволюции $T = \Delta t M$ показаны на рис. 2. При увеличении M и, следовательно, увеличении T ошибка уменьшается, что свидетельствует о верности найденной последовательности селективных РЧ-импульсов и выполнении условия адиабатичности. В случае $N = 21$ для достижения той же точности, что и при других N , требуется большее значение T . Это обусловлено тем, что величина щели Δ_N между основным и первым возбужденным уровнями гамильтониана (3) зависит от N :

$$\Delta_{21} = 16Q, \quad \Delta_{15} = 36Q, \quad \Delta_{35} = 100Q,$$

и для $N = 21$ она минимальна.

Ошибку можно уменьшить, сократив общее число РЧ-импульсов. Для этого селективные повороты вокруг оси z следует реализовать не через составной РЧ-импульс (8), а другим известным способом — посредством сдвига фазы последующих селективных РЧ-импульсов, действующих на этом переходе. Далее, для уменьшения ошибки можно от простых РЧ-импульсов прямоугольной формы перейти к селективным РЧ-импульсам гауссовой формы [10, 11, 13, 23]. Угол поворота определяется площадью такого импульса. Ошибка при отклонении

этой величины от нужного значения рассмотрена выше на примере импульсов прямоугольной формы. Отклонение временной зависимости амплитуды импульса от простой функциональной зависимости (константа или функция Гаусса) не обязательно ведет к увеличению ошибки. Наоборот, существенное уменьшение ошибки может быть получено, если перейти к РЧ-импульсам, сложная форма зависимости амплитуд которых от времени определяется методами оптимизации [37]. Например, в работе [12] был найден такой импульс для квантового преобразования Фурье четырехуровневого квадрупольного ядра Na, а в работе [38] применен сложный оптимизированный РЧ-импульс для реализации в целом оператора эволюции на малом временном интервале системы из трех ядерных спинов 1/2. Указанный оператор эволюции играет ту же роль, что и наш оператор U_m (6). Обобщение процедуры оптимизации на систему квадрупольных ядер рассмотрено в работе [25].

В итоге мы нашли последовательность РЧ-импульсов, которая позволяет смоделировать методом ЯМР реализацию квантового алгоритма факторизации. При этом длительность импульсной последовательности в реальном времени во много раз превзойдет исходное время T , поскольку оператор эволюции (6) на интервале времени $\Delta t = T/M$ получен из операторов свободной эволюции (табл. 1) с большей длительностью. Важно то, что показана управляемость рассматриваемой системы, а время реализации может быть существенно уменьшено описанными в предыдущем абзаце методами.

Наконец, отметим, что при демонстрации работы квантовых алгоритмов методами ЯМР сигнал наблюдается от большого ансамбля квантовых систем, поэтому квантовые вероятности выхода наблюдаются через интенсивности линий в спектре ЯМР при спектральной регистрации или через величины элементов матрицы плотности при томографической регистрации:

$$\rho_f = \left\{ \frac{1-\beta}{d_1 d_2} E_1 \otimes E_2 + \beta |\Psi\rangle\langle\Psi| \right\},$$

где β — амплитуда квазичистого состояния, пропорциональная обратной температуре. Получение квазичистого состояния системы из двух квадрупольных ядер обсуждается в работе [26].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы показали, что адиабатический алгоритм факторизации может быть выполнен на двух

Таблица 1. Оператор $\exp(-i\Delta t H_p m/M)$

j	$k-n$	α	θ
1	3-4	y	π
1	2-3	y	π
1	1-2	y	π
2	2-3	y	π
2	1-2	y	π
$\exp(-isD_4H_0/2)$			
V_4			
2	1-2	y	$-\pi$
$\exp(-isD_4H_0/2)$			
V_4			
1	3-4	y	π
1	1-2	y	$-\pi$
2	1-2	y	π
$\exp(-isD_4H_0/2)$			
V_4			
2	1-2	y	$-\pi$
$\exp(-isD_4H_0/2)$			
V_4			
2	2-3	y	$-\pi$
1	1-2	y	π
1	3-4	y	$-\pi$
$\exp(-3isD_3H_0/2)$			
V_3			
1	3-4	y	π
1	1-2	y	$-\pi$
$\exp(-3isD_3H_0/2)$			
V_3			
1	3-4	y	$-\pi$
1	2-3	y	$-\pi$
1	3-4	y	$-\pi$
2	2-3	y	π
2	1-2	y	π
$\exp(-2isD_2H_0)$			
V_2			
2	1-2	y	$-\pi$
$\exp(-2isD_2H_0)$			
V_2			
2	2-3	y	$-\pi$
$\exp(-6isD_1H_0)$			
V_1V_J			

Таблица 2. Произведение операторов V_4

j	$k-n$	α	θ
2	1-2	z	$sD_4(\omega_2 - q_2/3)$
2	2-3	z	$sD_4(\omega_2 + q_2/3)$
1	1-2	z	$sD_4(3\omega_1/2 - q_1)$
1	2-3	z	$2sD_4\omega_1$
1	3-4	z	$sD_4(3\omega_1/2 + q_1)$

Таблица 3. Произведение операторов V_3

j	$k-n$	α	θ
2	1-2	z	$sD_3(3\omega_2 - q_2)$
2	2-3	z	$sD_3(3\omega_2 + q_2)$
1	1-2	z	$sD_3(9\omega_1/2 - 3q_1)$
1	2-3	z	$6sD_3\omega_1$
1	3-4	z	$sD_3(9\omega_1/2 + 3q_1)$

Таблица 4. Произведение операторов V_2

j	$k-n$	α	θ
2	1-2	z	$sD_2(4\omega_2 - 4q_2/3)$
2	2-3	z	$sD_2(4\omega_2 + 4q_2/3)$
1	1-2	z	$sD_2(6\omega_1 - 4q_1)$
1	2-3	z	$8sD_2\omega_1$
1	3-4	z	$sD_2(6\omega_1 + 4q_1)$

Таблица 5. Произведение операторов V_1

j	$k-n$	α	θ
2	1-2	z	$4sD_1(3\omega_2 - q_2)$
2	2-3	z	$4sD_1(3\omega_2 + q_2)$
1	1-2	z	$6sD_1(3\omega_1 - 2q_1)$
1	2-3	z	$24sD_1\omega_1$
1	3-4	z	$6sD_1(3\omega_1 + 2q_1)$

кудитах вместо большего числа кубитов. При этом отпадает необходимость в трех- и четырехспиновых взаимодействиях. Продемонстрирована возможность получения зависящего от времени эффективного гамильтониана с помощью последовательности операторов, селективных по переходам. Для системы из квадрупольных ядер, выбранных

Таблица 6. Произведение операторов V_J

j	$k-n$	α	θ
2	1-2	z	$4sJ(b - 3D_3 - D_4 + 52)$
2	2-3	z	$4sJ(b - 3D_3 + D_4 - 52)$
1	1-2	z	$2sJ(3a - 6D_2 - 2D_4 + 216)$
1	2-3	z	$8sJ(a - 2D_2)$
1	3-4	z	$2sJ(3a - 6D_2 + 2D_4 - 216)$

в качестве кудитов, начальное суперпозиционное состояние и зависящий от времени эффективный гамильтониан могут быть получены с помощью найденной нами последовательности РЧ-импульсов, селективных по переходам. Однако, поскольку спин распространенных ядер ограничен числом $9/2$, для факторизации больших чисел предстоит распространить полученные теоретические результаты на другие многоуровневые системы, например, на молекулярные магнетики, спин которых достигает значений 10 и более [15, 39]. Предложенный подход окажется полезным также и при управлении с помощью селективных микроволновых или лазерных импульсов многоуровневыми состояниями соответственно сверхпроводящих систем [6, 8, 40] или атомов [16, 17, 19].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-07-00138).

ПРИЛОЖЕНИЕ

В табл. 1-6 приведены значения параметров в операторах поворотов $\{\theta\}_{\alpha,j}^{k \leftrightarrow n}$ (7), произведение которых совместно с операторами свободной эволюции, также приведенными в табл. 1 в виде $\exp(-is_r D_r H_0)$, $r = 1, 2, 3, 4$, образует оператор эволюции $\exp(-i\Delta t H_p m/M)$ с гамильтонианом (26). Операторы V_r добавлены для устранения односпиновых вкладов при произвольных длительностях интервалов свободной эволюции, не обязательно кратных периоду $2\pi/q_1$. Эволюцию с отрицательным временем в операторах $V_4 \exp(-is_4 D_4 H_0)$, а также в операторах $V_1 \exp(-is_1 D_1 H_0)$ при $N = 21$ и $N = 15$ получаем в два этапа. Реализуем эволюцию с положительным временем, взяв положительные значения констант $-D_4$ и $-D_1$ в указанных операторах, но подействуем на них дополнительными операторами по правилу (17) для изменения знака.

Для краткости были введены следующие обозначения:

$$s = \frac{m}{M} \frac{Q}{6J} t, \quad a = 3A(N), \quad b = 3B(N),$$

$$D_1 = -D(N), \quad D_2 = 64, \quad D_3 = 96, \quad D_4 = -32.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. К. А. Валиев, А. А. Кокин, *Квантовые компьютеры: надежды и реальность*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевск (2001); М. Нильсен, И. Чанг, *Квантовые вычисления и квантовая информация*, Мир, Москва (2006).
2. F. Motzoi, J. M. Gambetta, P. Rebentrost, and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 110501 (2009).
3. J. M. Gambetta, F. Motzoi, S. T. Merkel, and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. A* **83**, 012308 (2011).
4. T. C. Ralph, K. J. Resch, and A. Gilchrist, *Phys. Rev. A* **75**, 022313 (2007).
5. B. P. Lanyon, M. Barbieri, M. P. Almeida et al., *Nature Phys.* **5**, 134 (2009).
6. A. Fedorov, L. Steffen, M. Baur, and A. Wallraff, arXiv:quant-ph/1108.3966.
7. D. Gottesman, *Lecture Notes Comp. Sci.* **1509**, 302 (1999).
8. D. Gottesman, A. Kitaev, and J. Preskill, *Phys. Rev. A* **64**, 012310 (2001).
9. А. Р. Кессель, В. Л. Ермаков, *Письма в ЖЭТФ* **70**, 59 (1999); **71**, 443 (2000).
10. A. K. Khitrin and B. M. Fung, *J. Chem. Phys.* **112**, 6963 (2000).
11. V. L. Ermakov and B. M. Fung, *Phys. Rev. A* **66**, 042310 (2002).
12. H. Kampermann and W. S. Veeman, *J. Chem. Phys.* **122**, 214108 (2005).
13. R. Das and A. Kumar, *Appl. Phys. Lett. A* **89**, 024107 (2006).
14. A. G. Araujo-Ferreira, C. A. Brasil, D. O. Soares-Pinto et al., arXiv:cond-mat/1108.5353.
15. M. N. Leuenberger and D. Loss, *Nature* **410**, 789 (2001).
16. J. Ahn, T. C. Weinacht, and P. H. Bucksbaum, *Science* **287**, 463 (2000).
17. A. Muthukrishnan and C. R. Stroud (Jr.), *Phys. Rev. A* **62**, 052309 (2000).
18. A. Yu. Vlasov, *J. Math. Phys.* **43**, 2959 (2002).
19. G. K. Brennen, D. P. O'Leary, and S. S. Bullock, *Phys. Rev. A* **71**, 052318 (2005).
20. Y. Fan, arXiv:quant-ph/0809.0932.
21. В. Е. Зобов, Д. И. Пехтерев, *Письма в ЖЭТФ* **89**, 303 (2009).
22. Y.-M. Di and H.-R. Wei, arXiv:quant-ph/1105.5485.
23. R. Das, A. Mitra, V. Kumar, and A. Kumar, *Int. J. Quant. Inf.* **1**, 387 (2003).
24. D. O. Soares-Pinto, L. C. Celeri, R. Auccaise et al., *Phys. Rev. A* **81**, 062118 (2010).
25. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, *ЖЭТФ* **140**, 211 (2011).
26. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, А. С. Ермилов, *Письма в ЖЭТФ* **87**, 385 (2008).
27. L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5452 (2000).
28. E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann et al., *Science* **292**, 472 (2001); arXiv:quant-ph/0001106.
29. D. Aharonov, W. van Dam, J. Kampe et al., *SIAM J. Comput.* **37**(1), 166 (2007); arXiv:quant-ph/0405098.
30. A. Das and B. K. Chakrabarti, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1061 (2008).
31. G. Schaller and R. Schitzhold, *Quant. Inform. and Comput.* **10**, 0109 (2010); arXiv:quant-ph/0708.1882.
32. M. W. Johnson, M. H. S. Amin, S. Gildert et al., *Nature* **473**, 194 (2011).
33. X. Peng, Z. Liao, N. Xu et al., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 220405 (2008).
34. N. G. Dickson and M. H. S. Amin, arXiv:quant-ph/1108.3303.
35. Ч. Сликтер, *Основы теории магнитного резонанса*, Мир, Москва (1981).
36. А. С. Ермилов, В. Е. Зобов, *Опт. и спектр.* **103**, 994 (2007).
37. N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet et al., *J. Magn. Reson.* **172**, 296 (2005).
38. D. Lu, N. Xu, R. Xu et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 020501 (2011).
39. J. R. Friedman and M. P. Sarachik, *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* **1**, 109 (2010).
40. F. W. Strauch, *Phys. Rev. A* **84**, 052313 (2011).