ЖЭТФ, 2014, том 145, вып. 1, стр. 25–34

О ВЛИЯНИИ ФАЗОВОГО МНОЖИТЕЛЯ НА МИНИМАЛЬНОЕ ВРЕМЯ РЕАЛИЗАЦИИ КВАНТОВОГО ВЕНТИЛЯ

*В. Е. Зобов**, *В. П. Шауро*

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

Поступила в редакцию 12 апреля 2013 г.

Показана связь фазового множителя квантового вентиля с расположением уровней энергии его эффективного гамильтониана и со временем реализации вентиля. На примере вентилей прямого и обратного квантового преобразований Фурье для кутрита, представленного квадрупольным ядром со спином $I = 1$, а также системы из двух кубитов ($I = 1/2$), найдены эффективные гамильтонианы и минимальные времена реализации, соответствующие разным глобальным фазам. Предложены схемы их реализации методом ядерного магнитного резонанса с помощью последовательностей радиочастотных импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции. Аналитические результаты для минимальных времен вентилей согласуются с результатами, найденными методами численной оптимизации. Выполнено разделение рассматриваемой фазы на динамическую и геометрическую части.

DOI: 10.7868/S0044451014010039

1. ВВЕДЕНИЕ

Для обработки квантовой информации необходимо уметь осуществлять последовательность из базисных квантовых логических операций (вентилей) на заданной физической системе [1, 2]. При этом квантовые вычисления можно проводить как на двухуровневых квантовых системах (кубитах), так и на многоуровневых — кудитах [3–5] (при наличии d-уровней). Последние обладают рядом преимуществ, в частности, тот же размер вычислительного базиса обеспечивается меньшим числом кудитов. При рассмотрении реализации квантовых алгоритмов помимо операционной сложности (число вентилей для выполнения алгоритма [2]) необходимо также учитывать временную сложность (время, затрачиваемое на выполнение алгоритма) [6–11]. Уменьшение этого времени минимизирует потери из-за взаимодействия с окружением. Временная сложность квантовых логических операций определяется рассматриваемой квантовой системой и способом управления ею. В общем случае наличие некоторого минимального времени T_{min}, за которое может быть реализован квантовый вентиль с приемлемой величиной ошибки, является фундаментальным ограничением на скорость квантовых операций.

Нахождение эффективных способов управления квантовыми системами для выполнения вентилей с максимальной точностью за минимальное время является важнейшей задачей на пути к созданию полномасштабного квантового компьютера. Среди физических систем, используемых для этой цели, выделяются сравнительной простотой системы из ядерных спинов. Поэтому к настоящему времени на таких системах выполнено много экспериментальных работ, демонстрирующих реализацию квантовых алгоритмов методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [12]. В некоторых простых случаях минимальное время вентиля и эффективный гамильтониан для его выполнения с помощью радиочастотного (РЧ) магнитного поля удается найти аналитически (см., например, работы [8–10, 13, 14]). В более сложных системах для этих целей используются численные методы [7, 11, 15–20].

Ключевую роль во многих квантовых алгоритмах играет квантовое преобразование Фурье (КПФ) [1, 2, 12]. В результате расчетов КПФ на системах из спинов $I = 1/2$ было обнаружено, что минимальное время T_{min} сильно зависит от фазового множителя в определении вентиля [7, 11]. Дело в том, что оператор эволюции $U(T)$ спиновой системы в течение времени T с гамильтонианом, след которого равен

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

нулю, принадлежит к специальной унитарной группе $SU(N)$ (N — размер гильбертова пространства рассматриваемой системы). Следовательно, выполняется равенство $\det\{U(T)\} = 1$. В то же время квантовые вентили U_G определены в группе унитарных операторов $U(N)$, для которых равенство единице выполняется для модулей определителей, $|\det\{U_G\}| = 1$. По этой причине мы можем реализовать вентили только с точностью до фазового множителя:

$$U_G = \exp(-i\phi_p)U(T). \tag{1}$$

Глобальную фазу в (1) можно выбрать из некоторого набора значений [7],

$$\phi_p = \phi_0 + 2\pi p/N, \quad p = 0, 1, \ldots, N-1, \tag{2}$$

где $N = 2^n$ для системы из n спинов 1/2, а ϕ_0 — минимальное значение угла $\phi_0 \in [0, \pi]$, при котором $\det\{\exp(i\phi_0)U_G\} = 1$. Численный расчет [7] для вентиля КПФ на трех спинах 1/2 показал зависимость минимального времени T_{min} от значения (2) глобальной фазы. В работе [11] подобный эффект получен для вентилей КПФ и перестановки состояний (SWAP) на двух спинах 1/2. В работе [20] численное моделирование реализации КПФ на кудитах с числом состояний $d = 3$ и $d = 4$, представленных квадрупольными ядрами со спинами соответственно $I = 1$ и $I = 3/2$, также продемонстрировало сильную зависимость минимальной длительности вентиля от значения глобальной фазы.

В настоящее время анализу различных проявлений квантовой фазы посвящено много работ (см. обзоры [21–23]). Чаще всего рассматривают фазу Берри [24] при адиабатической эволюции и фазу Ааронова–Анандана [25] при неадиабатической эволюции. В общем случае полная фаза является суммой динамической и геометрической частей. В области квантовых вычислений основное внимание уделяется реализации квантовых вентилей с помощью геометрической фазы (см. [12, 23, 26–28] и приведенные там ссылки). В работе [29] авторы анализируют фазу и гамильтониан вентиля, взяв в качестве примеров вентили поворота кубита и SWAP между концами спиновой цепочки. Отмеченная выше связь между фазовым множителем вентиля и минимальным временем его реализации, насколько нам известно, не объяснена и рассмотрена в настоящей работе на примере КПФ.

Ранее численными методами установлено [7, 11, 20], что можно найти такую зависимость РЧ-поля от времени, которая позволит реализовать вентиль с одним из возможных значений глобальной фазы (2), каждому из которых соответствует свое минимальное время реализации. Понятно, что сам по себе фазовый множитель не может влиять на длительность импульса. Следовательно, должна быть другая причина, приводящая к такой связи. Однако по рассчитанной компьютером сложным временным зависимостям РЧ-поля очень трудно понять механизмы этой связи. Поэтому для этих целей в настоящей работе мы применяем аналитические методы, с помощью которых исследуем эффективные гамильтонианы, реализующие вентиль, и рассматриваем простые способы его приближенного построения. В разд. 2 получены общие формулы, устанавливающие связь между фазовым множителем квантового вентиля и эффективным гамильтонианом, его реализующим. В разд. 3 рассмотрен пример КПФ для кутрита, представленного квадрупольным ядром со спином $I = 1$. В разд. 4 получен эффективный гамильтониан КПФ для системы из двух кубитов. В разд. 5 выполнено разделение рассматриваемой фазы на динамическую и геометрическую части.

2. СВЯЗЬ ФАЗОВОГО МНОЖИТЕЛЯ С ЭФФЕКТИВНЫМ ГАМИЛЬТОНИАНОМ ВЕНТИЛЯ

Пусть унитарный оператор некоторого вентиля в вычислительном базисе представлен матрицей U_G, которую запишем в экспоненциальной форме:

$$U_G = e^{iK}. \tag{3}$$

С помощью преобразования P приведем матрицы U_G и K к диагональному виду:

$$P^\dagger K P = D = \sum_{f=1}^{N} \Lambda_f |f\rangle\langle f|, \tag{4}$$

$$P^\dagger U_G P = \exp(iD) = \sum_{f=1}^{N} \exp(i\Lambda_f)|f\rangle\langle f|, \tag{5}$$

где $|f\rangle\langle f|$ — оператор проецирования на собственное состояние $|f\rangle$. Если теперь мы добавим к собственному значению Λ_k число $2\pi m_k$, где m_k — целое число, то значение экспоненциальной функции в выражении (5) не изменится, но изменится матрица D, а следовательно, матрица K преобразуется в новую матрицу

$$K_m = P\left(D + 2\pi m_k|k\rangle\langle k|\right)P^\dagger = \\ = K + 2\pi m_k P|k\rangle\langle k|P^\dagger. \tag{6}$$

При этом изменится след матрицы:

$$\operatorname{Tr} K_m = \operatorname{Tr} K + 2\pi m_k \equiv N\Phi_m. \tag{7}$$

Допустим, мы хотим реализовать вентиль U_G на выбранной физической системе с помощью эффективного гамильтониана H_{eff}. Поскольку его след равен нулю, для реализации следует выбрать матрицу

$$TH^m_{eff} = -K_m + \Phi_m E, \tag{8}$$

где E — единичная матрица. Поясним преобразования (6) и (8) на физическом языке. При выборе различных наборов чисел m_k в выражении (6) эффективный гамильтониан (8) изменяется таким образом, что у него сдвигаются один или несколько энергетических уровней на величины $2\pi m_k/T$. Произошедшее при этом изменение средней энергии устраняем сдвигом шкалы, приняв это среднее значение за начало координат. В результате получим оператор

$$U_m(T) = \exp(-iTH^m_{eff}) = U_G \exp(-i\Phi_m). \tag{9}$$

Отметим, что предложенное преобразование (7) позволило изменить след матрицы K и перейти от одного значения глобальной фазы к другому, тогда как унитарные преобразования (например, вращения, вызванные внешним полем) сохраняют след матрицы.

Из сравнения операторов (9) и (1) находим

$$\phi_p = -\Phi_m \mod (2\pi).$$

Таким образом, мы получили оператор U_G (1) с точностью до глобальной фазы, каждому значению которой из набора (2) соответствует свой эффективный гамильтониан. При такой реализации вентиля появляется возможность выбирать из семейства эффективных гамильтонианов H^m_{eff} тот, который имеет преимущества, например, может быть реализован за меньшее время.

Рассмотрим вентиль КПФ с матрицей:

$$U_G = \mathrm{QFT}_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \times$$
$$\times \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \sigma & \sigma^2 & \dots & \sigma^{N-1} \\ 1 & \sigma^2 & \sigma^4 & \dots & \sigma^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \sigma^{N-1} & \sigma^{2(N-1)} & \dots & \sigma^{(N-1)^2} \end{pmatrix}, \tag{10}$$
$$\sigma = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right).$$

Разберем описанные выше преобразования на примере кутрита. Тогда в выражениях (3)–(5) для матрицы $U_G = \mathrm{QFT}_3$ (10) имеем

$$K = \frac{\pi}{2}\begin{pmatrix} 2g_1 & -g_2 & -g_2 \\ -g_2 & 1+g_2/2 & g_2/2 \\ -g_2 & g_2/2 & 1+g_2/2 \end{pmatrix},$$
$$D = \pi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \tag{11}$$

где $g_1 = \sin^2(\theta/2)$, $g_2 = \cos\theta = 1/\sqrt{3}$, $\theta = \operatorname{arctg}\sqrt{2}$. Матрица

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \times$$
$$\times \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) & 0 \\ -\cos(\theta/2) & \sin(\theta/2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{12}$$

преобразует матрицы K и D к диагональному виду. Матрицы

$$2\pi m_1 P|1\rangle\langle 1|P^\dagger =$$
$$= \pi m_1 \begin{pmatrix} 2g_1 & -g_2 & -g_2 \\ -g_2 & 1-g_1 & 1-g_1 \\ -g_2 & 1-g_1 & 1-g_1 \end{pmatrix},$$

$$2\pi m_2 P|2\rangle\langle 2|P^\dagger =$$
$$= \pi m_2 \begin{pmatrix} 2(1-g_1) & g_2 & g_2 \\ g_2 & g_1 & g_1 \\ g_2 & g_1 & g_1 \end{pmatrix}, \tag{13}$$

$$2\pi m_3 P|3\rangle\langle 3|P^\dagger = \pi m_3 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

задают изменения эффективного гамильтониана.

Возвращаясь к общему случаю, заметим, что вентиль КПФ (10) можно получить с помощью последовательности поворотов, селективных по переходам между уровнями [30, 31]. В этом случае изменение фазового множителя (1) скажется на численных значениях показателей экспонент у диагональной части разложения КПФ, но не повлияет на саму последовательность операторов селективных поворотов. Такой способ получения вентиля КПФ не является оптимальным по времени, как было продемонстрировано численными расчетами в работе [16]. Для оптимальной реализации вентиля необходимо воздействовать на все переходы одновременно, как это происходит в случае выполнения вентиля КПФ посредством оптимизированного РЧ-импульса или с помощью эффективного гамильтониана (8).

3. ПОСТРОЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА КПФ КУТРИТА

Рассмотрим квадрупольное ядро со спином $I = 1$, помещенное в постоянное сильное магнитное поле и управляющее магнитное РЧ-поле. В системе отсчета, вращающейся вокруг направления постоянного поля (ось z) с частотой РЧ-поля ω_{rf} [32], гамильтониан принимает вид

$$H(t) = -(\omega_0-\omega_{rf})I_z+u_x(t)I_x+u_y(t)I_y+H_q, \quad H_q = q(I_z^2 - 2/3). \tag{14}$$

Здесь ω_0 — ларморова частота, I_α — оператор проекции спина на ось α ($\alpha = x, y, z$), q — константа квадрупольного взаимодействия ядра с градиентом аксиально-симметричного кристаллического поля, амплитуда $u_\alpha(t)$ — проекция управляющего РЧ-поля на ось α. Энергию будем измерять в частотных единицах и полагать $\hbar = 1$. Перейдем к безразмерному времени и безразмерным частотам, выраженным соответственно в единицах $1/q$ и q. В качестве кутритов, например, следуя работе [33], можно взять ядра дейтерия ($I = 1$) в жидком кристалле. Спектр ЯМР состоит из двух узких линий с расщеплением 200 Гц, что позволяет управлять всеми переходами между тремя уровнями оптимизированным РЧ-импульсом [20] с достижимой на практике амплитудой.

Для реализации вентиля для квантовых вычислений необходимо найти управляющее поле $u_\alpha(t)$ (14) такое, чтобы оператор эволюции

$$U(T) = \hat{T}\exp\left(-i\int_0^T H(t)\,dt\right) \tag{15}$$

за время T выполнял нужное логическое унитарное преобразование состояния кутрита с точностью до фазового множителя (1). Здесь $\hat{T}$ — оператор упорядочения во времени. Один из вариантов численного решения данной задачи дан в работе [20]. В настоящем разделе мы аналитически построим эффективный гамильтониан, реализующий вентиль КПФ.

В отсутствие РЧ-поля система (14) имеет три неэквидистантных уровня энергии для состояний с различными значениями I_z:

$$|I_z = 1\rangle = |1\rangle, \quad |I_z = 0\rangle = |2\rangle, \quad |I_z = -1\rangle = |3\rangle. \tag{16}$$

Эти состояния выберем в качестве вычислительного базиса кутрита. Ранее [13] мы нашли эффективный гамильтониан для поворотов, селективных по переходам между уровнями этого кутрита. Для получения КПФ кутрита мы должны построить такой эффективный гамильтониан, который имел бы вид матриц H_{eff}^m (8) с подстановкой выражений (11) и (13). При этом он должен быть построен из операторов, описывающих допустимые в нашей модели воздействия на систему. Введем обозначения

$$A = \exp(-i\varphi I_x)(H_q t_1)\exp(i\varphi I_x), \quad B = \exp(-i\psi I_y)(H_q t_2)\exp(i\psi I_y), \quad C = \xi I_x + \delta I_z, \tag{17}$$

где первые два оператора могут быть получены из операторов свободной эволюции и операторов неселективных поворотов на углы φ и ψ на основании свойства экспоненциальных операторов:

$$\exp(-i\varphi I_x)\exp(iHt)\exp(i\varphi I_x) = \exp\left[\exp(-i\varphi I_x)iHt\exp(i\varphi I_x)\right].$$

Оператор C в (17) получается с помощью РЧ-поля (в отличие от случая селективных поворотов [13] мы взяли z-поле вместо y-поля). Приравнивая сумму матриц операторов (17) к (8), получаем систему уравнений

$$-K_m+\Phi_m E=\begin{pmatrix} \frac{1}{6}\left[(3\cos^2\varphi-1)t_1+(3\cos^2\psi-1)t_2\right]+\delta & \frac{1}{\sqrt{2}}(-it_1\sin\varphi\cos\varphi+t_2\sin\psi\cos\psi+\xi) & -\frac{1}{2}(t_1\sin^2\varphi-t_2\sin^2\psi) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(it_1\sin\varphi\cos\varphi+t_2\sin\psi\cos\psi+\xi) & -\frac{1}{3}\left[(3\cos^2\varphi-1)t_1+(3\cos^2\psi-1)t_2\right] & \frac{1}{\sqrt{2}}(it_1\sin\varphi\cos\varphi-t_2\sin\psi\cos\psi+\xi) \\ -\frac{1}{2}(t_1\sin^2\varphi-t_2\sin^2\psi) & \frac{1}{\sqrt{2}}(-it_1\sin\varphi\cos\varphi-t_2\sin\psi\cos\psi+\xi) & \frac{1}{6}\left[(3\cos^2\varphi-1)t_1+(3\cos^2\psi-1)t_2\right]-\delta \end{pmatrix}, \quad (18)$$

совместное решение которых дает искомые значения параметров, приведенные в табл. 1. Для каждого значения фазы выбраны решения с положительными временами эволюции, приводящие к минимальному значению суммы $T=t_1+t_2$.

Таким образом, при указанных в табл. 1 параметрах получаем для КПФ матрицу $-K_m+\Phi_m E$ в виде суммы:

$$TH_{eff}^m=A+B+C. \quad (19)$$

Поскольку операторы в этом выражении не коммутируют друг с другом, для получения импульсной последовательности, реализующей данный гамильтониан, используем формулу Троттер–Сузуки [34] для экспоненциальных операторов:

$$\left(e^{-iA/2r}e^{-iB/2r}e^{-iC/r}e^{-iB/2r}e^{-iA/2r}\right)^r = e^{-i(A+B+C)}+O(r^{-3}). \quad (20)$$

В силу выражения (19) при $r\to\infty$ приведенное произведение операторов сходится к идеальному вентилю КПФ (10): $\mathrm{QFT}_3\exp\{-i\Phi_m\}$.

Повторяемое r раз произведение операторов в левой части формулы (20) в скобках можно получить с помощью операторов неселективных поворотов $\{\theta\}_\alpha=\exp(-i\theta I_\alpha)$, разделенных интервалами свободной эволюции, показанными стрелками $\xrightarrow{t}\equiv\exp(-itH_q)$:

$$\{\varphi\}_x\xrightarrow{t_1/2r}\{\varphi\}_{-x}\{\psi\}_y\xrightarrow{t_2/2r}\{\psi\}_{-y}\{\Omega/r\}_{\mathbf{\Omega}}\times \times\{\psi\}_y\xrightarrow{t_2/2r}\{\psi\}_{-y}\{\varphi\}_x\xrightarrow{t_1/2r}\{\varphi\}_{-x}, \quad (21)$$

где в центре последовательности стоит поворот на угол $\Omega/r=\sqrt{\xi^2+\delta^2}/r$ вокруг оси с направляющими косинусами ξ/Ω и δ/Ω по осям x и z. Неселективный поворот может быть получен с помощью простого или составного импульса РЧ-поля большой амплитуды [14].

В квантовых алгоритмах наряду с прямым КПФ используется обратное КПФ: $U_G^\dagger=\mathrm{QFT}_3^{-1}$. Поскольку в формулах (9) и (19) мы не можем поменять знак времени, следует поменять знак эффективного гамильтониана при неизменном исходном квадрупольном взаимодействии (14). Найденные после решения уравнений (18) для этого случая значения параметров приведены в табл. 2.

Выше мы использовали стандартное соотношение (16) между физическим базисом системы (состояниями с различными проекциями спина) и логическим базисом кутрита. Однако мы можем изменить это соотношение на другое,

$$|I_z=0\rangle=|1\rangle,\quad |I_z=1\rangle=|2\rangle, \quad |I_z=-1\rangle=|3\rangle, \quad (22)$$

которое больше соответствует расположению энергетических уровней гамильтониана во вращающейся системе координат. В качестве примера укажем работу [35], в которой продемонстрировано повышение эффективности работы сумматора на квадрупольном ядре ^{133}Cs ($I=7/2$) после переименования вычислительного базиса. Изменение базиса (16) на (22) приведет к простой перестановке матричных элементов эффективного гамильтониана в правой части уравнения (18):

$$\Pi TH_{eff}^m\Pi=\Pi(A+B+C)\Pi,\quad \Pi=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}.$$

Решив новые системы уравнений, находим значения параметров, приведенные в табл. 3 и 4.

В новом базисе решение системы (18) имеет более простую форму, чем в старом. Это связано с тем, что в новом базисе матрица эффективного гамильтониана (18) имеет такую же симметрию, как и матрица оператора K (11) для КПФ. Как видно из табл. 3, для данной перестановки наименьшее время $T = 2.72$ реализуется для фазы $\Phi_m = 3\pi/6$, и оно меньше, чем в случае стандартного логического базиса (16).

Соответствующие всем рассмотренным случаям эффективные гамильтонианы и необходимые для их реализации последовательности неселективных РЧ-импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции, могут быть получены по формулам (20) и (21). Те же вентили могут быть реализованы с помощью оптимизированных РЧ-импульсов, временные зависимости амплитуд которых ($u_\alpha(t)$ в выражении (14)) определяются численно, как это описано в работе [20]. В результате расчетов мы получили, что минимальные длительности T_{min} таких импульсов принимают одно из трех значений в зависимости от величины фазового множителя. Для всех рассмотренных выше вариантов КПФ кутрита эти три длительности в пределах точности вычислений совпали, но соответствующие им значения фазовых множителей меняются местами, как это показано в табл. 5. Отметим, что временные зависимости амплитуд оптимизированных РЧ-импульсов, рассчитанные для разных вариантов КПФ, при этом сильно различаются.

Получаем, что соотношение длительностей T_{min} реализации КПФ при разных значениях глобальной фазы, взятых из таблиц для эффективных гамильтонианов, качественно согласуется с соотношением результатов численного эксперимента, приведенных в табл. 5. Количественные значения T_{min} при численной оптимизации оказываются меньше, что свидетельствует о необходимости усложнения гамильтониана H_{eff} или придания ему явной временной зависимости для достижения оптимальности в аналитическом подходе. Тем не менее полученное нами значение $T = 2.72$ примерно в два раза меньше рассчитанной минимальной длительности вентиля КПФ $T = 5.36$ при его реализации в виде последовательности оптимальных селективных поворотов [16].

4. ПОСТРОЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА КПФ ДВУХ КУБИТОВ

В качестве второго примера возьмем систему из двух спинов 1/2 с гамильтонианом

$$H = 4J_z I_{1z} I_{2z} + 4J_x(I_{1x}I_{2x} + I_{1y}I_{2y}) + \\ + 2b(I_{1z} + I_{2z}), \quad (23)$$

имеющим матрицу

$$H = \begin{pmatrix} J_z + 2b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J_z & 2J_x & 0 \\ 0 & 2J_x & -J_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_z - 2b \end{pmatrix}$$

в стандартном вычислительном базисе $|1\rangle = |00\rangle$, $|2\rangle = |01\rangle$, $|3\rangle = |10\rangle$, $|4\rangle = |11\rangle$, где 0 и 1 — соответственно значения проекций $I_z = 1/2$ и $I_z = -1/2$.

В работе [9] показано, что если взять значения констант $J_x = 4J_z$, $b = J_z$, то в результате эволюции системы в течение времени $T = \pi/8J_z$ мы получим оператор $U_{\text{“QFT”}}(T) = \exp(-iHT)$, который затем может быть легко преобразован в вентиль КПФ (10) с помощью действия оператором Адамара W на первый кубит:

$$\mathrm{QFT}_4 = WU_{\text{“QFT”}}(T)W, \quad W = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes E.$$

Этому решению соответствует глобальная фаза $\Phi_m = 3\pi/8$. Найдем эффективные гамильтонианы и длительности для других значений фаз (2) предложенным выше в разд. 2 способом. Сначала приведем матрицы H и $U_{\text{“QFT”}}(T)$ к диагональному виду с помощью преобразования

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (24)$$

После этого, согласно (8), для вычисления параметров эффективного гамильтониана получим систему четырех уравнений

$$\begin{aligned} 2\pi m_1 - \Phi_m &= -(J_z + 2b)T, \\ 2\pi m_2 - \Phi_m &= -(2J_x - J_z)T, \\ \pi + 2\pi m_3 - \Phi_m &= (2J_x + J_z)T, \\ \pi/2 + 2\pi m_4 - \Phi_m &= -(J_z - 2b)T, \end{aligned} \quad (25)$$

где $\Phi_m = \pi(m_1 + m_2 + m_3 + m_4)/2 + 3\pi/8$. Находим решение системы:

$$\begin{aligned} -J_z T &= \pi(m_1 + m_4 - m_2 - m_3)/2 - \pi/8, \\ -J_x T &= \pi(m_2 - m_3)/2 - \pi/4, \\ bT &= \pi(m_4 - m_1)/2 + \pi/8. \end{aligned} \quad (26)$$

Таблица 1. Значения параметров для получения H^m_{eff} для QFT_3

Φ_m	m_1, m_2, m_3	φ	ψ	ξ	δ	t_1	t_2	T
$3\pi/6$	0, 0, 0	0	1.083	0.3206	0.6802	1.08	2.32	3.40
$7\pi/6$	0, 1, 0	$\pi/2$	1.326	−1.431	−1.466	2.41	0.63	3.04
$-\pi/6$	−1, 0, 0	$\pi/2$	−0.6657	0.7901	0.1052	3.44	4.27	7.71

Таблица 2. Значения параметров для получения H^m_{eff} для QFT_3^{-1}

Φ_m	m_1, m_2, m_3	φ	ψ	ξ	δ	t_1	t_2	T
$-3\pi/6$	0, −1, 1	0	−0.6532	3.653	3.036	0.85	4.91	5.76
$-7\pi/6$	0, −1, 0	0	−1.489	1.431	1.466	2.36	1.83	4.19
$\pi/6$	1, 0, 0	$\pi/2$	0.9051	−0.7901	−0.1052	0.83	4.27	5.09

Глобальная фаза Φ_m определена с точностью до 2π и может принимать четыре разных значения при различных значениях $\sum_i m_i$:

$$\Phi_m = \begin{cases} 3\pi/8, & m_1+m_2+m_3+m_4=0, \\ 7\pi/8, & m_1+m_2+m_3+m_4=1, \\ -\pi/8, & m_1+m_2+m_3+m_4=-1, \\ 11\pi/8, & m_1+m_2+m_3+m_4=2. \end{cases} \quad (27)$$

Можно выразить время T через эту фазу:

$$T = \frac{1}{J_z}\left\{\frac{\pi}{2} - \Phi_m + \pi(m_2+m_3)\right\}. \quad (28)$$

При каждом из возможных значений фазы, перебирая числа m, можно найти минимальное время КПФ T и соответствующие значения параметров J_x и b.

Обычно в условиях реального эксперимента константы спин-спинового взаимодействия считаются неизменными (заданы природой). Например, в работе [11] взят изотропный исходный гамильтониан (23) с константами

$$J_x^0 = J_y^0 = J_z^0 = J/4. \quad (29)$$

Опишем процедуру получения из этого гамильтониана эффективного гамильтониана КПФ. Повернем один из спинов РЧ-импульсом на угол 180° вокруг одной из осей x, y или z. Тогда взаимодействие между спиновыми проекциями на эту ось останется неизменным, а между двумя другими проекциями изменит знак. Обозначим эти изменения следующим образом:

$$H_x = (+--), \quad H_y = (-+-), \quad H_z = (--+),$$

где индексы «x», «y» и «z» обозначают ось вращения, а «±» — новые знаки взаимодействий (при исходном взаимодействии $H = H_0 = (+++)$). Эффективный гамильтониан с нужными величинами констант взаимодействия (26) будем получать посредством суммирования четырех гамильтонианов:

$$TH_{eff} = t_0H_0 + t_xH_x + t_yH_y + t_zH_z. \quad (30)$$

Параметры для решения этой задачи с минимальным временем при каждом значении фазы приведены в табл. 6. В табл. 7 приведены параметры для получения обратного преобразования Фурье. Отметим, что одинаковые длительности прямого и обратного КПФ получаются при разных фазах.

В работе [11] методом численной оптимизации найдены минимальные длительности КПФ двух кубитов при разных фазах и значениях J. В частности, при $J = 0.8$ получаем из табл. 6 для минимальной длительности два значения, $3\pi/2J = 5.89$ и $5\pi/2J = 9.82$, которые хорошо согласуются с результатами численного эксперимента [11] для соответствующих фаз $\phi_m = (\Phi_m + 5\pi/8)\mathrm{mod}(2\pi)$. Совпадает и вид зависимости длительности КПФ от J при малых значениях J.

Для экспериментального получения эффективного гамильтониана с приведенными в табл. 6 и 7 параметрами с использованием изложенной в предыдущем разделе процедуры можно сконструировать последовательность РЧ-импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции.

При другом виде исходного спин-спинового взаимодействия нужный эффективный гамильтониан также может быть сконструирован описанным вы-

Таблица 3. Значения параметров для получения $\Pi H_{eff}^m \Pi$ для QFT_3

Φ_m	m_1, m_2, m_3	φ	ψ	ξ	δ	t_1	t_2	T
$3\pi/6$	0, 0, 0	$\pi/2$	$\pi/2$	1.283	0	1.81	0.907	2.72
$7\pi/6$	−1, 0, 0	$\pi/2$	0	3.848	0	5.86	0.421	6.28
$-\pi/6$	1, 0, 0	0	$\pi/2$	−1.283	0	1.81	4.05	5.86

Таблица 4. Значения параметров для получения $\Pi H_{eff}^m \Pi$ для QFT_3^{-1}

Φ_m	m_1, m_2, m_3	φ	ψ	ξ	δ	t_1	t_2	T
$-3\pi/6$	0, 0, 0	0	$\pi/2$	−1.283	0	1.81	0.907	2.72
$-7\pi/6$	0, 1, 0	$\pi/2$	$\pi/2$	1.283	0	1.81	4.05	5.86
$\pi/6$	−1, 0, 0	$\pi/2$	0	1.283	0	4.05	2.23	6.28

Таблица 5. Значения фаз Φ_m при реализации разных вариантов КПФ с помощью оптимизированных РЧ-импульсов

T_{min}	QFT_3	QFT_3^{-1}	$\Pi\mathrm{QFT}_3\Pi$	$\Pi\mathrm{QFT}_3^{-1}\Pi$
1.86	$7\pi/6$	$-7\pi/6$	$3\pi/6$	$-3\pi/6$
3.15	$3\pi/6$	$\pi/6$	$-\pi/6$	$-7\pi/6$
4.51	$-\pi/6$	$-3\pi/6$	$7\pi/6$	$\pi/6$

ше способом с некоторыми изменениями. Например, если в исходном гамильтониане, как в работе [7], отлично от нуля только взаимодействие между z-компонентами спинов, то взаимодействия между x- и y-компонентами можно получить с помощью вращений на угол 90° соответственно вокруг осей y и x.

5. АНАЛИЗ ФАЗЫ

Рассмотренную фазу мы относим к фазам Ааронова–Анандана [25], поскольку происходит неадиабатическая циклическая эволюция. Действительно, применим последовательно к произвольному состоянию $|\Psi\rangle$ сначала прямое КПФ, а затем обратное КПФ (переменные последнего будем обозначать чертой сверху):

$$|\Psi(T+\overline{T})\rangle = \overline{U}(\overline{T})U(T)|\Psi\rangle = \exp\{-i\overline{\Phi}_m\}U_G^{-1}U_G \times \times \exp\{-i\Phi_m\}|\Psi\rangle = \exp\{-i\Delta\Phi\}|\Psi\rangle. \quad (31)$$

В зависимости от выбранных параметров разность фаз будет принимать разные значения $\Delta\Phi = \overline{\Phi}_m + \Phi_m = -2\pi(p+\overline{p})/N$, согласно (2). Следуя работе [25], полученную фазу разобьем на динамическую

$$\beta = \int_0^{\overline{T}} \langle\Psi|\overline{H}(\overline{t})|\Psi\rangle d\overline{t} + \int_0^{T} \langle\Psi|H(t)|\Psi\rangle dt \quad (32)$$

и геометрическую $\gamma = \Delta\Phi - \beta$ части. Для разных состояний $|\Psi\rangle$ и разных гамильтонианов соотношение β и γ будет изменяться.

Изучение фаз оптимизированных импульсов со сложной временной зависимостью управляющего поля в выражениях (14), (15) для $H(t)$ требует отдельного рассмотрения. Сейчас вернемся к случаю постоянных во времени гамильтонианов H_{eff} и $\overline{H}_{eff}$ соответственно для прямого и обратного КПФ. Собственные функции этих гамильтонианов совпадают (по построению) с собственными функциями рассматриваемого вентиля (5). В этом базисе

$$|\Psi\rangle = \sum_{f=1}^{N} c_f|f\rangle, \quad \sum_{f=1}^{N} |c_f|^2 = 1. \quad (33)$$

Уравнение (31) для отдельного состояния базиса, согласно (8) и (9), дает

$$\overline{T}\langle f|\overline{H}_{eff}|f\rangle + T\langle f|H_{eff}|f\rangle = \Delta\Phi - 2\pi(\overline{m}_f + m_f). \quad (34)$$

Просуммировав эти уравнения по f, на основании равенства нулю следов гамильтонианов H_{eff} и $\overline{H}_{eff}$ находим

$$\Delta\Phi = 2\pi \sum_{f=1}^{N} \frac{\overline{m}_f + m_f}{N}. \quad (35)$$

Подставив выражения (33)–(35) в (32), для динамической и геометрической фаз находим

Таблица 6. Значения параметров для получения QFT_4

Φ_m	T	t_0	t_x	t_y	t_z	m_1, m_2, m_3, m_4	bT
$3\pi/8$	$3\pi/2J$	$2T/3$	$T/6$	$T/6$	0	0,0,0,0	$\pi/8$
$11\pi/8$	$3\pi/2J$	0	$T/6$	$T/6$	$2T/3$	$\left\{\begin{array}{l} 1,1,0,0 \\ 0,1,0,1 \end{array}\right.$	$-3\pi/8$ $5\pi/8$
$-\pi/8$	$5\pi/2J$	$5T/8$	0	0	$3T/8$	$\left\{\begin{array}{l} 0,0,0,-1 \\ -1,0,0,0 \end{array}\right.$	$-3\pi/8$ $5\pi/8$
$7\pi/8$	$5\pi/2J$	$3T/8$	0	0	$5T/8$	0,1,0,0	$\pi/8$

Таблица 7. Значения параметров для получения QFT_4^{-1}

Φ_m	T	t_0	t_x	t_y	t_z	m_1, m_2, m_3, m_4	bT
$-3\pi/8$	$5\pi/2J$	0	$3T/10$	$3T/10$	$2T/5$	0,0,0,0	$-\pi/8$
$-11\pi/8$	$5\pi/2J$	$2T/5$	$3T/10$	$3T/10$	0	$\left\{\begin{array}{l} -1,-1,0,0 \\ 0,-1,0,-1 \end{array}\right.$	$3\pi/8$ $-5\pi/8$
$\pi/8$	$3\pi/2J$	$5T/8$	0	0	$3T/8$	0,0,1,0	$-\pi/8$
$-7\pi/8$	$3\pi/2J$	$3T/8$	0	0	$5T/8$	$\left\{\begin{array}{l} -1,0,0,0 \\ 0,0,0,-1 \end{array}\right.$	$3\pi/8$ $-5\pi/8$

$$\beta = -2\pi \sum_{f=1}^{N} (\overline{m}_f + m_f) \left(|c_f|^2 - \frac{1}{N} \right), \qquad \gamma = 2\pi \sum_{f=1}^{N} (\overline{m}_f + m_f) |c_f|^2. \tag{36}$$

При каждом наборе $\overline{m}_f$, m_f, изменяя c_f, мы можем изменять соотношение двух фаз (36), например, избавиться от динамической фазы.

Отметим, что величина фазы (31) может быть измерена экспериментально с помощью вспомогательного спина, например по схеме интерферометра ЯМР из работы [36].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Один и тот же логический оператор (вентиль) может быть представлен математически в виде экспоненты с разными матрицами в показателе, собственные значения которых могут различаться на величины кратные 2π. Каждую такую матрицу можно реализовать на физической системе с помощью соответствующего эффективного гамильтониана. При изменении на 2π собственного значения мы переходим к новому решению с измененным на $2\pi/N$ значением глобальной фазы. У эффективного гамильтониана, во-первых, соответствующий энергетический уровень сдвинется на $-2\pi/T$, во-вторых, произойдет компенсационный сдвиг всех уровней на $2\pi/NT$. В результате таких сдвигов изменится время T реализации вентиля с помощью данного гамильтониана. Правила построения эффективных гамильтонианов и значения времен реализации зависят от выбранной физической системы. Выше мы рассмотрели реализацию вентиля КПФ на кутрите, представленном квадрупольным ядром со спином $I = 1$, а также на системе из двух кубитов ($I = 1/2$). Найдены эффективные гамильтонианы и минимальные времена реализации, соответствующие разным глобальным фазам. Предложены схемы их реализации методом ЯМР с помощью последовательностей РЧ-импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции. Сделанные выводы подтверждены согласием аналитических результатов для минимальных времен вентилей с результатами, найденными методами численной оптимизации.

Таким образом, мы объяснили механизм влияния фазового множителя на минимальное время реализации вентиля. Полученные при этом общие соотношения для изменения фазового множителя при изменении эффективного гамильтониана вентиля будут полезны как для систем из кубитов, так и для систем из кудитов. Рассмотренные фазовые множители следует контролировать при построении сложных квантовых схем. В противном случае они могут испортить интерференционную картину, необходимую для реализации квантового алгоритма [12]. Конкретные результаты, полученные для КПФ, имеют важное практическое значение при реализации квантовых алгоритмов на ядрах со спином $I = 1$ со слабым квадрупольным взаимодействием в жидкокристаллической матрице [33], а также на гетероядерных системах из двух спинов с $I = 1/2$. Кроме того, они могут найти применение в других многоуровневых физических системах, например, для КПФ на атомах, управляемых лазерными импульсами, рассмотренных в работах [4, 30, 37].

ЛИТЕРАТУРА

1. К. А. Валиев, А. А. Кокин, *Квантовые компьютеры: надежды и реальность*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевск (2001).
2. М. Нильсен, И. Чанг, *Квантовые вычисления и квантовая информация*, Мир, Москва (2006).
3. D. Gottesman, Lecture Notes in Comp. Sci. **1509**, 302 (1999).
4. A. Muthukrishnan and C. R. Stroud (Jr.), J. Mod. Opt. **49**, 2115 (2002).
5. В. Е. Зобов, А. С. Ермилов, ЖЭТФ **141**, 1060 (2012).
6. A. Blais, Phys. Rev. A **64**, 022312 (2001).
7. T. Schulte-Herbrüggen, A. Spörl, N. Khaneja, and S. J. Glaser, Phys. Rev. A **72**, 042331 (2005).
8. N. Khaneja, B. Heitmann, A. Spörl et al., Phys. Rev. A **75**, 012322 (2007).
9. A. Carlini, A. Hosoya, T. Koike, and Y. Okudaira, Phys. Rev. A **75**, 042308 (2007).
10. A. Carlini and T. Koike, Phys. Rev. A **86**, 054302 (2012).
11. K. W. Moore Tibbetts, C. Brif, M. Grace et al., Phys. Rev. A **86**, 062309 (2012).
12. J. A. Jones, Progr. NMR Specrosc. **59**, 91 (2011) (arXiv:quant-ph/1011.1382).
13. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, Письма в ЖЭТФ **86**, 260 (2007).
14. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, ЖЭТФ **135**, 10 (2009).
15. N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet et al., J. Magn. Res. **172**, 296 (2005).
16. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, ЖЭТФ **140**, 211 (2011).
17. Y. Maday and G. Turinici, J. Chem. Phys. **118**, 8191 (2003).
18. I. I. Maximov, Z. Tosner, and N. C. Nielsen, J. Chem. Phys. **128**, 184505 (2008).
19. R. Eitan, M. Mundt, and D. J. Tannor, Phys. Rev. A **83**, 053426 (2011).
20. V. P. Shauro and V. E. Zobov, Proc. SPIE **8700**, 87001G (2013) (arXiv:quant-ph/1211.4928).
21. С. И. Виницкий, В. Л. Дербов, В. М. Дубовик и др., УФН **160**(6), 1 (1990).
22. В. И. Боднарчук, Л. С. Давтян, Д. А. Корнеев, УФН **166**(2), 185 (1996).
23. A. E. Shalyt-Margolin, V. I. Strazhev, and A. Ya. Tregubovich, in *Computer Science and Quantum Computing*, Nova Sci. Publ. (2007), p. 125 (arXiv: quant-ph/0707.0044).
24. M. V. Berry, Proc. Roy. Soc. London A **392**, 45 (1984).
25. Y. Aharonov and J. Anandan, Phys. Rev. Lett. **58**, 1593 (1987).
26. X. D. Zhang, S. L. Zhu, L. Hu, and Z. D. Wang, Phys. Rev. A **71**, 014302 (2005).
27. Z. S. Wang, G. Q. Liu, and Y. H. Ji, Phys. Rev. A **79**, 054301 (2009).
28. T. Ichikawa, M. Bando, Y. Kondo, and M. Nakahara, Phil. Trans. Roy. Soc. London A **370**, 4671 (2012) (arXiv:quant-ph/1204.2437).
29. L.-A. Wu, C. A. Bishop, and M. S. Byrd, Phys. Rev. A **84**, 022341 (2011).
30. A. B. Klimov, R. Guzman, J. C. Retamal, and C. Saavedra, Phys. Rev. A **67**, 062313 (2003).
31. А. С. Ермилов, В. Е. Зобов, Опт. и спектр. **103**, 994 (2007).
32. Ч. Сликтер, *Основы теории магнитного резонанса*, Мир, Москва (1981).
33. R. Das, A. Mitra, V. Kumar, and A. Kumar, Int. J. Quant. Inf. **1**, 387 (2003).
34. N. Hatano and M. Suzuki, in *Quantum Annealing and Other Optimization Methods*, ed. by A. Das and B. K. Chakrabarti, Springer, Berlin (2005), p. 37 (arXiv:math-ph/0506007).
35. K. V. R. M. Murali, N. Sinha, T. S. Mahesh et al., Phys. Rev. A **64**, 022313 (2002).
36. X. Peng, S. Wu, J. Li et al., Phys. Rev. Lett. **105**, 240405 (2010).
37. K. Hosaka, H. Shimada, H. Chiba et al., Phys. Rev. Lett. **104**, 180501 (2010).