

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ» (НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ, НГУ)

Факультет **ФИЗИЧЕСКИЙ**

Кафедра квантовой электроники

Направление подготовки **03.04.02 ФИЗИКА**

Образовательная программа: **МАГИСТРАТУРА**

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

Ашкарина Ивана Николаевича

Тема работы: Алгоритмы квантовой симуляции физических систем на основе ридберговских атомов

«К защите допущена»

Заведующий кафедрой

Багаев Сергей Николаевич

академик РАН

научный руководитель

Институт лазерной физики СО РАН

...../
(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

«.....».....2020 г.

Научный руководитель

Бетеров Илья Игоревич

к. ф.-м. н.

с. н. с. лаб. № 32

Институт физики

полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

...../
(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

«.....».....2020 г.

Дата защиты: «.....».....2020 г.

Новосибирск, 2020

Оглавление

1.	Введение.....	4
2.	Основы квантовой информатики.....	7
2.1.	Квантовые биты и квантовые гейты	7
3.	Квантовые симуляторы.....	13
3.1.	История квантовых симуляций	13
3.2.	Принципы квантовой симуляции	15
3.3.	Виды квантовых симуляторов	18
3.3.1.	Цифровые квантовые симуляторы.....	19
3.3.2.	Аналоговые квантовые симуляторы.....	23
3.4.	PEA-алгоритмы квантовой симуляции.....	25
3.5.	Адиабатические квантовые вычисления	30
4.	Ридберговские атомы в квантовых вычислениях	34
4.1.	Ридберговские атомы	34
4.2.	Осцилляции Раби	36
4.3.	Резонансы Фёрстера	38
4.4.	Трёхчастичные резонансы Фёрстера	41
5.	Алгоритм симуляции A-R-IPEA	44
5.1.	Постановка задачи	44
5.2.	Теоретическое описание алгоритма A-R-IPEA.....	45
5.2.1.	Приготовление начального состояния	46
5.2.2.	Эволюция квантового состояния.	48
5.2.3.	Оценка ошибки в A-R-IPEA.	51
5.3.	Реализация квантовых операций.....	52

5.4.	Моделирование молекулы водорода.....	55
6.	Резонансы Фёрстера в квантовых симуляциях	61
6.1.	Трёхчастичные резонансные схемы.....	62
6.2.	Резонансы Фёрстера нового типа.....	64
6.3.	Численное моделирование резонансов.....	65
6.4.	Результаты моделирования резонансов.....	69
6.5.	Обсуждение полученных результатов.....	78
7.	Заключение	81
8.	Благодарности.....	83
9.	Список литературы	84

1. Введение

Вопрос реализации моделирования сложных квантовых систем вызывает неугасающий интерес в мировом научном сообществе в течение последних тридцати лет. В первую очередь, этот интерес обусловлен необходимостью подобного моделирования для решения ряда практических задач во многих областях исследований, таких, как квантовая химия, физика твёрдого тела или физика элементарных частиц. Также, разумеется, нельзя не учитывать важность этого вопроса с точки зрения философии науки. Поскольку весь окружающий нас мир основан на принципах квантовой теории, очевидно, что для улучшения понимания любого его аспекта в конечном итоге необходимо умение описывать этот аспект на языке квантовой механики, переходя при этом от объектов микромира к макроскопической реальности.

Основная проблема при моделировании квантовых систем на классических компьютерах заключается в экспоненциальном росте необходимых вычислительных ресурсов и объёмов требуемой памяти относительно размера исследуемой системы. Решением данной проблемы явилась концепция квантовых симуляторов, сформулированная Ричардом Фейнманом в 1982 году. Описанный Фейнманом подход основан на идее использования контролируемых квантовых систем для симуляции поведения систем с ограниченным внешним контролем. Эффективность этого метода была окончательно подтверждена в 1996 году, когда Сетом Лойдом было показано, что любая квантовая вычислительная система может быть использована в качестве эффективного квантового симулятора.

Одним из возможных подходов к практической реализации квантовых симуляторов является использование в качестве кубитов нейтральных атомов в массивах оптических дипольных ловушек. Основанные на таких атомах “ридберговские симуляторы” широко исследуются в течение последних лет в

связи с наличием возможности масштабирования атомных регистров с сохранением индивидуальной адресации к конкретным кубитам [1], а также высокой точностью квантовых операций в таких регистрах [2]. В частности, были экспериментально продемонстрированы симуляции спиновых взаимодействий в модели Изинга [3], а также предложен алгоритм аналогового квантового моделирования универсальных особенностей петли Полякова [4]. Однако, не смотря на описанные успехи, в настоящий момент область применения подобных симуляторов к задачам квантового моделирования сложных молекулярных систем всё ещё остаётся малоисследованной.

Целью данной работы является разработка универсального алгоритма квантовой симуляции сложных молекулярных систем, а также схемы реализации этого алгоритма с использованием квантовых регистров на основе ультрахолодных атомов рубидия в массивах оптических дипольных ловушек.

В ходе выполнения работы нами был предложен универсальный цифровой алгоритм квантовой симуляции A-R-IPEA (Adiabatic reversed iterative phase estimation algorithm), основанный на ранее известной схеме КРЕА (Kitaev's phase estimation algorithm) и адиабатическом приготовлении состояний. Принципиальной особенностью разработанного алгоритма является то, что его теоретическая точность не имеет ограничений и определяется только числом итераций. Для демонстрации возможностей алгоритма была построена и промоделирована схема его реализации для симуляции молекулы водорода, с использованием двух ультрахолодных атомов рубидия, захваченных в пространственно разнесенные оптические дипольные ловушки. Моделирование проведено с использованием двухкубитных вентилях на основе эффекта дипольной блокады при кратковременном возбуждении атомов в ридберговские состояния с учетом конечных времен жизни этих состояний и конечных энергий взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Численно рассчитаны зависимости точности измерения

энергии основного состояния молекулы от числа итераций алгоритма и точности инициализации квантового регистра от параметра разбиения.

При анализе схемы реализации алгоритма в квантовых регистрах с числом кубитов $n > 2$ было предложено использование квантовых вентилях, основанных на трёхчастичных резонансах Фёрстера. Также была предложена новая схема трёхчастичных резонансов Фёрстера в ансамблях атомов рубидия вида $3 \times nP_{3/2} \rightarrow nS_{1/2} + (n+1)S_{1/2} + nP_{1/2}$. В ходе исследования данной схемы была построена модель взаимодействия атомов с электрическим полем. Были определены поляризуемости атомных уровней вблизи положений многочастичных резонансов. Трёхчастичные резонансы были численно смоделированы в рамках построенной физической модели с учётом приближений. В результате исследования фазовой динамики и осцилляций населённостей было показано, что резонансы данного типа хорошо подходят для реализации многокубитных квантовых операций.

2. Основы квантовой информатики

Квантовые симуляторы являются квантовыми вычислительными устройствами, призванными решать задачу моделирования сложных физических систем. Для понимания принципов их работы необходимо сначала ознакомиться с центральными понятиями области квантовых вычислений. В этой главе будут описаны основы квантовой информатики.

2.1. Квантовые биты и квантовые гейты

Чтобы понять принципы работы квантовых устройств, необходимо в первую очередь рассмотреть различия в подходах к описанию информации в квантовом и классическом случаях, а также провести аналогии между ними.

Как известно, для того чтобы информация могла храниться в памяти классического вычислительного устройства, она должна быть соответствующим образом дискретизована. Единицей измерения информации в классическом случае является бит, который может быть описан, как элементарная триггерная система, принимающая одно из возможных двоичных значений 0 или 1. Биты также могут подвергаться преобразованиям посредством применения к ним классических логических операций. Отметим, что состояние бита в каждый момент времени строго детерминировано.

Очевидно, что концепция бинарной единицы хранения информации не подходит для описания состояния квантовых систем. В связи с этим, в теории квантовых вычислений в соответствии с классическими битами ставятся так называемые кубиты (квантовые биты). Для понимания основных отличий между ними полезно обратиться к физическому описанию. Современные компьютеры основаны на применении транзисторов, которые, имея сравнительно малые размеры, всё же подчиняются законам макромира. Следовательно, можно утверждать, что биты являются классическими

объектами. Кубиты же, в свою очередь, являются квантовыми объектами, а значит, для описания их состояния требуется использовать формализм волновых функций. Таким образом, основное отличие между понятиями бита и кубита состоит в том, что последние не являются детерминированными и могут находиться в суперпозиции своих логических состояний. На рисунке 1 схематически изображены классический (а) и квантовый (б) биты.

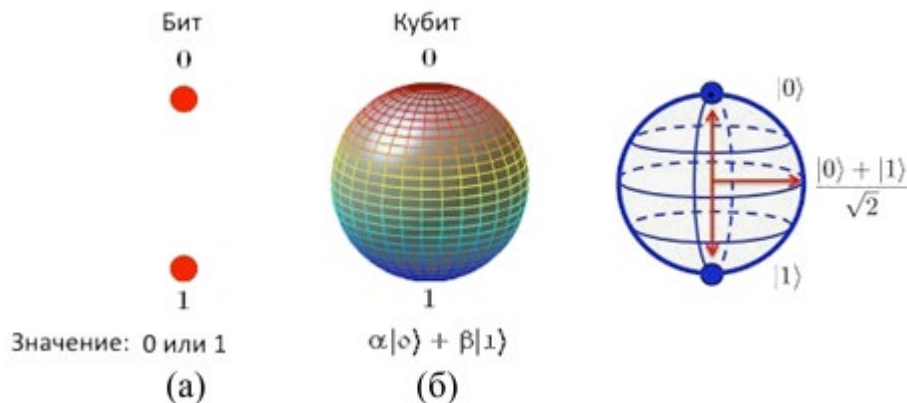


Рис. 1. (а) Схематическое представление классического бита; (б) Кубит в виде вектора в базисе Блоха

Обращаясь к полученному нами описанию квантовой единицы измерения количества информации, полезно задуматься о том, какие преимущества мы могли бы получить за счёт его применения. Поскольку кубит, как уже было сказано выше, может находиться в суперпозиции своих базисных состояний, мы можем прийти к выводу, что количество данных, которое он способен хранить, не имеет никаких физических ограничений. В самом деле, при наличии квантового объекта, содержащего в каждый момент времени полную информацию о комплексных амплитудах своего состояния, мы могли бы кодировать в бинарном разложении этих амплитуд любое, сколь угодно длинное число. Оказывается, однако, что, хотя теоретически подобная возможность полностью обоснована, она не несёт в себе никакой практической пользы, поскольку доступ к содержащимся в кубите данным может быть осуществлён только посредством его измерения. Как известно, при измерении любая квантовая система мгновенно коллапсирует в одно из

своих собственных состояний. Это значит, что извлечение информации потребовало бы в данном случае наличия бесконечного числа полностью идентичных кубитов [5, стр. 13-16].

Помимо различий в описании информации в классическом и квантовом случаях, необходимо также обсудить вопросы преобразования и обработки квантовых данных. Как известно, в основе классических вычислений лежит концепция логических операций, воздействующих на отдельные биты или битовые последовательности. Наиболее фундаментальными среди этих операций являются AND, NAND, OR, XOR. Квантовые биты, в свою очередь преобразуются под действием квантовых логических операций, которые мы в дальнейшем будем также называть квантовыми гейтами или вентилями.

Для того, чтобы проиллюстрировать отличие квантовых логических схем от классических, представим состояние кубита в виде вектора на сфере Блоха, поставив в соответствие логическим состояниям классического бита 0 и 1 квантовые состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$. С точки зрения квантовой механики, такое состояние описывается как (1):

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (1)$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (2)$$

Здесь коэффициенты α и β представляют собой комплексные амплитуды для соответствующих состояний кубита, а значит, для них должно выполняться условие (2). Данное требование, представляющее собой условие нормировки волновых функций, накладывает ограничение унитарности на весь класс квантовых логических операций. Однако, поскольку никаких других условий, регулирующих особенности операторов этого класса, нет, мы можем утверждать, что *любое квантовое логическое преобразование обязано быть унитарным, а любое унитарное преобразование может трактоваться в терминах квантовой логики*. Таким образом, оказывается, что класс возможных с теоретической точки зрения квантовых преобразований

равномощен классу унитарных преобразований. В таблице 1 представлен краткий список фундаментальных однокубитных и двухкубитных квантовых гейтов. Отметим, что операции над несколькими кубитами действуют в соответствии с описанными выше принципами [5, стр. 16-22].

Квантовые вентили			
Однокубитные		Двухкубитные	
Название вентилля	Вид преобразования	Название вентилля	Вид преобразования
X-вентиль Паули (NOT)	$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	Контролируемое отрицание (CNOT)	$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
Y-вентиль Паули	$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$		
Z-вентиль Паули	$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	Контролируемый фазовый сдвиг (CZ)	$CZ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
Вентиль Адамара	$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$		

Табл. 1. Матричные представления однокубитных и двухкубитных вентилей

В классических вычислениях для получения эффективных преобразований множества битов чаще всего используются схемы, содержащие большое количество логических операций. Такой же подход верен и в квантовом случае. Квантовые логические схемы основаны на параллельном или последовательном применении ряда квантовых гейтов к регистру кубитов. Однако кажущаяся аналогичность квантового и классического подходов к данному вопросу не должна обнадёживать. Необходимо подчеркнуть, что при разработке квантовых схем исследователи сталкиваются с проблемами, отсутствующими в классической теории вычислений.

Наиболее распространённые из возникающих затруднений связаны с тем фактом, что любая квантовая операция, в виду своей унитарности, обязана быть обратимой. В то же время, в классическом случае мы часто имеем дело с

примерами необратимых операций (например, важнейшая операция FANIN). Таким образом, проведение аналогий между квантовыми и классическими вычислениями существенно усложняется [5, стр. 22-25].

Ещё одной существенной проблемой является принципиальная невозможность копирования квантового состояния. Теорема о запрете копирования была сформулирована Вуттерсом, Зуреком и Диксом в 1982 году, на заре квантовых вычислений. Очевидно, что, поскольку многие классические операции (например, FANOUT) основаны на копировании битов, данная теорема предсказывает невозможность их реализации в квантовом случае.

Решение описанных выше проблем состоит в применении для квантовых вычислений наборов так называемых универсальных квантовых вентилях. Утверждается, что при помощи универсальных вентилях можно осуществить любые преобразования информации, возможные в классическом случае. Доказательство данного утверждение подробно изложено в [5].

Простейший из известных универсальных наборов состоит из совокупности вентилях X, Y, Z, I и CNOT. Однако для решения практически важных задач в регистрах, состоящих из большого числа кубитов, понадобилось бы применить слишком большое число операций из этого набора. В связи с этим, для уменьшения сложности квантовых схем часто применяют многокубитные вентиля, простейшим из которых является вентиль Тоффоли, состоящий из трёх кубитов. На рисунке 2 вы можете видеть схему этого вентиля, а также осуществляемое им преобразование.

Квантовый элемент Тоффоли является универсальным обратимым квантовым гейтом, реализующим операцию отрицания с двойным контролем. Так, если оба контролируемых кубита находятся в состоянии $|1\rangle$, к контролируемому кубиту будет применена операция отрицания, в результате чего произойдёт изменение его состояния по схеме $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$. С математической точки зрения, действие вентиля на набор кубитов A , B и C производится

следующим образом: $\{A, B, C\} \rightarrow \{A, B, C \oplus (A \& B)\}$, где знак \oplus обозначает сложение по модулю 2.

Поскольку вентиль Тоффоли является универсальным, его применение делает возможной квантовую реализацию всех классов классических логических операций, включая NAND и FANIN/FANOUT. Этот пример подчеркивает эффективность использования многокубитных вентилей для решения проблем квантовых вычислений [5, стр. 28-32].

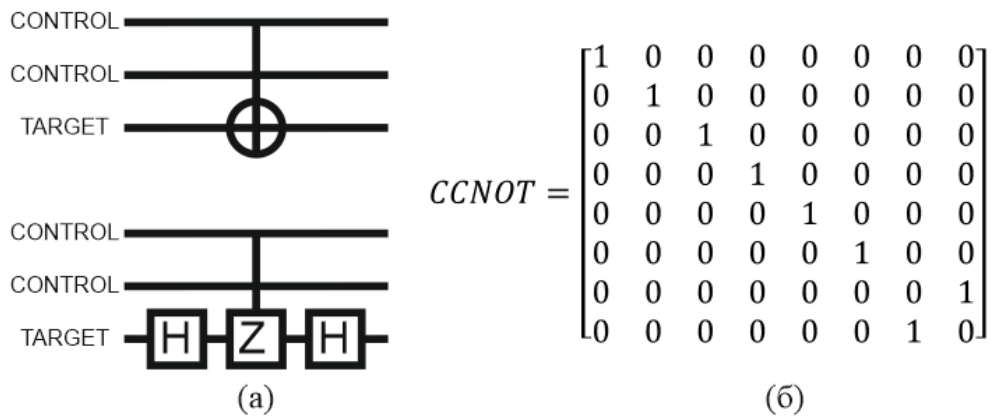


Рис. 2. (а) Схема устройства вентиля Тоффоли; (б) Преобразование, производимое вентилем Тоффоли

3. Квантовые симуляторы

В этой главе мы подробно изучим вопрос реализации квантовых симуляций, включая его исторический, теоретический и экспериментальный аспекты. Также здесь будут приведены краткие сведения касательно основ математического аппарата, знание которого необходимо для понимания устройства квантовых симуляторов.

3.1. История квантовых симуляций

В начале 1980х годов мировое научное сообщество пришло к осознанию того, что задача моделирования сложных квантовых систем является одним из самых ярких и нетривиальных научных вызовов двадцатого века. Первой из множества очевидных трудностей, связанных с решением этой задачи, становится большой объём компьютерной памяти, необходимый для хранения квантового состояния системы. Любое квантовое состояние описывается набором параметров, число которых экспоненциально растёт при увеличении размера исследуемой системы (этот размер определяется как число частиц или степеней свободы в системе). В то же время, число операций, необходимых для описания временной эволюции системы, тоже увеличивается в экспоненциальной пропорции. Это явление возрастания сложности, названное *экспоненциальным взрывом*, в некоторых случаях может быть скомпенсировано с помощью методов аппроксимации (например, метода Монте-Карло). Тем не менее, подобные методы имеют свои ограничения и применимы лишь в очень ограниченном числе прикладных задач. Таким образом, квантовое моделирование остается сложной задачей даже для современных суперкомпьютеров.

Решение проблемы экспоненциального взрыва было предложено Ричардом Фейнманом в 1982 году. Суть этого решения заключена в

предложении использовать для симуляции новый вид вычислительного устройства – квантовый компьютер. Согласно предположению Фейнмана, вычислительная машина, основанная на принципах квантовой механики, должна иметь возможность оперировать с экспоненциально большими объёмами информации, затрачивая на это лишь полиномиальный объём физических ресурсов, что, разумеется, делает её естественным инструментом для выполнения квантового моделирования. На самом деле, как стало ясно за последующие десятилетия, предложенный Фейнманом квантовый компьютер имеет множество применений помимо квантовой симуляции, и сегодня квантовые вычисления и квантовая теория информации – это активно развивающиеся научные направления [6].

Также, не умаляя важность идеи Фейнмана, нельзя не отметить, что в своём определении квантового вычислителя он не указывал ни предполагаемый принцип его работы, ни возможных алгоритмов реализации квантовой симуляции, что видно из следующей цитаты:

*“Let the computer itself be built of quantum mechanical elements which obey quantum mechanical laws.”
(Feynman, 1982).*

Следующей существенной вехой в истории квантовой симуляции следует считать 1996 год, когда Ллойдом было показано, что любой квантовый компьютер может также использоваться как универсальный квантовый симулятор [7]. В данном контексте мы определяем квантовый компьютер как ансамбль взаимодействующих кубитов (каждый из которых может быть инициализирован и измерен), в котором возможна реализация квантовых логических операций с использованием унитарных гейтов. Под универсальностью здесь понимается пригодность устройства для решения широкого класса задач. Отметим также, что помимо универсальных квантовых симуляторов существуют также и более простые устройства, способные эмулировать эволюцию квантовой системы в аналоговой манере.

Со временем интерес к осуществлению квантовых симуляций стремительно нарастет. В первую очередь, это связано с тем, что данная технология имеет множество практических применений в различных областях исследований, таких как квантовая химия, физика твёрдого тела, физика высоких энергий и биология, а также в IT-индустрии. Немаловажным является и тот факт, что технологии, необходимые для осуществления когерентного контроля в квантовых системах, уже достаточно развиты для создания практически полезных квантовых симуляторов [8, 9]. На самом деле, за последние десять лет при помощи квантовых симуляций уже были исследованы многие вопросы из разных областей науки. В качестве примеров можно привести квантовую симуляцию модели Ферми-Хаббарда [10], а также исследование отношения AdS/CFT [11].

3.2. Принципы квантовой симуляции

Как и любая физическая задача, квантовое моделирование требует в первую очередь строгой математической формулировки. В этом параграфе мы дадим общее математическое описание задачи квантовой симуляции и приведём определение квантового симулятора. Также рассмотрены основные вопросы соотношения между квантовым симулятором и моделируемой физической системой.

В первую очередь, необходимо сформулировать математическую постановку описанной нами ранее проблемы квантовой симуляции. Для этого рассмотрим наиболее общую задачу квантового моделирования, а именно, задачу о нахождении состояния исследуемой физической системы $|\varphi\rangle$ в момент времени t , и вычислении значения интересующей нас физической величины из вида этого состояния. В качестве упрощения, мы будем рассматривать системы, гамильтонианы которых не зависят от времени. Тогда решение уравнения Шрёдингера (3) можно получить в виде (4):

$$i\hbar \frac{\partial |\varphi\rangle}{\partial t} = \widehat{H} |\varphi\rangle \quad (3)$$

$$|\varphi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}t\right) |\varphi(0)\rangle \quad (4)$$

Для осуществления численного расчета $|\varphi(t)\rangle$, необходимо дискретизировать рассматриваемую задачу таким образом, чтобы волновая функция могла быть записана в память компьютера. Как уже обсуждалось в предыдущем параграфе, объём памяти, необходимый для записи квантового состояния системы, находится в экспоненциальной зависимости от её размера, так же, как и число операций, необходимых для описания эволюции системы. Например, для описания состояния системы из N частиц, обладающих спином $1/2$, необходимо хранить в RAM 2^N чисел, представляющих комплексные амплитуды для различных спиновых конфигураций. В то же время, симуляция квантовой эволюции состояния потребует расчёта функции $\exp(M)$, где M - матрица $2^N \times 2^N$ [6].

Рассмотрим случай $N = 40$, который часто используется в литературе по квантовым вычислениям в качестве наглядного примера [12, 13]. Для записи состояния $|\varphi\rangle$ в классический регистр нам потребуется $2^{40} \sim 10^{12}$ чисел, что, в случае использования стандарта единичной точности, соответствует 3.2×10^{13} бит, или почти 4 Тб. Для сравнения, все данные, содержащиеся в Библиотеке Конгресса США, соответствуют 160 Тб компьютерной памяти. Удвоив же число частиц в рассматриваемой системе, мы получим уже $\sim 3.8 \times 10^{25}$ бит, или 5×10^{12} ТБ, что в 10^4 раз превосходит весь объём информации, накопленной человечеством к 2007 году [14]!

Метод квантового моделирования, предложенный Фейнманом для решения описанной проблемы, может быть в наиболее общем виде определен как “моделирование квантовой системы с помощью квантово-механических средств”. Под квантовым симулятором мы будем понимать контролируруемую

квантовую систему, использующуюся для симуляции или эмуляции другой квантовой системы [15].

Сформулируем теперь задачу квантовой симуляции в контексте данного выше определения. Состояние моделируемой квантовой системы мы будем обозначать как $|\varphi\rangle$. Исследуемая система эволюционирует от состояния $|\varphi(0)\rangle$ к состоянию $|\varphi(t)\rangle$ под действием оператора (5), где \hat{H}_{sys} – гамильтониан системы. Квантовый симулятор, в свою очередь, представляет из себя контролируруемую квантовую систему, которая в начальный момент времени может быть инициализирована в состоянии $|\psi(0)\rangle$. Контролируемая эволюция в симуляторе осуществляется под действием оператора вида (6) (\hat{H}_{sim} – гамильтониан симулятора), а его конечное состояние $|\psi(t)\rangle$ может быть измерено.

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{sys}t\right) \quad (5)$$

$$\hat{U}' = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{sim}t\right) \quad (6)$$

Условием возможности осуществления симуляции мы будем считать наличие отображения между пространствами волновых функций симулятора и исследуемой квантовой системы. Описанная здесь идея квантовой симуляции схематически представлен на рисунке 3. Подчеркнём также, что в описанном нами контексте мы будем считать задачу квантовой симуляции решенной только в том случае, если построенный на основе приведенных выше рассуждений алгоритм квантовой симуляции будет требовать для своего осуществления количества вычислительных ресурсов, полиномиально зависящего от размера исследуемой системы. Это значит, что в случае любой экспериментальной реализации мы должны быть уверены, что приготовление начального состояния регистра, его эволюция и считывание конечного состояния будут обходиться нам “достаточно дешево”.

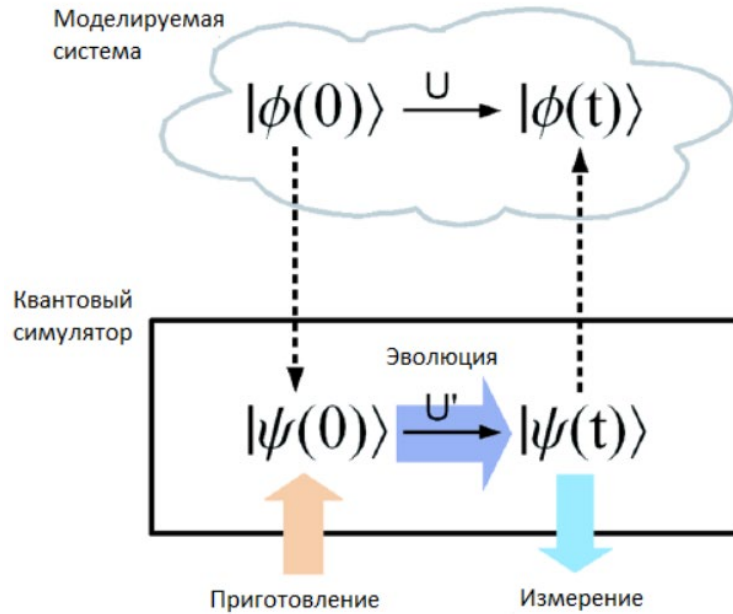


Рис. 3. Схема отношения квантового симулятора и моделируемой физической системы.

Квантовое состояние системы $|\phi(0)\rangle$ эволюционирует до $|\phi(t)\rangle$ состояния под действием оператора \hat{U} . Квантовый симулятор эволюционирует из состояния $|\psi(0)\rangle$ в состояние $|\psi(t)\rangle$ под действием \hat{U}' . Между волновыми функциями исследуемой системы и симулятора существует соответствие в каждый момент времени, отмеченное пунктирными стрелками. Цветные стрелки на рисунке изображают контролируемые операции. Чёрными стрелками отмечены процессы эволюции системы и симулятора.

3.3. Виды квантовых симуляторов

Данное в предыдущем параграфе определение квантовой симуляции, как можно заметить, было достаточно общим. Руководствуясь им, было бы сложно перейти от теории квантовых симуляций в целом к частностям, и, тем более, к реальным экспериментам. Для улучшения понимания, в этом параграфе мы сконцентрируемся на более узких категориях, выделив подходы к квантовой симуляции и разграничив их.

Отталкиваясь от предыдущего определения, можно разделить всё множество квантовых симуляторов на три следующих класса:

- Цифровые квантовые симуляторы (DQS)
- Аналоговые квантовые симуляторы (AQS)
- Классические алгоритмы, построенные на основе идей, почерпнутых из квантовой механики (QIA)

В рамках данной работы будут подробно рассмотрены только цифровые и аналоговые квантовые симуляторы. Область алгоритмов QIA в настоящий момент является слабоизученной и не относится к предмету нашего исследования. Однако, в виду того, что алгоритмы этого класса за последние 10 лет были применены для улучшения и оптимизации многих систем классической симуляции, они, разумеется, заслуживают отдельного упоминания.

3.3.1. Цифровые квантовые симуляторы

Рассмотрим широко известную модель квантовой симуляции, представленную в работе [5, стр. 221-223]. Волновая функция исследуемой системы $|\varphi\rangle$ должна быть закодирована в виде суперпозиции состояний вычислительного базиса (здесь можно провести аналогию с кодировкой числа последовательностью битов в случае классических вычислений). В качестве простого примера такого разложения можно рассмотреть состояние системы частиц со спином $1/2$. Каждой частице будет поставлен в соответствие один из кубитов в квантовом симуляторе: состояние частицы со спином вверх $|\uparrow\rangle$ будем кодировать $|1\rangle$, состояние со спином вниз $|\downarrow\rangle = |0\rangle$. Так, состоянию системы $|\varphi\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ будет соответствовать состояние симулятора $|\psi\rangle = |110\rangle$ [6].

Для того, чтобы получить состояние $|\psi(t)\rangle$ вида (7), необходимо воздействовать оператором \hat{U} (8) на начальное состояние регистра $|\psi(0)\rangle$. В

общем случае, сложная квантовая операция \hat{U} может быть представлена в виде последовательности однокубитных и двухкубитных вентилях в следствие своей унитарности (мы ещё вернёмся к вопросу о декомпозиции \hat{U} в дальнейшем). Такой подход к квантовой симуляции, основанный на применении квантовых схем для воспроизведения эволюции исследуемой системы, получил название DQS (Digital quantum simulation).

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle \quad (7)$$

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \quad (8)$$

Поскольку любой унитарный оператор может быть описан в терминах универсальных квантовых гейтов, легко понять, что DQS является универсальным подходом к квантовой симуляции. Это означает, что, теоретически, любая квантовая система может быть смоделирована с использованием данного подхода. Стоит, однако, отметить, что только системы, имеющие гамильтонианы конечной размерности могут быть смоделированы эффективно. Также до сих пор остаётся актуальной проблема поиска эффективной декомпозиции произвольных гамильтонианов [16].

Для полного понимания процесса цифровой квантовой симуляции необходимо сформировать представление о каждом его шаге в отдельности. Ниже мы кратко опишем этапы приготовления состояния, контролируемой эволюции, а также измерение квантового состояния, и приведём к каждому из описанных шагов поясняющие примеры.

Приготовление квантового состояния

Первым шагом в процессе квантовой симуляции является инициализация квантового регистра в начальное состояние $|\psi(0)\rangle$. Во многих случаях, процесс инициализации сложен или неэффективен. К счастью, существует также множество практически важных задач, для которых определены алгоритмы приготовления начального состояния. Например,

метод генерации многочастичного фермионного состояния вида (9), где $|vac\rangle$ – состояние вакуума, а \hat{b}_j^\dagger и \hat{b}_j – фермионные операторы рождения и уничтожения, был подробно рассмотрен в работе [17].

$$|\psi(0)\rangle = \prod_{j=1}^N \hat{b}_j^\dagger |vac\rangle \quad (9)$$

Также был предложен эффективный метод приготовления чистого состояния молекулярной системы с фиксированным числом электронов m , занимающих заданное число спин-орбиталей n [18].

Унитарная эволюция

Обсудим теперь процесс контролируемой унитарной эволюции. Как было сказано выше, эволюция симулятора может быть описана оператором \hat{U} . Рассмотрим, как получить этот оператор.

Для упрощения описания, примем, что гамильтониан рассматриваемой системы может быть представлен в виде разложения (10), где каждый из членов \hat{H}_l описывает локальное взаимодействие. Примеры гамильтонианов такой формы встречаются, в частности, при рассмотрении моделей Изинга и Хаббарда.

$$\hat{H} = \sum_{l=1}^M \hat{H}_l \quad (10)$$

$$[\hat{H}_l, \hat{H}_{l'}] = 0 \quad (11)$$

В случае, если все члены разложения (10) коммутируют между собой, (то есть, условие (11) верно для всех l и l'), оператор \hat{U} может быть записан в виде (12).

$$\hat{U} = \prod_{l=1}^M \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_l t\right) \quad (12)$$

Тогда представление \hat{U} в виде последовательности локальных гейтов не представляет сложности. К сожалению, во многих практически важных задачах условие коммутации (11) не выполняется. Таким образом, в общем

случае задача о декомпозиции \widehat{U} не может быть решена эффективно с использованием классических методов. В данном контексте, значимым шагом становится разбиение эволюции на последовательность малых временных приращений длительности Δt (13).

$$\widehat{U} = \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} \Delta t\right) \right\}^{\frac{t}{\Delta t}} \quad (13)$$

Существует несколько вариантов аппроксимации оператора последовательностью локальных гейтов с использованием такого разбиения. Например, в первом порядке формулы Троттера, получим [19]:

$$\widehat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{l=1}^M \widehat{H}_l \Delta t\right) = \prod_{l=1}^M \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_l \Delta t\right) + \Theta((\Delta t)^2) \quad (14)$$

Тогда, при $\Delta t \rightarrow 0$:

$$\widehat{U} \approx \prod_{l=1}^M \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_l \Delta t\right) \quad (15)$$

Основной недостаток данного подхода состоит в том, что повышение точности разложения возможно только при использовании большого числа квантовых гейтов (чем меньше Δt , тем, очевидно, точнее разложение). В свою очередь, повышение числа квантовых операций при неидеальности их выполнения приводит к уменьшению точности квантовой схемы в целом.

Измерение состояния

После получения $|\psi(t)\rangle = \widehat{U}|\psi(0)\rangle$, необходимо измерить конечное состояние системы для получения интересующей нас информации. Для этого, в частности, может быть применен метод томографии квантового состояния (QST) [20]. Однако данный метод в общем случае требует использования экспоненциального количества ресурсов, что делает его малоэффективным для больших систем. Чтобы избежать описанной проблемы, часто применяются прямые измерения физических характеристик, таких как корреляционные функции или спектры операторов. Процесс прямого измерения детально обсуждается в работах [19, 21].

3.3.2. Аналоговые квантовые симуляторы

Другой подход к квантовому моделированию сложных физических систем состоит в использовании аналоговых квантовых симуляций (AQS), в процессе которых одна квантовая система имитирует (эмулирует) другую [22, 23]. Гамильтониан моделируемой системы \hat{H}_{sys} непосредственно отображается на гамильтониан симулятора \hat{H}_{sim} , управляемый извне, без применения разложения на контролируемые гейты, как в случае DQS [6].

$$\hat{H}_{sys} \leftrightarrow \hat{H}_{sim} \quad (16)$$

Очевидно, что подобное отображение может быть выполнено только в том случае, если между моделируемой системой и квантовым симулятором существует некоторое отношение подобия, которое можно записать в форме оператора. Тогда начальное состояние квантовой системы $|\varphi(0)\rangle$ может быть поставлено в соответствие состоянию симулятора $|\psi(0)\rangle$ при помощи некоторого оператора отображения f согласно правилу (17), а затем, после осуществления эволюции, конечное состояние симулятора $|\psi(t)\rangle$ может быть отображено на конечное состояние исследуемой системы $|\varphi(t)\rangle$ при помощи оператора f^{-1} . Для гамильтонианов системы и симулятора будет иметь место соотношение (18). Важно понимать, что симулятор может воспроизводить поведение исследуемой системы лишь частично, в зависимости от выбранного отображения. Выбор отображения зависит от конкретной постановки задачи симуляции, а также от возможностей самого симулятора. Наиболее частым применением аналоговых систем является эффективная эмуляция моделей многочастичных взаимодействий.

$$|\psi(0)\rangle = f |\varphi(0)\rangle \quad (17)$$

$$\hat{H}_{sim} = f \hat{H}_{sys} f^{-1} \quad (18)$$

Одно из преимуществ AQS-алгоритмов состоит в том, что они остаются полезными даже при наличии значительных погрешностей и ошибок

вычисления. В качестве примера, представим, что необходимо решить задачу о том, приводит ли данный набор условий в некоторой системе к квантовому фазовому переходу. В данном случае, даже при наличии ошибки в выходных данных квантового симулятора, интересующий нас переход всё равно будет наблюдаться в построенной модели, пусть и с вероятностью, зависящей от возникающей ошибки. Таким образом, мы сможем ответить на поставленный вопрос [6].

Рассмотрим отображение гамильтониана на примере реальной задачи, решенной с помощью симулятора AQS, построенного на базе регистра холодных ионов. Гамильтониан одного иона из регистра, при его взаимодействии с полем внешнего излучения, может быть записан в следующем виде:

$$\widehat{H}_I = 2\eta\Delta\overline{\Omega}\widehat{\sigma}_x\widehat{p} + \hbar\Omega\widehat{\sigma}_z \quad (19)$$

Здесь η – параметр Лэмба-Дирака, Δ – пространственный размер волновой функции, а $\overline{\Omega}$ контролируется интенсивностью излучения. Уравнение Дирака в размерности (1+1) для частицы со спином 1/2 и массой покоя m , в свою очередь, запишем в виде (20).

$$i\hbar\frac{\partial^2\Omega}{\partial u^2} = \widehat{H}_D\varphi = (c\widehat{p}\sigma_x + mc^2\widehat{\sigma}_z)\varphi \quad (20)$$

Если мы определим $c \equiv 2\eta\widehat{\omega}\Delta$, $mc^2 \equiv \hbar\Omega$, \widehat{H}_I примет ту же форму, что и \widehat{H}_D . Это значит, что такие эффекты, как парадокс Клейна, могут быть изучены в нерелятивистской квантовой системе – квантовом симуляторе!

Процессы инициализации и измерения состояний в AQS до сих пор не были подробно описаны в литературе. Поскольку исследуемая система и симулятор в данном случае должны быть схожи, предполагается, что приготовление начального состояния происходит естественным образом в процессах, схожих с натуральной релаксацией системы. Более того, непосредственное измерение состояния симулятора в данном случае позволяет проводить мгновенную аналогию между свойствами этого

состояния и свойствами состояния моделируемой системы. В этом смысле AQS имеет дополнительное преимущество, так как физические величины могут быть измерены непосредственно, без необходимости проведения вычислительных манипуляций над результатами измерений, как в случае DQS. Тем не менее, как подготовка исходного состояния, так и процесс измерения в AQS нуждаются в более детальном изучении.

3.4. PEA-алгоритмы квантовой симуляции

В рамках данной работы объектом исследования стали цифровые квантовые симуляторы. В этом параграфе мы рассмотрим несколько видов DQS-алгоритмов, основанных на определении фазы состояния квантового регистра (Phase estimation algorithms, PEA).

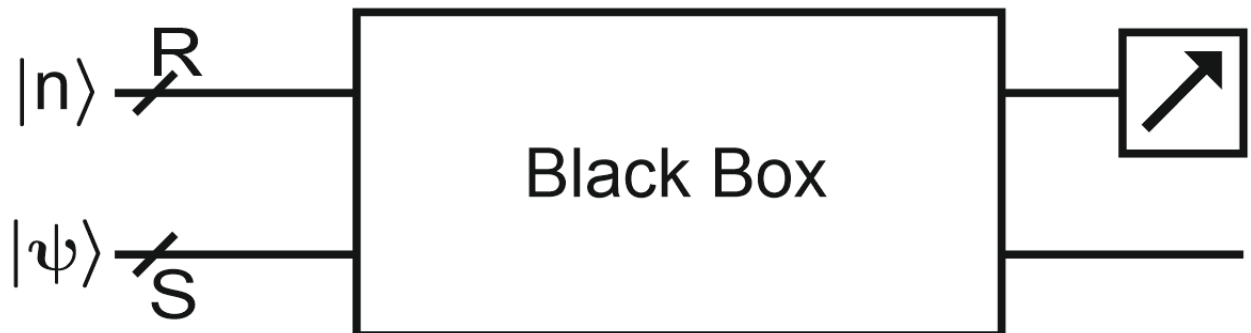


Рис. 4. Схема алгоритмов PEA. Квантовые регистры R и S представлены горизонтальными линиями. Внутренние преобразования регистров в процессе квантовой симуляции для общности обозначения представлен в виде “чёрного ящика” (Black Box).

Стрелкой обозначен процесс измерения состояния регистра R.

На рисунке 4 вы можете видеть общую схему алгоритмов PEA. Квантовый симулятор, в данном случае, состоит из двух регистров: регистра считывания R (так называемый ancilla register), и регистра состояния S, в который записывается состояние исследуемой системы. Общее квантовое состояние симулятора может быть записано в виде (21), где $|\psi\rangle$ – состояние

регистра S , а R находится в суперпозиции своих базисных состояний $|n\rangle$ с соответствующими комплексными амплитудами C_n .

$$|R\rangle \otimes |S\rangle = \sum_n C_n |n\rangle \otimes |\psi\rangle \quad (21)$$

Стоит отметить, что существует два больших класса алгоритмов на основе QPE (Quantum phase estimation). Разделение на классы происходит в зависимости от подхода к достижению в алгоритме необходимой точности. К первому классу относятся алгоритмы, в которых точность определения фазы находится в линейной зависимости от числа кубитов в регистре считывания. В свою очередь, во всех алгоритмах второго класса используется только один кубит в регистре считывания, а точность определяется числом итераций алгоритма. Ниже мы рассмотрим примеры алгоритмов обоих классов.

Сделаем ещё одно важное уточнение относительно исследуемых нами алгоритмов. Поскольку задача симуляции квантовой системы очевидным образом сводится к задаче поиска волновых функций и уровней энергии этой системы, мы можем без потери общности утверждать, что универсальный квантовый симулятор должен как минимум быть способен эффективно определять собственные числа для произвольных операторов Гамильтона. В общем случае оказывается, что квантовые симуляторы на основе QPE способны определять собственные числа произвольных унитарных операторов.

Алгоритм на основе квантового преобразования Фурье.

Данный алгоритм, схематически представленный на рисунке 5, относится к первому классу QPE. Рассмотрим унитарный оператор \hat{U} , который имеет собственный вектор $|\psi\rangle$ с соответствующим ему собственным числом значением $e^{2\pi i\phi}$. Отметим, что \hat{U} в данной постановке задачи представляет собой оператор эволюции системы (22). Целью симуляции, как уже было сказано выше, будет поиск максимально точной оценки

собственного значения этого оператора, а именно, величины (23), которую мы считаем неизвестной.

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \quad (22)$$

$$\varphi = \frac{-Et}{2\pi} \quad (23)$$

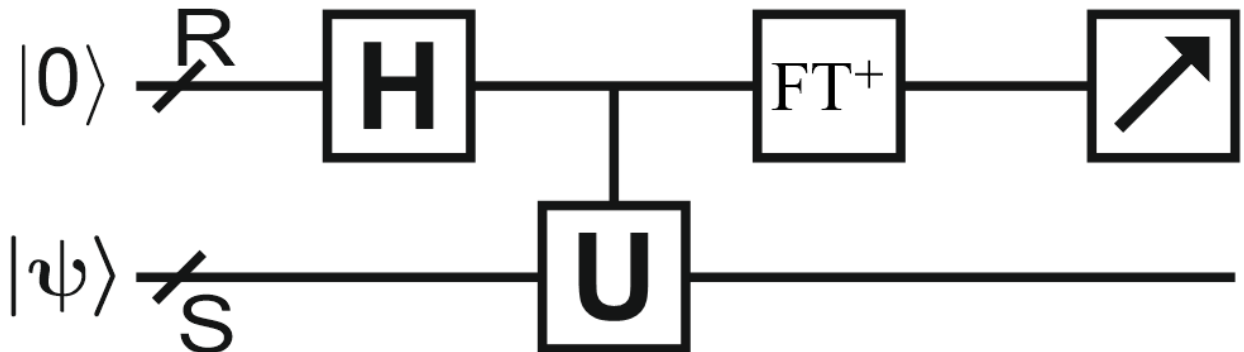


Рис. 5. Схема алгоритма квантовой оценки фазы, основанного на QFT

Описывая алгоритм, мы также предполагаем, что нам доступны две ключевые операции: приготовления регистра симулятора S в состоянии $|\psi\rangle$, а также осуществление операций “управляемое \hat{U}^{2^j} ” для целых неотрицательных значений j . Также мы должны быть способны осуществить обратное квантовое преобразование Фурье, которое было подробно описано в [5, стр. 217-220].

При реализации алгоритма используются два регистра. Первый регистр R содержит t кубитов, инициализированных в начальные состояния $|0\rangle$. Регистр S, как уже было сказано выше, инициализируется состоянием $|\psi\rangle$.

Сам алгоритм можно разбить на три этапа. В течение первого этапа к кубитам регистра R применяются квантовые элементы Адамара. Затем, после создания необходимой суперпозиции, к регистру S последовательно применяются контролируемые операции вида $C-\hat{U}^{2^j}$, где j принимает значения от 0 до $t-1$. Схема применения описанных операций

проиллюстрирована на рис. 6. В результате, симулятор переходит в состояние (24).

$$\frac{1}{2^{t/2}}(|0\rangle + 2^{2\pi i 2^{t-1}}|1\rangle)(|0\rangle + 2^{2\pi i 2^{t-2}}|1\rangle)\dots(|0\rangle + 2^{2\pi i 2^0}|1\rangle)|\psi\rangle = \frac{1}{2^{t/2}} \sum_{k=0}^{2^t-1} e^{2\pi i \varphi k} |k\rangle |\psi\rangle \quad (24)$$

Второй этап процедуры состоит в применении к регистру R обратного квантового преобразования Фурье (Reversed quantum Fourier transform, R-QFT). Для простоты описания этого этапа, предположим, что φ можно точно представить с помощью t битов в форме бинарного разложения (25). Согласно определению из [5], операцию R-QFT можно представить в виде (26), где $|\varphi\rangle$ – состояние, соответствующее бинарному разложению приведённой выше формы. Сложность обращения, в данном случае соответствует $\Theta(t^2)$. Последним этапом описанного алгоритма станет измерение найденного состояния в вычислительном базисе регистра для определения значения фазы.

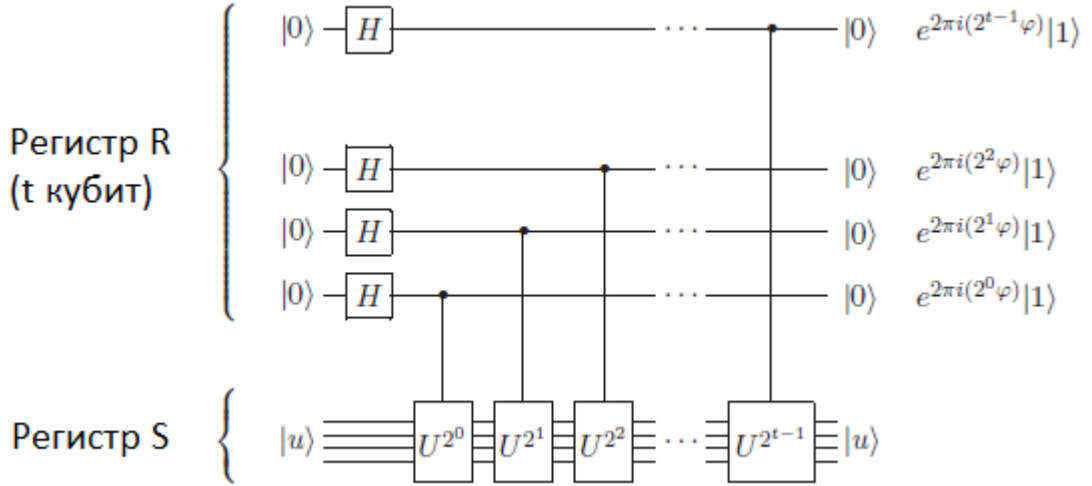


Рис. 6. Схема эволюции состояний в алгоритме квантовой оценки фазы, основанном на QFT

$$\varphi = 0.\varphi_1\varphi_2\dots\varphi_t = \frac{\varphi_1}{2} + \frac{\varphi_2}{2^2} + \dots + \frac{\varphi_t}{2^t} \quad (25)$$

$$\frac{1}{2^{t/2}} \sum_{k=0}^{2^t-1} e^{2\pi i \varphi k} |k\rangle \rightarrow |\varphi\rangle \quad (26)$$

В результате применения описанного алгоритма можно было бы получить собственное значение произвольного унитарного оператора с

неограниченной точностью, которая, очевидно зависит от числа кубитов как $1/2^j$. Однако проведённые ранее эксперименты по реализации данного алгоритма показывают, что в виду накопления ошибки при применении неидеальных квантовых гейтов реальная точность оказывается существенно ниже. Наиболее важной проблемой при применении этого алгоритма симуляции, однако, является технологическая сложность создания квантового регистра, достаточно большого для его практического использования.

Алгоритмы IPEA и KPEA

Рассмотрим теперь краткое описание двух схожих алгоритмов второго класса QPE. Постановка задачи в данном случае сохраняется прежней: определить собственное значение $e^{2\pi i\varphi}$, соответствующее собственному состоянию $|\psi\rangle$ оператора \hat{U} .

Схема алгоритма IPEA (Iterative PEA) приведена на рисунке 7. Как можно заметить, регистр считывания представлен единственным кубитом, инициализированным в состояние $|0\rangle$, к которому применяется вентиль Адамара H . Регистр S , как и в случае прошлого алгоритма, находится в состоянии $|\psi\rangle$. После инициализации, к регистру S применяется контролируемый оператор эволюции вида $C-\hat{U}$. Отметим, что, в отличие предыдущего алгоритма, в данном случае не требуется реализовывать операции $C-\hat{U}^{2^j}$.

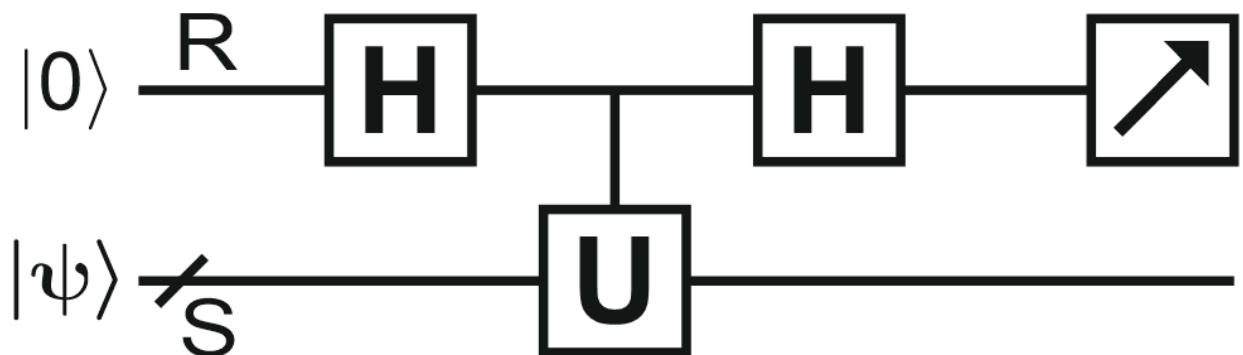


Рис. 7. Схема алгоритма IPEA

После применения оператора эволюции к кубиту регистра R вторично применяется оператор Адамара. Затем состояние этого кубита измеряется. Квантовое состояние симулятора перед измерением имеет вид (27). Из этого следует, что вероятность получить состояние $|0\rangle$ при измерении кубита R в вычислительном базисе регистра равна (28).

$$\frac{1}{2}((1 + e^{2\pi i\varphi})|0\rangle + (1 - e^{2\pi i\varphi})|1\rangle)|\psi\rangle \quad (27)$$

$$P_0 = \cos^2(\pi\varphi) \quad (28)$$

Повторяя процедуру симуляции N раз, мы получаем возможность измерить значение P_0 с точностью $1/\sqrt{N}$. Таким образом, при применении бинарного разложения фазы, описанного ранее, мы сможем получить m значащих битов φ за $N \sim 2^{2m}$ итераций алгоритма [24].

Количество итераций, необходимых для получения указанной точности, может быть сокращено за счёт модернизации алгоритма, предложенной Китаевым, и известной как КРЕА. В этом методе необходимо применение операций вида $C - \hat{U}^{2^{j-1}}$. Здесь эти операции применяются для ряда значений j ($1 \leq j \leq m$), чтобы приготовить кубит R в состоянии $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{2\pi i(2^{j-1}\varphi)}|1\rangle)$. Процесс симуляции состояния повторяется несколько раз, после чего полученные данные измерений используются в качестве оценки для дробной части фазы $2^{j-1}\varphi$. Затем для извлечения значения полной фазы используется классический алгоритм с полиномиальным временем работы.

3.5. Адиабатические квантовые вычисления

Одним из наиболее эффективных методов инициализации квантовых регистров, известных на данный момент, является метод адиабатического приготовления состояний (Adiabatic state preparation, ASP). В этом параграфе

мы рассмотрим теоретические основы адиабатических квантовых вычислений (AdQC), знание которых необходимо при знакомстве с методом ASP.

Теория адиабатических квантовых вычислений основывается на утверждении Адиабатической теоремы, выведенной М. Борном и В. Фоком в 1928 году. Согласно этой теореме, *физическая система, испытывающая на себе некоторое зависящее от времени возмущение, остаётся в своём мгновенном собственном состоянии, если возмущение действует достаточно медленно, и если это состояние отделено энергетической щелью от остальной части спектра.* Упрощая эту формулировку, можно сказать, что система адаптирует свою конфигурацию в случае медленных изменений внешних условий, тогда как в случае быстрых изменений она не успевает этого сделать, и пространственная плотность распределения вероятностей остаётся неизменной. Заметим, что, в случае квантовомеханического описания, термин “адиабатический” не имеет прямой связи с потоком тепла в системе, и является, скорее, синонимом термодинамического термина “квазистатический”.

Оригинальная идея проведения квантовых вычислений с помощью адиабатической эволюции состояния, получившая в последствие название AdQC (Adiabatic quantum computing), подробно изложена в работе [25]. В основе AdQC лежит идея варьирования гамильтониана квантового регистра от некоторого начального гамильтониана \hat{H}_{init} , собственное состояние которого просто приготовить, до гамильтониана исследуемой системы \hat{H}_{final} , непосредственное приготовление собственных состояний которого обычно сопряжено с трудностями. При условии, что процесс варьирования будет достаточно медленным, а энергетический зазор между основным и первым возбуждённым состояниями спектра будет сохраняться достаточно большим во время всего процесса, регистр, согласно утверждению адиабатической теоремы, в конечном итоге перейдёт в собственное состояние исследуемого гамильтониана.

В качестве примера, опишем эволюцию системы из n кубитов, состояние которой $|\psi(t)\rangle$ эволюционирует во времени в соответствии с уравнением Шрёдингера (29), где $\widehat{H}(t)$ – зависящий от времени гамильтониан, подчиняющийся условиям (30). Здесь T – полное время варьирования гамильтониана.

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \widehat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (29)$$

$$\begin{cases} \widehat{H}(t=0) = \widehat{H}_{init} \\ \widehat{H}(t=T) = \widehat{H}_{final} \end{cases} \quad (30)$$

Общая схема варьирования может быть выражена как

$$\begin{cases} \widehat{H}(s) = A(s)\widehat{H}_{init} + B(s)\widehat{H}_{final} \\ A(0) = B(1) = 1 \\ A(1) = B(0) = 0 \\ s \in [0,1] \end{cases} \quad (31)$$

Условие адиабатичности процесса, как нетрудно понять, связано со значением времени эволюции T . Рассмотрим простейший случай $s = t/T$. Утверждается, что процесс адиабатичен, то есть, что $|\psi(t)\rangle$ в каждый момент времени является собственным состоянием $\widehat{H}(t)$, если соблюдается набор условий вида (32). Здесь g_{\min} – минимальный энергетический зазор между основным и первым возбуждённым состояниями спектра, а ε – матричный элемент производной гамильтониана между этими состояниями. Основное и первое возбуждённое состояния спектра $\widehat{H}(s)$ обозначаются как $\langle l=0; s |$ и $\langle l=1; s |$ соответственно.

$$\begin{cases} T \gg \frac{\varepsilon}{g_{\min}^2} \\ g_{\min} = \min_{0 \leq s \leq 1} [E_1(s) - E_0(s)] \\ \varepsilon = \max_{0 \leq s \leq 1} \left| \langle l=1; s | \frac{d\widehat{H}}{ds} | l=0; s \rangle \right| \end{cases} \quad (32)$$

Модель АQC альтернативна наиболее распространённому подходу к квантовым вычислениям, основанному на применении стандартных квантовых гейтов и мгновенном преобразовании состояний системы. Как было доказано в работе [26], эти подходы эквивалентны с точки зрения вычислительной мощности. В связи с этим, данная модель часто применяется в сопряжении с подходом QCBA (Quantum-circuit based approach). Лучшим примером здесь является адиабатическое приготовление состояния (ASP), необходимое для инициализации регистра при квантовых вычислениях и квантовых симуляциях.

Описываемый метод был предложен Аспуру-Гузиком в основополагающей работе [27] в качестве способа инициализации квантовых регистров в собственные состояния молекулярных гамильтонианов для энергетических расчетов с помощью алгоритма оценки фазы (PEA). При реализации ASP, фактически, ставится задача “симуляции” процесса AdQC при помощи средств DQS. Эволюция гамильтониана в данном случае воспроизводится контролируемым образом с использованием стандартных квантовых гейтов. Подробнее процесс адиабатического приготовления состояний будет разобран нами в главе 5.

4. Ридберговские атомы в квантовых вычислениях

В рамках предыдущей главы были подробно рассмотрены алгоритмы квантовой симуляции. Очевидно, что практическая реализация подобных алгоритмов требует выбора подходящей элементной базы для квантового симулятора, а также построения схем осуществления квантовых гейтов в рамках этой базы. В этой главе мы рассмотрим методологию реализации квантовых вычислений с использованием ультрахолодных ридберговских атомов рубидия в массивах оптических дипольных ловушек.

4.1. Ридберговские атомы

Алгоритмы квантовой симуляции, основанные на DQS-подходе, подробная схема которого была приведена в предыдущей главе, требуют применения сложных квантовых гейтов. В этом параграфе мы обсудим возможность реализации квантовых вентилях с использованием ридберговских атомов.

Квантовые регистры на основе ультрахолодных атомов в массивах оптических дипольных ловушек обладают рядом значительных преимуществ перед другими технологиями реализации квантовых гейтов. Первым и наиболее существенным преимуществом является высокая точность квантовых операций, реализуемых в них [2]. Также немаловажным фактором является возможность сохранения высокой точности адресации к конкретным кубитам при масштабировании регистров [1, 28].

Для лучшего понимания модели квантовых вычислений, основанной на ридберговских атомах, следует начать с обсуждения их основных свойств. Как известно, атомы щелочных металлов имеют на внешней оболочке неспаренный электрон. При переходе этого электрона в высоковозбуждённое состояние с $n \gg 1$ говорят, что атом переходит в ридберговское состояние.

Выражения для радиусов атомных орбит, энергий этих орбит и времён жизни высоковозбуждённых состояний имеют следующий вид:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} n^2 \quad (33)$$

$$E_n = -\frac{e^4 m_e \epsilon_0^2 \hbar^2}{8n^2} \quad (34)$$

$$\tau_n = \tau_2 n^3 \quad (35)$$

Удобство использования ридберговских атомов для реализации квантовых гейтов обуславливается, в первую очередь, возможностью осуществления точного контроля взаимодействия между ними. Как можно заметить при анализе выражений (33-35), при $n > 100$ пространственные размеры атомов и времена их жизни приобретают макроскопический масштаб. Подобные свойства атомов делают возможной реализацию контролируемого взаимодействия. Речь, в данном случае, идёт о сильном диполь-дипольном взаимодействии, которое наблюдается в системах таких атомов со значениями главного квантового числа $n \gg 1$ [29]. В качестве логических уровней кубитов при этом часто используют сверхтонкие долгоживущие подуровни основных состояний атомов.

Одним из вариантов реализации квантовых вентилях с использованием сильного диполь-дипольного взаимодействия является применение эффекта дипольной блокады. Суть данного эффекта заключается в невозможности одновременного возбуждения близкорасположенных атомов в ридберговские состояния под действием одного резонансного источника излучения. Для лучшего понимания эффекта полезным будет представить взаимодействие внутри концентрированного атомного газа. Поскольку ридберговские радиусы орбит атомов растут пропорционально n^2 , при возбуждении одного из атомов в состояние с $n \gg 1$, его размер станет сравним с длиной свободного пробега в газе. При этом диполь-дипольное взаимодействие станет достаточно сильным, чтобы существенно повлиять на уровни энергии соседних с ним атомов,

сдвинув их из резонанса с возбуждающим излучением. В таком случае, можно считать, что мы получили возможность управления взаимодействием в атомном ансамбле. За счёт когерентного управления данным эффектом, в частности, можно реализовать квантовые вентили CZ и CNOT [30].

Высокая теоретическая точность, демонстрируемая квантовыми вентилями, построенными на основе эффекта дипольной блокады ($\sim 99.99\%$), указывает на его перспективность для реализации квантовых вычислительных устройств [31]. Однако получение достаточных значений точности таких гейтов в реальных экспериментах затруднено в связи с чрезвычайно быстрым ростом поляризуемости ($\sim n^7$) и низкой степенью сохранения когерентности в структуре шарковских подуровней в атомных системах. Описанные трудности оказываются преодолимыми в случае реализации одиночных двухкубитных вентиляей, однако до сих пор не существует высокоточных квантовых схем более высокого порядка, основанных на эффекте дипольной блокады. В связи с этим, для реализации схем многочастичных квантовых гейтов в ридберговских системах необходимо искать иные возможности. Одним из перспективных вариантов для реализации таких гейтов может стать использование электрически настраиваемых резонансов Фёрстера [32, 33].

4.2. Осцилляции Раби

В этом параграфе мы рассмотрим модель взаимодействия двухуровневой квантовой системы с внешним электрическим полем, а также разберём эффект возникновения в таких системах резонансных осцилляций населённости квантовых уровней, называемых осцилляциями Раби. Важность рассмотрения данного эффекта обусловлена его широкой применимостью для описания резонансных взаимодействий в ридберговских системах.

Приступим к описанию нашей модели. В отсутствие взаимодействия двухуровневая система в присутствии поля будет характеризоваться

гамильтонианом \widehat{H}_0 , а также энергиями уровней E_1 и E_2 . Взаимодействие с полем будем учитывать в виде малой поправки \widehat{H}' к исходному гамильтониану. Тогда волновая функция системы может быть выражена как $\Psi' = a\Psi_1 + b\Psi_2$, где Ψ_1 и Ψ_2 – стационарные волновые функции, соответствующие уровням энергии E_1 и E_2 , а гамильтониан системы будет равен $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}'$ [34, стр. 30-32]. Подставив Ψ' в уравнение Шрёдингера, получим:

$$i\hbar\Psi_1\frac{\partial a}{\partial t} + i\hbar\Psi_2\frac{\partial b}{\partial t} = a(t)\widehat{H}\Psi_1 + b(t)\widehat{H}\Psi_2 \quad (36)$$

$$\Psi_i = \psi_i e^{-iE_i t/\hbar} \quad (37)$$

Интересующий нас случай связан с резонансным взаимодействием поля и двухуровневой системы, а значит, имеет место соотношение $\omega_0 - \omega = \delta \ll \omega_0, \omega$. Здесь ω_0 и ω – частота перехода в системе и частота внешнего излучения соответственно. С учётом данного условия, можем переписать уравнения (36) и (37) в виде системы (38).

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} = \widehat{V}_{12}b \\ i\hbar\frac{\partial b}{\partial t} = \widehat{V}_{21}a \end{cases} \quad (38)$$

Матричные элементы \widehat{V}_{12} и \widehat{V}_{21} в данном случае задают взаимодействие ($\widehat{V} = \widehat{H}'$) и могут быть выражены как (39):

$$\begin{cases} \widehat{V}_{12} = \int \Psi_1^* \widehat{V} \Psi_2 dx dy dz = V \exp\left(i\frac{(E_1 - E_2)}{\hbar}t\right) \\ \widehat{V}_{21} = \int \Psi_2^* \widehat{V} \Psi_1 dx dy dz = V \exp\left(i\frac{(E_2 - E_1)}{\hbar}t\right) \end{cases} \quad (39)$$

Зная общий вид дипольного взаимодействия $\widehat{V} = -\widehat{\mu}\vec{E}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$, введём обозначение $-\langle\mu\rangle E = F$, перейдя таким образом к системе (40):

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = Fbe^{i\delta t} \\ i\hbar \frac{\partial b}{\partial t} = Fae^{-i\delta t} \end{cases} \quad (40)$$

Решив данную систему с учётом граничных условий на волновую функцию начального состояния ($\Psi = \Psi_1$ при $t = 0$), мы получаем возможность выразить вероятность нахождения системы в конечном состоянии Ψ_2 в виде функции (41). Очевидно, что граничными значениями функции в данном случае являются 0 и 1.

$$\Pi = \frac{F^2}{2\hbar^2\Omega^2}(1 - \cos(2\Omega t)) \quad (41)$$

$$\Omega = \sqrt{\delta^2/4 - F^2/\hbar^2} \quad (42)$$

Ради дальнейшего удобства, введём замену $\Omega_R = \left\langle \frac{\mu E}{\hbar} \right\rangle$. Тогда:

$$\Pi = \frac{2\Omega_R^2}{\delta^2 - 4\Omega_R^2} \left(1 - \cos\left(\sqrt{\delta^2 + 4\Omega_R^2} t\right) \right) \quad (43)$$

Введённая частота Ω_R называется частотой Раби. Как мы видим, вероятность Π является периодической функцией, зависящей от интенсивности поля и отстройки от резонанса. Полученные здесь осцилляции населённости квантовых уровней в двухуровневой системе были названы осцилляциями Раби [34, стр. 36-39].

4.3. Резонансы Фёрстера

Данный параграф будет посвящён описанию эффекта возникновения электрически настраиваемых резонансов Фёрстера в системах ридберговских атомов. Мы также обсудим, как эти резонансы применяются для реализации квантовых гейтов [35].

Для упрощения описания, рассмотрим сначала взаимодействие двух атомов (обозначенных 1 и 2), находящихся на фиксированном расстоянии R друг от друга, с внешним электрическим полем, направление которого совпадает с осью квантования Z . Пусть дипольные моменты атомов равны d_1 и d_2 , а напряжённость электрического поля равна E (рис. 8. (б)). Тогда оператор диполь-дипольного взаимодействия в системе будет представлен выражением (44):

$$\widehat{V}_{dd} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R^3} (\hat{\mathbf{d}}_1 \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \mathbf{n})(\hat{\mathbf{d}}_2 \mathbf{n})) \quad (44)$$

После перехода к сферическим координатам, этот оператор будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \widehat{V}_{dd} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R^3} & \left[S_1(\theta) (\hat{d}_{1+} \hat{d}_{2-} + \hat{d}_{1-} \hat{d}_{2+} + 2\hat{d}_{1z} \hat{d}_{2z}) + \right. \\ & \left. + S_2(\theta) (\hat{d}_{1+} \hat{d}_{2z} - \hat{d}_{1-} \hat{d}_{2z} + \hat{d}_{1z} \hat{d}_{2+} - \hat{d}_{1z} \hat{d}_{2-}) - S_3(\theta) (\hat{d}_{1+} \hat{d}_{2+} + \hat{d}_{1-} \hat{d}_{2-}) \right] \end{aligned} \quad (45)$$

Здесь $\hat{d}_{k,\pm} = \mp (\hat{d}_{k,x} \pm i\hat{d}_{k,y})/\sqrt{2}$ – компоненты оператора дипольного момента в сферическом базисе, а угловым факторам соответствуют выражения (46).

$$\begin{aligned} S_1(\theta) &= \frac{1 - 3\cos^2(\theta)}{2} \\ S_2(\theta) &= \frac{3\sin(\theta)\cos(\theta)}{\sqrt{2}} \\ S_3(\theta) &= \frac{3\sin^2(\theta)}{2} \end{aligned} \quad (46)$$

Диполь-дипольное взаимодействие между атомами приводит к переходам между их коллективными состояниями вида $|r_a, r_b\rangle \rightarrow |r_s, r_t\rangle$, где $|r\rangle = |nljm_j\rangle$ – индивидуальное состояние каждого атома. Здесь n – главное квантовое число, l – орбитальный момент атома, j – полный момент атома, m_j – проекция полного момента на ось квантования. Матричные элементы дипольного момента могут быть записаны в виде (47) [36], где $R_{n_a l_a}^{n_s l_s}$ и $R_{n_b l_b}^{n_t l_t}$ – радиальные матричные элементы для переходов $|n_a l_a\rangle \rightarrow |n_s l_s\rangle$ и $|n_b l_b\rangle \rightarrow |n_t l_t\rangle$, соответственно.

$$\begin{aligned}
\langle n_s m_s l_s j_s; n_t m_t l_t j_t | \widehat{V}_{dd} | n_a m_a l_a j_a; n_b m_b l_b j_b \rangle = & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left\{ A_1(\theta) \left[2C_{j_a m_a 10}^{j_s m_s} C_{j_b m_b 10}^{j_t m_t} + \right. \right. \\
& + C_{j_a m_a 11}^{j_s m_s} C_{j_b m_b 1-1}^{j_t m_t} + C_{j_a m_a 1-1}^{j_s m_s} C_{j_b m_b 11}^{j_t m_t} \left. \right] + A_2(\theta) \left[\left(C_{j_a m_a 11}^{j_s m_s} - C_{j_a m_a 1-1}^{j_s m_s} \right) C_{j_b m_b 10}^{j_t m_t} + \right. \\
& + C_{j_a m_a 10}^{j_s m_s} \left(C_{j_b m_b 11}^{j_t m_t} - C_{j_b m_b 1-1}^{j_t m_t} \right) \left. \right] - A_3(\theta) \left[C_{j_a m_a 11}^{j_s m_s} C_{j_b m_b 11}^{j_t m_t} + C_{j_a m_a 1-1}^{j_s m_s} C_{j_b m_b 1-1}^{j_t m_t} \right] \left. \right\} \times \\
& \times \sqrt{\max(l_a, l_s)} \sqrt{\max(l_b, l_t)} \sqrt{(2j_a + 1)(2j_b + 1)} \times \left\{ \frac{l_a}{j_s} \dots \frac{1/2}{1} \dots \frac{j_a}{l_s} \right\} \left\{ \frac{l_b}{j_t} \dots \frac{1/2}{1} \dots \frac{j_b}{l_t} \right\} \times \\
& \times (-1)^{l_s + \frac{l_a + l_s + 1}{2}} (-1)^{l_t + \frac{l_b + l_t + 1}{2}} (-1)^{j_a + j_b} R_{n_a l_a}^{n_s l_s} R_{n_b l_b}^{n_t l_t}
\end{aligned} \tag{47}$$

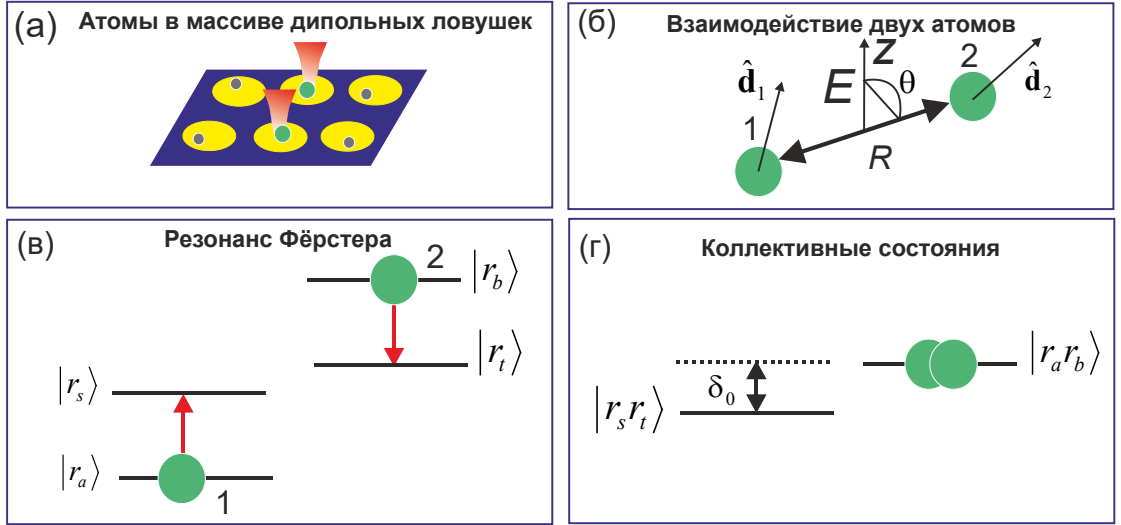


Рис. 8. (а) Схема квантового регистра, состоящего из одиночных ультрахолодных нейтральных атомов, захваченных в массив оптических дипольных ловушек; (б) Диполь-дипольное взаимодействие двух ридберговских атомов. θ – угол между направлением поля и вектором, соединяющим атомы; (в) Резонансы Фёрстера для двух взаимодействующих ридберговских атомов. Атом 1 переходит из состояния $|r_a\rangle$ в состояние $|r_s\rangle$. Атом 2 переходит из состояния $|r_b\rangle$ в состояние $|r_t\rangle$; (г) Отстройка от резонанса Фёрстера для перехода между коллективными состояниями $|r_a, r_b\rangle$ и $|r_s, r_t\rangle$ [35]

Расчёт матричных элементов \widehat{V}_{dd} в выражении (47) производится в рамках квазиклассического приближения [36], с учётом стандартных правил отбора по l и j , а также дополнительного правила отбора $\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$, где $M = m_1 + m_2$.

На рисунке 8 (г) представлена схема энергий коллективных состояний атомов. Как нетрудно понять, разность энергий будет определяться выражением (48):

$$\hbar\delta_0 = [U(r_a) - U(r_s)] + [U(r_b) - U(r_t)] \quad (48)$$

В случае, если значение отстройки $\delta_0 = 0$, будет наблюдаться вырождение коллективных уровней энергии, сопровождающееся осцилляциями населённостей этих уровней, схожими с осцилляциями Раби. Этот эффект и называют резонансом Фёрстера [35].

Среди особых свойств резонансов Фёрстера следует в первую очередь выделить их универсальность и простоту в управлении. Эти резонансы, как можно заметить из формулы (47), не требуют больших энергий диполь-дипольного взаимодействия, что позволяет использовать их при управлении состояниями ридберговских атомов с достаточно малыми значениями главного квантового числа. Они также наблюдаются и для долгоживущих ридберговских состояний, давая возможность когерентного управления квантовой системой за счёт приложения лазерного излучения и существенно упрощая считывание конечных квантовых состояний. Простота управления в данном случае обусловлена возможностью применения динамического эффекта Штарка при настройке на положение резонанса. Все эти преимущества показывают высокую перспективность резонансов Фёрстера для реализации квантовых вычислений.

4.4. Трёхчастичные резонансы Фёрстера

В предыдущем параграфе был подробно рассмотрен эффект резонансов Фёрстера на примере взаимодействий в двухчастичной системе. Также было показано, что данный эффект может использоваться для выполнения квантовых вычислений. Однако рассмотренные выше двухчастичные

резонансы подходят только для реализации однокубитных и двухкубитных квантовых гейтов. В рамках данной работы нас интересует также реализация квантовых операций в пространствах большей размерности. В связи с этим, в данном параграфе мы разберём эффект трёхчастичных резонансов Фёрстера, который, как было доказано в рамках работы [37], может применяться для создания трёхкубитных квантовых вентилях.

Теоретическое описание трёхчастичных резонансов удобно производить, основываясь на дираковском представлении квантовых состояний. Согласно изложенной в предыдущем параграфе теории, при реализации двухчастичного резонанса Фёрстера состояния обеих взаимодействующих частиц меняются за счёт резонансного диполь-дипольного взаимодействия. Выразим эти изменения в виде (49):

$$|n_1 l_1 j_1 m_{j_1}; n_2 l_2 j_2 m_{j_2}\rangle \rightarrow |n'_1 l'_1 j'_1 m'_{j_1}; n'_2 l'_2 j'_2 m'_{j_2}\rangle \quad (49)$$

Перейдём теперь к описанию трёхчастичного случая, добавив ещё один атом в рассматриваемую систему. Тогда, если в процессе взаимодействия изменились состояния только двух частиц, будет справедливым сказать, что снова реализовался двухчастичный резонанс Фёрстера, а третья частица не участвует в рассмотрении. В связи с этим, определим трёхчастичный резонанс Фёрстера как процесс, в результате которого меняются состояния всех трёх взаимодействующих атомов.

Как нетрудно понять, описание взаимодействия трёх частиц выходит за рамки рассмотренной нами ранее теории, так как требует применения операторов большей размерности. Однако, поскольку каждое из межатомных взаимодействий строго локально, мы можем представить действие трёхчастичных операторов в виде композиции действий двухчастичных операторов на коллективные состояния отдельных пар атомов в трёхчастичной системе. Схема процесса трёхчастичного взаимодействия выражается в формуле (50).

$$\left| n_1 l_1 j_1 m_{j_1}; n_2 l_2 j_2 m_{j_2}; n_3 l_3 j_3 m_{j_3} \right\rangle \rightarrow \left| n_1' l_1' j_1' m_{j_1}'; n_2' l_2' j_2' m_{j_2}'; n_3' l_3' j_3' m_{j_3}' \right\rangle \quad (50)$$

Существует множество возможных вариантов реализации трёхчастичных резонансов. Ниже приведен пример трёхчастичной схемы, описанный в работе [33]. Здесь формулой (51) представлен непосредственно трёхчастичный резонанс, а формула (52) выражает разложение резонансной схемы через последовательность двухчастичных переходов.

$$3 \times n P_{3/2}(|M\rangle) \rightarrow n S_{1/2} + (n+1) S_{1/2} + n P_{3/2}(|M^*\rangle) \quad (51)$$

$$3 \times n P_{3/2}(|M\rangle) \rightarrow n S_{1/2} + (n+1) S_{1/2} + n P_{3/2}(|M\rangle) \rightarrow n S_{1/2} + (n+1) S_{1/2} + n P_{3/2}(|M^*\rangle) \quad (52)$$

В данной работе авторами были экспериментально получены трёхчастичные резонансы между коллективными состояниями квантовых уровней $37P_{3/2}$, $37S_{1/2}$ и $38S_{1/2}$ в малых ансамблях ($\sim 3-5$ шт.) атомов Rb. Таким образом, была экспериментально подтверждена возможность создания квантовой запутанности состояний сразу трёх атомов, что окончательно подтвердило эффективность применения трёхчастичных резонансов при разработке многокубитных квантовых гейтов.

5. Алгоритм симуляции A-R-IPEA

В этой главе будет рассматриваться разработанная в рамках проведённого исследования схема алгоритма квантовой симуляции молекул, основанная на итерационной схеме Китаева и адиабатическом приготовлении состояний. Для его обозначения здесь будет применяться аббревиатура A-R-IPEA (Adiabatic reversed iterative phase estimation algorithm). Также здесь рассмотрена физическая модель реализации представленного алгоритма для симуляции двухатомных молекул со всеми необходимыми теоретическими дополнениями касательно реализации отдельных квантовых вентиляей.

Отметим также, что похожая схема алгоритма уже была представлена ранее в работе [24]. Однако проведённые нами расширения и адаптации позволяют с полным правом говорить о разработке нового алгоритмического подхода.

5.1. Постановка задачи

Перед обсуждением предложенного нами алгоритма необходимо полностью сформулировать задачу, решаемую при разработке схемы квантовой симуляции. С этой целью обратимся ещё раз к параграфу 3.3.1 главы 3. Как уже было сказано выше, целью данного исследования является разработка схемы цифрового квантового симулятора (DQS), подходящего для решения задачи молекулярного моделирования.

Технология алгоритмов DQS, как было отмечено ранее, базируется на последовательном выполнении следующих этапов:

- Инициализация квантового регистра
- Контролируемая QСВА-эволюция состояния
- Измерение состояния

Поскольку в данном случае мы заинтересованы в разработке теоретической модели алгоритма, наибольшее внимание необходимо уделить первым двум этапам. В рамках данного исследования мы будем предполагать, что конечное измерение производится при помощи метода квантовой томографии (QST), а также является достаточно точным.

5.2. Теоретическое описание алгоритма A-R-IPEA

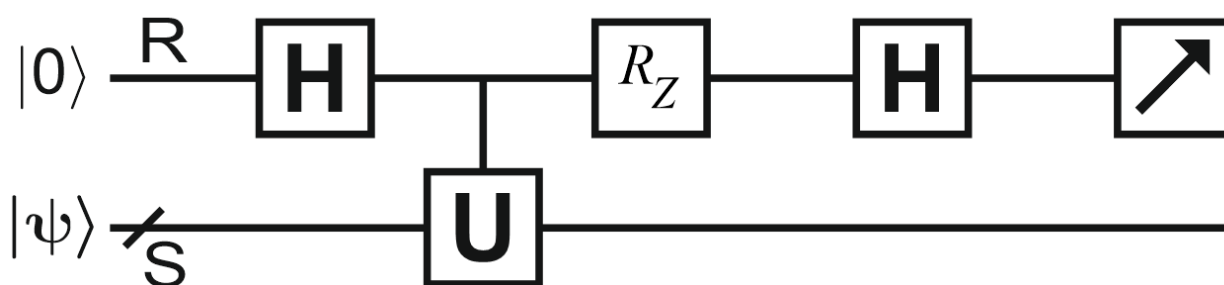


Рис. 9. Схема алгоритма квантовой симуляции A-R-IPEA

На рисунке 9 вы можете видеть предложенную нами схему алгоритма квантовой симуляции A-R-IPEA. В данном параграфе мы подробно разберём все теоретические аспекты данной схемы.

В первую очередь стоит подчеркнуть, что описываемый алгоритм основан на оценке фазы квантового состояния. Согласно описанию, приведённому в параграфе 3.4, это означает, что главной задачей нашего алгоритма станет поиск энергии собственного состояния моделируемой системы. Уточним, что в данной работе мы будем говорить только об энергии основного состояния молекулярных соединений, поскольку именно она определяет основные свойства моделируемых нами систем. Отметим также, что подход к поиску значений энергии возбуждённых уровней полностью аналогичен представленному здесь.

Как можно видеть, схема предлагаемого нами квантового симулятора состоит из двух квантовых регистров: регистра считывания R (Readout) и

регистра состояния S (State). Регистр R , в данном случае, содержит только 1 кубит, инициализированный в состояние $|0\rangle$, тогда как количество кубитов в регистре S полностью определяется размером исследуемой системы.

5.2.1. Приготовление начального состояния

Инициализация квантовых состояний регистра S производится с помощью адиабатического приготовления состояний. Рассмотрим этот процесс на примере модельной задачи. Пусть нам необходимо произвести квантовую симуляцию некоторой системы произвольного размера, описываемой гамильтонианом \hat{H}_{mol} . В таком случае квантовый регистр должен быть инициализирован в основное состояние $|\psi\rangle$ данного гамильтониана. Предположим также, что существует некоторый модельный гамильтониан \hat{H}_{init} , основное состояние которого $|\varphi\rangle$ может быть легко приготовлено в нашем квантовом регистре. Общность данного подхода очевидна и не требует доказательства, ведь в случае, если регистр S не может быть приготовлен ни в одно из заранее заданных экспериментатором состояний, можно утверждать, что он полностью бесполезен.

Будем производить медленное варьирование гамильтониана системы от \hat{H}_{init} до \hat{H}_{mol} . Для этого введём вспомогательный оператор вида (53):

$$\hat{H}_{ad}(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right) \hat{H}_{init} + \frac{t}{T} \hat{H}_{mol} \quad (53)$$

Согласно теории, представленной в пар. 3.5, схема варьирования имеет вид (54), где t – время, T – общая продолжительность эволюции.

$$\begin{cases} \hat{H}_{ad}(s) = A(s)\hat{H}_{init} + B(s)\hat{H}_{final} \\ A(s) = (1-s) \\ B(s) = s \\ s = \frac{t}{T} \in [0,1] \end{cases} \quad (54)$$

Из данной записи очевидно, что здесь выбрана простейшая, линейная зависимость от параметра для коэффициентов оператора. Теперь, если эволюция квантового регистра может быть описана выражением (55), мы можем утверждать, что его состояние на протяжении всего времени эволюции будет являться собственным для оператора $\widehat{H}_{ad}(s)$.

$$\widehat{U}|\psi\rangle = \exp(-i\widehat{H}_{ad}t)|\psi\rangle \quad (55)$$

Представленная здесь схема адиабатического приготовления достаточно удобна и может быть использована при решении задачи квантовой симуляции. Однако для практической реализации с использованием физических устройств приведённое выше математическое описание необходимо перевести в дискретный вид. В связи с этим, мы предлагаем воспользоваться модификацией итерационного алгоритма приготовления, предложенного в работах [27, 38].

Для проведения дискретизации и осуществления точного контроля за временем исполнения процесса, разделим полную эволюцию системы на M шагов. Преобразование состояния регистра S на каждом шаге будет описываться формулой (56), где $\Delta T = T/M$, а m принимает значения от 1 до M

$$\widehat{U}_{ad}^m(t) = \exp\left[\frac{-i\Delta T}{\hbar}\left(\frac{m}{M}\widehat{H}_{mol} + \left(1 - \frac{m}{M}\right)\widehat{H}_{init}\right)\right] \quad (56)$$

Очевидно, что для реализации операций вида $\widehat{U}_{ad}^m(t)$ в общем случае потребуется представить их в виде последовательностей стандартных квантовых гейтов. Для того, чтобы наше описание было удобным для такого представления, применим формулу Троттера (глава 3, параграф 3.3.1), пользуясь в данном случае разложением первого порядка малости по Δt . Тогда выражение (56) будет преобразовано в форму (57).

$$\begin{aligned} \widehat{U}_{ad}^m(t) = & \exp\left[-i\left(1-\frac{m}{M}\right)\frac{\Delta T}{2}\widehat{H}_{init}\right]\exp\left[-i\frac{m\Delta T}{M}\widehat{H}_{mol}\right]\times \\ & \times \exp\left[-i\left(1-\frac{m}{M}\right)\frac{\Delta T}{2}\widehat{H}_{init}\right] + \Theta((\Delta T)^2) \end{aligned} \quad (57)$$

Применив теперь для гамильтонианов \widehat{H}_{init} и \widehat{H}_{mol} разложение в виде (58), мы, наконец, получим простую декомпозицию оператора на последовательность стандартных гейтов [39].

$$\widehat{H} = \sum_{i\alpha} h_{\alpha}^i \sigma_{\alpha}^i + \sum_{ij\alpha\beta} h_{\alpha\beta}^{ij} \sigma_{\alpha}^i \sigma_{\beta}^j + \dots \quad (58)$$

5.2.2. Эволюция квантового состояния.

После приготовления квантового регистра S в собственное состояние гамильтониана исследуемой системы и применения к кубиту R вентиля Адамара (рис. 9.), следует этап эволюции квантового состояния. Для реализации контролируемой эволюции будем использовать модификацию метода, известного как КРЕА, который был описан в рамках параграфа 3.4. главы 3. Главное отличие предлагаемого подхода от рассмотренных ранее заключается в том, что измерение в нём начинается с младшего бита фазы [40]. Каждая итерация включает однократное измерение состояния контролирующего кубита. Перед измерением его состояние корректируется для учета результатов предыдущих измерений путем выполнения операции фазового сдвига $R_Z(\omega_k)$.

В первую очередь, для понимания особенностей предлагаемого подхода, необходимо определиться с нотацией рассмотрения фазы. Как было указано ранее, при описании эволюции оператором вида (59) мы будем называть фазой состояния величину ϕ , определяемую формулой (60). Поскольку в данном случае мы контролируем все параметры системы, включая время эволюции t , зная величину ϕ , мы сможем вычислить энергию интересующего нас

состояния как $E_{изм} = -2\pi\phi/t$. Для ϕ мы будем применять бинарное разложение вида $\phi = 0.\phi_1\phi_2\dots\phi_m$ (глава 3, параграф 3.4.), поскольку такая форма записи позволяет нам наглядно представлять фазу в виде последовательности m классических битов. Здесь мы также принимаем важное допущение о том, что все последующие биты фазы в такой записи являются нулевыми, т.е. $\phi_j = 0$ при $j = m + 1; m + 2\dots$

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \quad (59)$$

$$\phi = \frac{-Et}{2\pi} \quad (60)$$

Поскольку мы применяем для оценки фазы всего один кубит регистра R , очевидно, что обсуждаемая нами схема алгоритма является итерационной (глава 3, параграф 3.4.). Номер итерации в данном случае будем обозначать как k , $1 \leq k \leq m$.

На первой итерации алгоритма к регистру S применяется контролируемое преобразование вида (61). Рассмотрим, что происходит при этом с фазой квантового состояния регистра $|\psi\rangle$. При применении указанного преобразования мы, фактически, умножаем ϕ в показателе собственного значения оператора на степень двойки, на единицу меньшую числа битов в записи фазы. Поскольку экспонента является 2π -периодической функцией, все старшие биты фазы (равные 0 или 1 а нашем двоичном разложении), не будут оказывать эффекта на конечный результат. Весь указанный процесс описывается рядом выражений (62):

$$\hat{U}_1 = \left[\exp\left(-i\hat{H}_{mol}\tau\right) \right]^{2^{m-1}} \quad (61)$$

$$\begin{aligned} \hat{U}_1|\psi\rangle &= \left[\exp\left(-i\hat{H}_{mol}\tau\right) \right]^{2^{m-1}} |\psi\rangle = \left[\exp(2\pi i\phi) \right]^{2^{m-1}} |\psi\rangle = \\ &= \exp(2\pi i \times 0.\phi_1\phi_2\dots\phi_m \times 2^{m-1}) |\psi\rangle = \exp(2\pi i \times 0.\phi_m) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (62)$$

Таким образом, фаза квантового состояния регистра S после применения оператора эволюции \hat{U}_1 будет иметь вид $0.\phi_m$.

Следующим шагом в рамках первой итерации алгоритма является преобразование кубита R с помощью оператора фазового сдвига $R_Z(\omega_k)$ (рис. 9). Примем, однако, что на первой итерации угол поворота в данном операторе $\omega_1 = 0$. Наконец, после применения вентиля Адамара к кубиту R, мы можем перейти к измерению состояния регистра считывания. Учитывая все предыдущие преобразования, состояние квантового симулятора непосредственно перед считыванием, описывается функцией (63).

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \left((1 + e^{2\pi i \times 0 \cdot \phi_m}) |0\rangle + (1 - e^{2\pi i \times 0 \cdot \phi_m}) |1\rangle \right) |\psi\rangle \quad (63)$$

Из этого выражения очевидно, что вероятность обнаружения кубита R в состоянии $|0\rangle$ после измерения выражается как (64).

$$P_1 = \cos^2 [\pi(0 \cdot \phi_m)] \quad (64)$$

Поскольку фаза в нашем случае представлена в бинарной форме, из вида функции P_1 следует, что для определения бита фазы нам требуется только одно измерение. Ведь в случае, если $\phi_m = 0$, $P_1 = 1$ с абсолютной точностью, тогда как, если $\phi_m = 1$, то $P_1 = 0$.

Измерив бит фазы ϕ_m , перейдём ко второй итерации алгоритма. Оператор эволюции в данном случае будет иметь вид (65). По аналогии с предыдущими рассуждениями, можно утверждать, что фаза состояния регистра S в результате действия данного оператора окажется равной $0 \cdot \phi_{m-1} \cdot \phi_m$. Для исключения из рассмотрения уже определённого бита ϕ_m , применим оператор $R_Z(\omega_2)$, производящий вращение на угол $\omega_2 = -2\pi(0 \cdot \phi_m)$, как показано на рисунке 1. В результате, после применения вентиля Адамара к регистру R, вероятность обнаружить его в состоянии $|0\rangle$ при измерении равна (66), что также позволяет определить значение бита ϕ_{m-1} в результате единственного измерения. Все последующие биты измеряются аналогичным образом.

$$\hat{U}_2 = \left[\exp(-i\hat{H}_{mol}\tau) \right]^{2^{m-2}} \quad (65)$$

$$P_2 = \cos^2 \left[\pi(0.\phi_{m-1}) \right] \quad (66)$$

Теперь мы можем сформулировать итерационную схему данного алгоритма. На каждой из итераций k ($1 \leq k \leq m$), производится приготовления квантового состояния по методу ASP. Затем, для осуществления эволюции квантового состояния, к регистру R последовательно применяются вентили Адамара и оператор фазового сдвига $R_z(\omega_k)$, где ω_k представляет суммарный угол, полученный путём сложения всех измеренных до этого битов фазы, помноженных на соответствующие степени двойки и угловой фактор -2π . Одновременно с этим, к регистру S контролируемым образом применяется оператор эволюции вида (67). Измерение конечного состояния регистра R происходит на каждой итерации и производится методом квантовой томографии (QST). В данном контексте мы предполагаем абсолютную точность такого измерения. Как было показано выше, применение данного метода позволяет определить каждый бит фазы состояния за одно измерение, предоставляя, тем самым, мощный инструмент для квантового моделирования сложных физических систем.

$$\hat{U}_k = \left[\exp(-i\hat{H}_{mol}\tau) \right]^{2^{m-k}} \quad (67)$$

5.2.3. Оценка ошибки в A-R-IPEA.

Напомним, что в процессе построения схемы алгоритма нами было сделано нетривиальное допущение. Мы постулировали, что фаза в нашем случае может быть записана с использованием m классических битов, а значит, имеет вид $\phi = 0.\phi_1\phi_2\dots\phi_m00\dots$. Очевидно, что в случае произвольной фазы это бинарное разложение является бесконечным, а значит, фаза в общем виде может быть выражена как (68).

$$\begin{cases} \phi = \tilde{\phi} + 2^{-m} \delta \\ \tilde{\phi} = 0.\phi_1\phi_2\dots\phi_m 00\dots \\ 0 \leq \delta \leq 1 \end{cases} \quad (68)$$

В таком случае, вероятность измерить бит ϕ_m верно может быть выражена как $\cos^2(\pi\delta/2)$. Затем, если ϕ_m было определено верно, вероятность измерить следующий бит равна $\cos^2(\pi\delta/4)$. Таким образом, вероятность верного измерения каждого из битов фазы описывается формулой (69), а для всего разложения $\tilde{\phi}$ – формулой (70).

$$P_k = \cos^2(\pi 2^{k-m-1} \delta) \quad (69)$$

$$P(\delta) = \prod_{k=1}^m P_k = \frac{\sin^2(\pi\delta)}{2^{2m} \sin^2(\pi 2^{-m} \delta)} \quad (70)$$

Для $\delta \leq 0.5$ лучшей аппроксимацией на основе m значащих бит в данном случае будет разложение $\tilde{\phi}$. В случае же, если $\delta \geq 0.5$, лучшей аппроксимацией является $\tilde{\phi} + 2^{-m}$, вероятность получения которой составляет $P(1-\delta)$. Как видно из (70), вероятность получения верного разложения монотонно убывает с увеличением m . В пределе $m \rightarrow \infty$, нижняя граница оценки для вероятности извлечения лучшей аппроксимации фазы будет равна $P(1/2) = 4/\pi^2$. Учтём, что необходимая точность $1/2^m$ допускает использование обеих представленных аппроксимаций. Тогда, мы можем сказать, что представленный алгоритм позволяет измерять фазу с точностью $1/2^m$ и вероятностью ошибки $\varepsilon = 1 - 8/\pi^2$, которая не зависит от m [24].

5.3. Реализация квантовых операций

В качестве примера применения описанного выше алгоритма нами будет рассмотрен простейший случай квантовой симуляции двухатомной молекулы. В данном параграфе мы обсудим метод осуществления квантовых операций, необходимых для реализации такой симуляции.

Для начала, зададимся вопросом о размерности регистров, необходимых нам для проведения такой симуляции. Как известно, для описания состояния квантовой системы, состоящей из двух атомов, всегда можно воспользоваться оператором Гамильтона размерности 2. Очевидно также, что собственные состояния такого оператора будут представлены векторами, имеющими ту же размерность. Таким образом, мы можем заключить, что для реализации квантовой симуляции двухатомной молекулы по алгоритму A-R-IPEA необходимо иметь в своём распоряжении симулятор, состоящий из двух квантовых регистров размерности 1 (по одному кубиту в регистрах S и R).

В качестве кубитов мы предлагаем использовать два атома Rb, изолированные в оптических дипольных ловушках, образованных жестко сфокусированными лазерными пучками. В роли логических состояний кубитов $|0\rangle$ и $|1\rangle$ в данном контексте будут использоваться сверхтонкие долгоживущие подуровни основных состояний атомов [41]. Также, основываясь на предыдущем опыте исследований, мы предлагаем для реализации однокубитовых квантовых гейтов использовать двухфотонные оптические рамановские переходы между сверхтонкими подуровнями основных состояний атомов. Другим вариантом реализации таких гейтов является применение сфокусированного микроволнового излучения [28, 42].

Для описания взаимодействия двухуровневой системы с резонансным лазерным излучением будем использовать матрицу вида (71) [43].

$$R(\theta, \chi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & ie^{-i\chi} \sin \frac{\theta}{2} \\ ie^{i\chi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (71)$$

Параметры θ и χ в данном случае определяются площадью лазерного импульса и его фазой соответственно. Значения $\chi = 0$ и $\chi = \pi/2$ соответствуют вращениям кубита на угол θ вокруг осей X и Y. Поскольку для выполнения любого однокубитного вентиля достаточно уметь осуществлять X и Y вращения с добавочной произвольной фазой [5], представленная здесь

матрица в полной мере описывает все однокубитные операции в рамках нашей модели.

Значительные трудности в описанном контексте представляет выполнение двухкубитных квантовых операций с осуществлением внешнего контроля. Мы предлагаем использовать для их реализации адаптацию схемы, основанной на эффекте дипольной блокады, которая была описана в работах [43-45]. Предлагаемая схема с учётом проведённой адаптации представлена на рисунке 10.

Рассмотрим процесс осуществления контролируемых операций. Как видно из рисунка 10, квантовый гейт в данном случае состоит из двух кубитов, один из которых является контролирующим (C, Control), а второй – контролируемым (T, Target). Переходы в системе осуществляются под воздействием лазерных и микроволновых импульсов, настроенных на резонанс между соответствующими квантовыми уровнями.

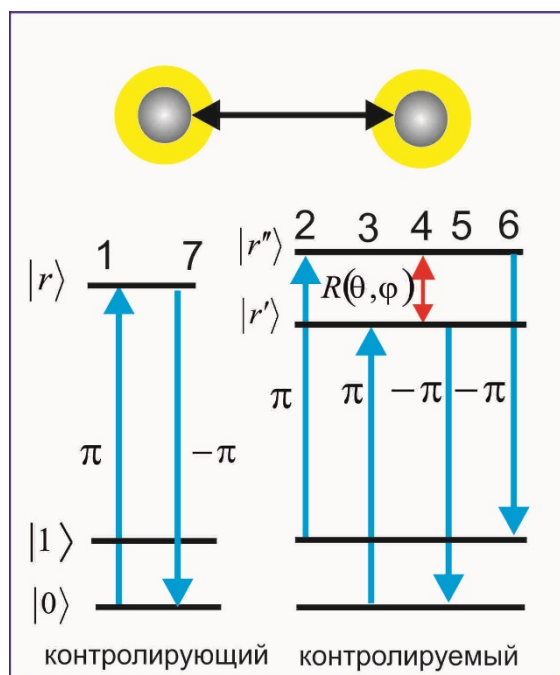


Рис. 10. Схема контролируемого вращения кубита для двух ультрахолодных атомов в оптических дипольных ловушках. Лазерные пи-импульсы 1,2,3,5,6,7 возбуждают и деовозбуждают ридберговские состояния с индивидуальной адресацией к отдельным атомам. Микроволновый импульс 4 имеет произвольную площадь и фазу [40].

Пусть изначально контролирующий атом находится в логическом состоянии $|1\rangle$. Данное состояние не является резонансным для возбуждающего

данный кубит лазерного π -импульса 1, в следствие чего атом не возбуждается в состояние $|r\rangle$. Мы можем считать, что переход $|1\rangle \rightarrow |r\rangle$ является заблокированным. Поскольку в данном случае не возникает эффекта дипольной блокады между атомами С и Т, воздействие последовательности π -импульсов 2-6 на атом Т будет выражаться преобразованием, описываемом в общем случае матрицей (71). В случае, если контролирующий атом изначально находится в состоянии $|0\rangle$, происходит его возбуждение в состояние $|r\rangle$ под воздействием π -импульса 1. Тогда, из-за возрастания размера атома, возникнет эффект дипольной блокады, исключаящий одновременное возбуждение С и Т – атомов в коллективные состояния $|rr'\rangle$ или $|r'r\rangle$, что было описано в параграфе 4.1. При этом, импульсы 2-6 не окажут на Т-атом никакого эффекта. После реализации одного из описанных сценариев, контролирующий атом вернется в исходное состояние под действием лазерного импульса 7. Отметим, что для исключения фазовых сдвигов при возбуждении и девозбуждении атомов следует выбирать частоты Раби импульсов 5, 6, 7 и 1, 2, 3 противоположными по знаку, что соответствует сдвигу фазы лазерного излучения на π (рис. 10) [40].

5.4. Моделирование молекулы водорода

Для проверки работоспособности разработанного алгоритма нами был численно смоделирован процесс проведения квантовой симуляции молекулы водорода. Оператор гамильтона этой молекулы был представлен с использованием минимального базисного набора 1s орбиталей Слэтера-Зенера STO-3G [46]. Для устранения размерностей, мы также воспользовались в записи гамильтониана атомными единицами. При выборе расстояния между атомами в молекуле равным 1.4 а.е., матрица гамильтониана имеет следующий вид (72):

$$\widehat{H}_{mol} = \begin{pmatrix} -1.8310 & 0.1813 \\ 0.1813 & -0.2537 \end{pmatrix} \quad (72)$$

В ходе адиабатического приготовления начального состояния, в качестве стартового гамильтониана \widehat{H}_{ini} была выбрана матрица Паули σ_x (73). Квантовый регистр S был первоначально приготовлен в состоянии $|\psi_0\rangle$ (74), после чего, путём варьирования гамильтониана по схеме (75) и применения итерационной модели (57) (глава 5, параграф 5.2.1), система была переведена в состояние $|\psi_{ad}\rangle$. Точность приготовления начального состояния может быть определена как $|\langle\psi_{ad}|\psi\rangle|^2$, где $|\psi\rangle$ – собственное состояние гамильтониана молекулы водорода.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (73)$$

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (74)$$

$$\widehat{H}_{ad}(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right)\sigma_x + \frac{t}{T}\widehat{H}_{mol} \quad (75)$$

Для повышения точности процесса ASP была проведена многопараметрическая оптимизация системы. В результате, были определены значения полного времени эволюции T и числа разбиений M , при которых возможно достижение максимальной точности. На рисунке 11 показана численно рассчитанная зависимость точности приготовления состояния от числа итераций алгоритма при оптимальных значениях данных параметров. Здесь время эволюции $T = 18.4$ мкс, а параметр разбиения $M = 51$. Полученная в рамках численного моделирования погрешность не превышает 10^{-6} .

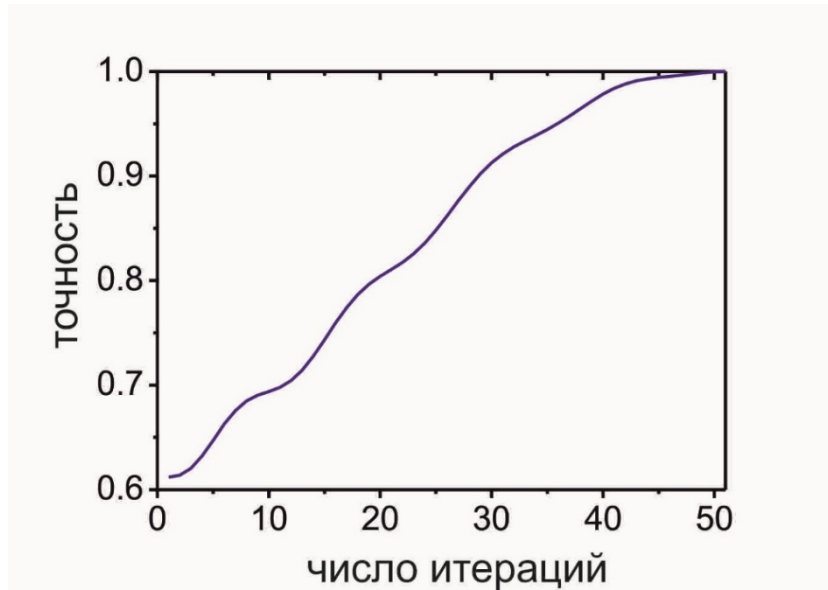


Рис. 11. Численно рассчитанная зависимость точности инициализации кубита S от числа итераций при адиабатическом приготовлении состояния.

При моделировании контролируемой эволюции квантового состояния мы использовали декомпозицию преобразования вида (76) на последовательности вращений, описываемых матрицей (71). Углы вращений, в данном случае, были численно рассчитаны для каждой итерации алгоритма. Однокубитовые вентили R_z и H , действующие в регистре R, осуществляются за счёт двухфотонных оптических рамановских переходы между сверхтонкими подуровнями основных состояний атомов Rb.

$$\hat{U}_k = \left[\exp(-i\hat{H}_{mol}\tau) \right]^{2^{m-k}} \quad (76)$$

В качестве ридберговских состояний, необходимых в рамках модели ключа, рассмотренной в предыдущем параграфе, были выбраны уровни $|r = 81S\rangle$, $|r' = 80S\rangle$ и $|r'' = 82S\rangle$, характеризующиеся сильным диполь-дипольным взаимодействием при одновременно возбуждении атомов в коллективные состояния $|rr'\rangle$ и $|rr''\rangle$. Так, для состояния $|81S, 80S\rangle$ главный вклад в энергию взаимодействия даёт резонанс Фёрстера вида $|81S, 80S\rangle \rightarrow |80P_{3/2}, 80P_{3/2}\rangle$ с энергетическим дефектом -161 МГц [47]. Для данного канала энергия взаимодействия Ван-Дер-Ваальса равна

4750 ГГц/мкм⁶. В случае реализации состояния $|81S,82S\rangle$ основным будет вклад резонанса Фёрстера $|81S,82S\rangle \rightarrow |80P_{3/2},81P_{3/2}\rangle$ с энергетическим дефектом 110 МГц. Здесь Ван-Дер-Ваальсово взаимодействие составляет -7350 ГГц/мкм⁶. Таким образом, препятствующий лазерному возбуждению энергетический сдвиг превысит 100 МГц уже при межатомном расстоянии 4 мкм и менее. Энергетический интервал между состояниями $|80S\rangle$ и $|82S\rangle$ составляет 27.9 ГГц. Двухфотонные переходы между этими состояниями могут быть реализованы с использованием микроволнового излучения, которое не будет влиять на контролирующийся атом, находящийся в состоянии $|81S\rangle$ [40].

В процессе численного моделирования были учтены конечные времена жизни ридберговских состояний $|80S\rangle$ ($\tau = 208$ мкс), $|81S\rangle$ ($\tau = 214$ мкс), и $|82S\rangle$ ($\tau = 221$ мкс), при температуре 300 К [48] и конечные энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса при заданном расстоянии между оптическими дипольными ловушками, которое после проведения соответствующей оптимизации было выбрано равным 8 мкм.

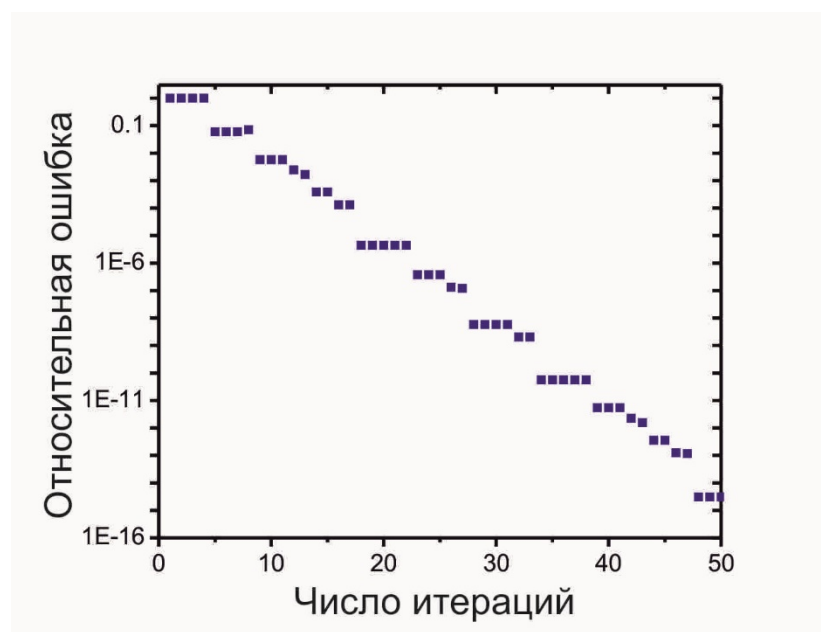


Рис. 12. Численно рассчитанная зависимость ошибки в измерении энергии основного состояния молекулы водорода от числа итераций в алгоритме оценки фазы.

При непосредственно моделировании измерения квантового бита регистра R были рассчитаны вероятности найти этот кубит в состоянии $|0\rangle$ на каждой итерации алгоритма, как это показано в параграфе 5.2.2. главы 5. Отметим, что для всех битов фазы, кроме младшего, вероятность находится вблизи 1 или 0 в процессе всего вычисления, в то время как значение младшего бита определяется с вероятностью, близкой к 0.5.

На рис. 12 представлена рассчитанная в рамках данного моделирования зависимость ошибки в определении энергии связи основного состояния атома водорода от числа итераций алгоритма A-R-IPEA. Мы определяем ошибку как $|E - E_{изм}|$, где E – собственное значение оператора \hat{H}_{mol} , а $E_{изм}$ представляет результат численного расчёта в рамках алгоритма квантового моделирования. Интересным является ступенчатый характер данной зависимости. Подобное поведение объясняется тем, что увеличение точности в алгоритме происходит в момент, когда измеренный значащий бит фазы оказывается равным единице, в следствие чего вращение R_z становится результативным.

Учет времён жизни ридберговских уровней и энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса в контексте проведённого нами численного эксперимента не приводит к ухудшению точности расчета, которая, согласно приведённым ранее оценкам, определяется только числом итераций алгоритма. Как видно из рисунка 12, относительная ошибка в проведённом моделировании не превышает 10^{-14} при 50 итерациях алгоритма. Стоит, однако, отметить, что в реальном эксперименте на значение точности может влиять множество внешних параметров, таких как ширина линий лазерного излучения, конечные времена когерентности и времена жизни промежуточных состояний в двухфотонных процессах, а также движение атомов и присутствие паразитных полей. Основным же регулирующим фактором в любом реальном эксперименте станет конечная точность квантовых вентилях.

Интересная особенность полученных результатов заключается в том, что чувствительность алгоритма к ошибкам при выполнении двухкубитных

вращений имеет пороговый характер. Это связано с дискретностью измеренного состояния кубита при каждой итерации. При вероятности найти кубит в состоянии $|0\rangle$, превышающей 0,5 и не достигающей 1, при единственном измерении он может быть обнаружен в состоянии $|1\rangle$, что приведет к вычислительной ошибке. Конечное время жизни ридберговских атомов и конечные энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса приводят к уменьшению вероятности правильного измерения состояния кубита. В наших расчетах при расстоянии между атомами 8 мкм вероятность ошибочного измерения состояния отдельного бита не превышает 2% (кроме трех младших битов). Такие ошибки могут быть легко устранены за счет нескольких дополнительных измерений на каждой итерации [40].

6. Резонансы Фёрстера в квантовых симуляциях

В предыдущей главе нами была продемонстрирована численная реализация предлагаемого алгоритма квантовой симуляции. В качестве простейшей модели для исследования была выбрана молекула водорода. В результате моделирования реализации метода A-R-IPEA в двухкубитном квантовом симуляторе, нам удалось осуществить симуляцию H_2 с высокой точностью, добившись минимизации ошибки в определении энергии основного состояния молекулы (ошибка составила $\sim 10^{-15}$).

Отметим, однако, что возможности применения предлагаемого нами метода симуляции не ограничиваются только моделированием двухатомных систем. Как было показано в параграфах части 5.2 главы 5, алгоритм A-R-IPEA в общем случае предназначен для определения энергии любой квантовой системы, собственное состояние которой может быть записано в регистр S . Таким образом, данный метод, в частности, подходит для проведения симуляций многоатомных молекул (число атомов $n > 2$).

Основным ограничением, накладываемым на такие симуляции, становится высокая сложность их практической реализации с использованием квантовых гейтов малой размерности. Хотя любую квантовую схему можно представить с помощью полного набора квантовых вентилях, состоящего из однокубитных операций и операции CNOT, данное представление часто оказывается практически бесполезным в случае регистров высокой размерности ввиду невероятно большого количества необходимых для его построения квантовых гейтов. Помимо технической сложности реализации, в данном случае большую роль также играет время протекания процесса, которое часто превышает время когерентности квантового регистра. Также, разумеется, нельзя забывать про конечность точности отдельных квантовых гейтов. Поскольку даже для систем, состоящих всего из трёх кубитов, число применяемых для выполнения симуляции квантовых операций может

превышать 10^3 , очевидно, что даже при очень высокой точности каждого ключа ($\sim 99\%$) конечная точность симуляции всё равно будет значительно снижена [5].

Для того, чтобы существенно сократить количество квантовых гейтов при реализации схем многокубитных симуляторов, мы предлагаем использовать вентили Тоффоли, основанные на трёхчастичных резонансах Фёрстера в атомах Rb, содержащихся в массивах оптических дипольных ловушек [5, 37]. В данной главе будет приведено исследование резонансной схемы, рассматриваемой нами в качестве потенциальной основы для построения таких вентиляей.

6.1. Трёхчастичные резонансные схемы

Ранее в нашей лаборатории уже были исследованы различные схемы трёхчастичных резонансов. В качестве примера, можно рассмотреть схему вида (77), приведённую в работе [33] (Эта схема уже обсуждалась в параграфе 4.4).

$$3 \times nP_{3/2}(|M\rangle) \xrightarrow{I} nS_{1/2} + (n+1)S_{1/2} + nP_{3/2}(|M\rangle) \xrightarrow{II} nS_{1/2} + (n+1)S_{1/2} + nP_{3/2}(|M^*\rangle) \quad (77)$$

Здесь трёхчастичный резонанс представлен последовательностью двухчастичных переходов. Переход I, в данном случае, представляет классический пример двухчастичного резонанса, которые были подробно описаны в параграфе 4.3. В свою очередь, переход II, в процессе которого меняется модуль проекции суммарного момента третьего атома $|M\rangle$, реализуется в результате нерезонансного обменного взаимодействия между S - и P -состояниями двух ридберговских атомов. Поскольку указанные переходы реализуются одновременно, мы можем сказать, что трёхчастичные взаимодействия имеют борромееановский характер.

Несмотря на то, что трёхчастичные резонансы вида (77) характеризуются необходимой для осуществления гейта Тоффоли фазовой динамикой, что было показано в работе [33], они обладают недостатками, не позволяющими применить их для реализации многокубитных квантовых операций. Первым недостатком является близость резонансных полей двух- и трёхчастичных резонансов, в связи с чем контрастность трёхчастичного перехода нарушается. Также, в силу специфических значений поляризуемостей и величин квантовых дефектов для ридберговских состояний рубидия nP и nS , достижение необходимого для осуществления данного резонанса пересечения коллективных уровней энергии всех трёх атомов в случае их инициализации в полностью идентичные квантовые состояния, возможно только при значении главного квантового числа $n \leq 38$. При этом, достижение достаточной точности квантовых операций возможно только при использовании в схемах гейтов состояний с более высокими значениями n , имеющих большие времена жизни и дипольные моменты [49].

$$\begin{aligned}
 & \left| nP_{3/2}(3/2); (n+1)P_{3/2}(3/2); (n+1)P_{3/2}(-3/2) \right\rangle \rightarrow \\
 & \rightarrow \left| nS_{1/2}(1/2); (n+1)P_{3/2}(3/2); (n+2)S_{1/2}(-1/2) \right\rangle \rightarrow \\
 & \rightarrow \left| nS_{1/2}(1/2); (n+2)S_{1/2}(1/2); (n+1)P_{3/2}(1/2) \right\rangle
 \end{aligned} \tag{78}$$

Для решения описанных затруднений в работе [37] была предложена схема (78). Однако, как было выяснено в ходе анализа теоретических расчётов, её практическая реализация также является сложной задачей, поскольку инициализация квантового регистра в состояния со строго определёнными и различными по знаку значениями полного момента, а также различными значениями n – крайне трудновыполнимый и затратный процесс. Таким образом, одной из целей данной работы является поиск трёхчастичных резонансов для ридберговских атомов Rb в состояниях nP и nS , имеющих простую структуру штарковских подуровней и пригодных для реализации трёхкубитных квантовых вентиляей.

6.2. Резонансы Фёрстера нового типа

Для компенсации описанных в рамках предыдущего параграфа недостатков рассмотренных ранее трёхчастичных взаимодействий нами был проведён детальный теоретический анализ возможных моделей реализации резонансов Фёрстера, настраиваемых электрическим полем в ридберговских системах с высокими значениями главного квантового числа и значениями орбитального момента P и S . В результате была предложена схема резонансов вида (79), которая может быть реализована для произвольных начальных ридберговских $nP_{3/2}$ состояний [49].

$$3 \times nP_{3/2} \rightarrow nS_{1/2} + (n+1)S_{1/2} + nP_{1/2} \quad (79)$$

Для иллюстрации рассматриваемого резонансного взаимодействия приведём численно смоделированную нами штарковскую диаграмму состояний атомов рубидия в окрестности состояния $70P$ (рис. 13 (б)), а также полученный из данной диаграммы вид зависимости энергий коллективных уровней трёх атомов от внешнего поля (рис. 13 (б)). Трёхчастичным резонансам нового типа здесь соответствуют пересечения этих уровней, обозначенные цифрами 1-4. Полученная картина резонансов ярко контрастирует со спектром рассмотренной ранее схемы (77), в котором, согласно работе [33], наблюдались также и двухчастичные резонансы. Наличие в данном случае только трёхчастичных переходов связано с тем, что третий атом здесь не переходит в состояние с новой проекцией момента M , а меняет свой полный момент на $J = 1/2$, в связи с чем его новое состояние не имеет штарковской структуры. Таким образом, очевидно, что данная схема обладает простой структурой штарковских подуровней при высоких значениях n . В связи с тем, что начальные состояния атомов в данном случае одинаковы, мы можем с уверенностью утверждать, что рассматриваемые резонансы полностью избавлены от недостатков трёхчастичных схем, исследованных ранее.

Описанный резонанс также интересен высоким значением отстройки промежуточных уровней (около 200 МГц). В связи с этим, можно было бы ожидать его ослабление относительно предыдущих рассмотренных резонансов. Данный эффект, однако, полностью компенсируется переходом к более высоким энергетическим уровням. Так, для рассмотренных в рамках модели (77) уровней $37P$ значение радиальной части дипольного момента перехода составляет около 1300 а.е., тогда как в случае работы с высокоэнергетичными начальными состояниями $70P$, дипольные моменты переходов в соседние состояния $70S$ и $72S$ составят около 5000 а.е..

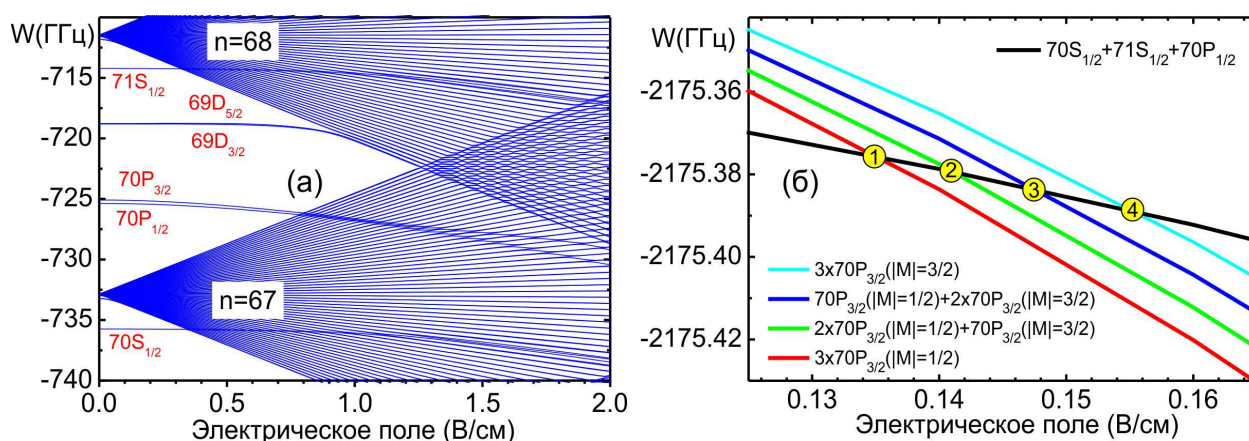


Рис. 13. (а) Расчетная штарковская диаграмма ридберговских состояний атомов Rb вблизи состояния $70P$; (б) Расчетная штарковская структура резонанса Фёрстера нового типа $3 \times 37P_{3/2} \rightarrow 37S_{1/2} + 38S_{1/2} + 37P_{1/2}$ для трех ридберговских атомов Rb. Пересечения коллективных состояний (обозначены цифрами) соответствуют только трехчастичным резонансам Фёрстера, когда все три атома изменяют свои состояния, а двухчастичные резонансы отсутствуют [49].

6.3. Численное моделирование резонансов

В рамках данного исследования нами были численно смоделированы трёхчастичные резонансы Фёрстера вида (79). Этот параграф посвящён последовательному описанию этапов проведённого моделирования. Также здесь будут рассмотрены физические основы описываемых взаимодействий и приведены некоторые промежуточные результаты. Моделирование

производилось с использованием программного обеспечения Mathematica, выпускаемого компанией Wolfram Research.

В ходе проведения численного эксперимента, нами были исследованы трёхчастичные резонансы в ансамблях ридберговских атомов со значениями главного квантового числа начального состояния $n \in [50, 60]$. Пространственная конфигурация атомов была выбрана линейной для получения высококонтрастных спектров за счёт упрощения взаимодействия. Все три атома располагались на одинаковом расстоянии R друг от друга вдоль оси квантования Z . Описание свойств резонансов и полученных экспериментальных результатов будет приведено в следующем параграфе.

Первым шагом в рамках решения задачи численного моделирования трёхчастичных резонансов стало построение штарковских диаграмм атомов рубидия. Для описания полного набора штарковских подуровней был использован гамильтониан взаимодействия вида (80). В данном случае диагональные элементы E_1^{ii} были вычислены с учётом квантового дефекта Δ_i для i -го уровня энергии. Для учёта взаимодействия с внешним электрическим полем был использован оператор $\hat{V} = -\overline{dE}$, рассматриваемый в виде поправки второго порядка по теории возмущений к гамильтониану атома \hat{H}_0 . Значение электрического поля варьировалось в диапазоне от 0 до 3 В/см.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \begin{pmatrix} E_1 & \dots & E_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & E_2 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & E_1 \end{pmatrix} \quad (80)$$

$$E_1^{ii} = \frac{-Ry}{(n_{ii} - \Delta_i)^2} \quad (81)$$

$$E_2^{ij} = \langle \Psi_i | \hat{V} | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_i | -\overline{dE} | \Psi_j \rangle \quad (82)$$

В ходе анализа полученных в результате моделирования штарковских диаграмм нами были определены приблизительные значения резонансных полей в трёхчастичных системах, необходимые для упрощения последующих

расчётов. Следующим этапом стало непосредственное моделирование трёхчастичных резонансов в системе из трёх взаимодействующих атомов, с учётом влияния внешнего электрического поля, а также диполь-дипольного взаимодействия между коллективными уровнями. При формировании базиса коллективных состояний атомов нами были учтены все магнитные подуровни состояний $|nS_{1/2}\rangle$, $|(n+1)S_{1/2}\rangle$, $|nP_{1/2}\rangle$, $|nP_{3/2}\rangle$. Для оптимизации процесса вычислений, мы ограничивались рассмотрением состояний с квантовым дефектом менее 2 ГГц. Количество выбранных состояний для $n = 50, 60$ составило 352 и 360 соответственно.

Учёт сдвига коллективных уровней энергии вследствие наличия в данной системе эффекта Штарка требует также определения поляризуемостей описанных состояний. Для их вычисления использовался метод последовательной полиномиальной аппроксимации значений энергий для уровней атомов в переменных полях, полученных нами в результате построения штарковских диаграмм. Найденные значения поляризуемостей для состояний с $n = 50, 60$ представлены в таблице 2.

Опишем теперь полную физическую модель трёхчастичного взаимодействия, использованную нами в рамках численного эксперимента. Гамильтониан взаимодействия в данном случае представляется матрицей (83), записанной в базисе коллективных состояний атомов. Его диагональные элементы, помимо энергий соответствующих коллективных состояний, вычисленных с учётом квантового дефекта, также содержат члены, зависящие от внешнего поля, необходимые для учёта штарковского сдвига уровней. В качестве оси квантования Z мы выбираем направление электрического поля E в нашей системе.

Состояние атома Rb	Поляризуемость α , ГГц/(В/см) ²
$ 50S_{1/2}(1/2)\rangle$	-25.6
$ 51S_{1/2}(1/2)\rangle$	-29.5
$ 50P_{1/2}(1/2)\rangle$	-146.75
$ 50P_{3/2}(3/2)\rangle$	-148.59
$ 50P_{3/2}(1/2)\rangle$	-173.81
$ 60S_{1/2}(1/2)\rangle$	-91.55
$ 61S_{1/2}(1/2)\rangle$	-103
$ 60P_{1/2}(1/2)\rangle$	-550.34
$ 60P_{3/2}(3/2)\rangle$	-559.18
$ 60P_{3/2}(1/2)\rangle$	-647.25

Табл. 2. Поляризуемости состояний атомов Rb

Для описания диполь-дипольного взаимодействия между коллективными трёхчастичными состояниями был использован оператор V_{dd} , представленный в виде (85). Величина ϵ_0 здесь – это константа диэлектрической проницаемости, e - заряд электрона, а \mathbf{a} и \mathbf{b} – радиус-векторы высоковозбужденных электронов взаимодействующих атомов. Отметим, что вычисление матричных элементов данного оператора уже было подробно разобрано в рамках параграфа 4.3. Напомним, однако, что, согласно работе [36], данный оператор ограничивает число возможных переходов согласно правилу отбора $\Delta M = 0$, где M есть проекция полного момента коллективного состояния на направление оси квантования Z .

$$\widehat{H} = \begin{pmatrix} E_{pol} & \dots & E_{dd} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & E_{dd} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & E_{pol} \end{pmatrix} \quad (83)$$

$$\begin{cases} E_{pol}^{ii} = \langle \Psi_i | \widehat{V}_{pol}^{ii} | \Psi_i \rangle \\ E_{dd}^{ij} = \langle \Psi_i | \widehat{V}_{dd} | \Psi_j \rangle \end{cases} \quad (84)$$

$$\begin{cases} V_{pol}^{ii} = \sum_{j=1}^3 2\pi \left(\alpha_j^{ii} E^2 - \frac{Ry}{(n_j^{ii} - \Delta_j^{ii})^2} \right) \\ V_{dd} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} - 3a_z b_z) = -\frac{\sqrt{6}e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \sum_{q=-1}^1 C_{1q1-q}^{20} a_q b_{-q} \end{cases} \quad (85)$$

В рамках приведённой физической модели нами были составлены системы уравнений на коэффициенты волновых функций для всех смоделированных резонансов (86). Конечным этапом моделирования является разрешение этих систем.

$$\begin{cases} \Psi = \sum_j C_j \psi_j e^{-iE_j t/\hbar} \\ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \end{cases} \quad (86)$$

6.4. Результаты моделирования резонансов

Как было сказано выше, в ходе данной работы нами были численно смоделированы и исследованы трёхчастичные резонансы Фёрстера вида (79) при значении главного квантового числа начального состояния $n \in [50, 60]$. Приведённые здесь результаты будут относиться к значениям n , соответствующим границам указанного промежутка.

Результаты для $n=50$

Начнём описание экспериментальных результатов с рассмотрения трёхчастичных резонансов, реализующихся при значении $n = 50$ для начального состояния атомов Rb. Данные резонансы имеют вид (87). Как уже было сказано ранее, пространственная конфигурация системы линейна: все три атома расположены на расстоянии R друг от друга вдоль оси квантования Z , совпадающей с направлением внешнего электрического поля. Подчеркнём, что значения расстояния и времени взаимодействия сильно влияют на контрастность резонансов, в связи с чем во всех произведённых экспериментах они выбирались путём проведения многопараметрической

оптимизации, с учётом возможностей имеющейся в наличии вычислительной техники.

$$3 \times 50P_{3/2} \rightarrow 50S_{1/2} + 51S_{1/2} + 50P_{1/2} \quad (87)$$

В ходе исследования штарковских диаграмм атомов рубидия были сделаны начальные оценки для резонансных полей без учёта смещения за счёт межатомных взаимодействий (табл. 3). Изображение положений резонансов в виде пересечения коллективных невозмущённых уровней энергии во внешнем электрическом поле приведено на рисунке 14.

Начальное состояние системы	Электрическое поле E , В/см
$ 50P_{3/2}(M =1/2)\rangle^{\otimes 3}$	1.2284
$ 50P_{3/2}(M =3/2)\rangle \otimes 50P_{3/2}(M =1/2)\rangle^{\otimes 2}$	1.2835
$ 50P_{3/2}(M =3/2)\rangle^{\otimes 2} \otimes 50P_{3/2}(M =1/2)\rangle$	1.3455
$ 50P_{3/2}(M =3/2)\rangle^{\otimes 3}$	1.4184

Табл. 3. Значения напряжённости полей в трёхчастичных резонансах вида (87) для начальных состояний системы с разными значениями $|M|$ атомов.

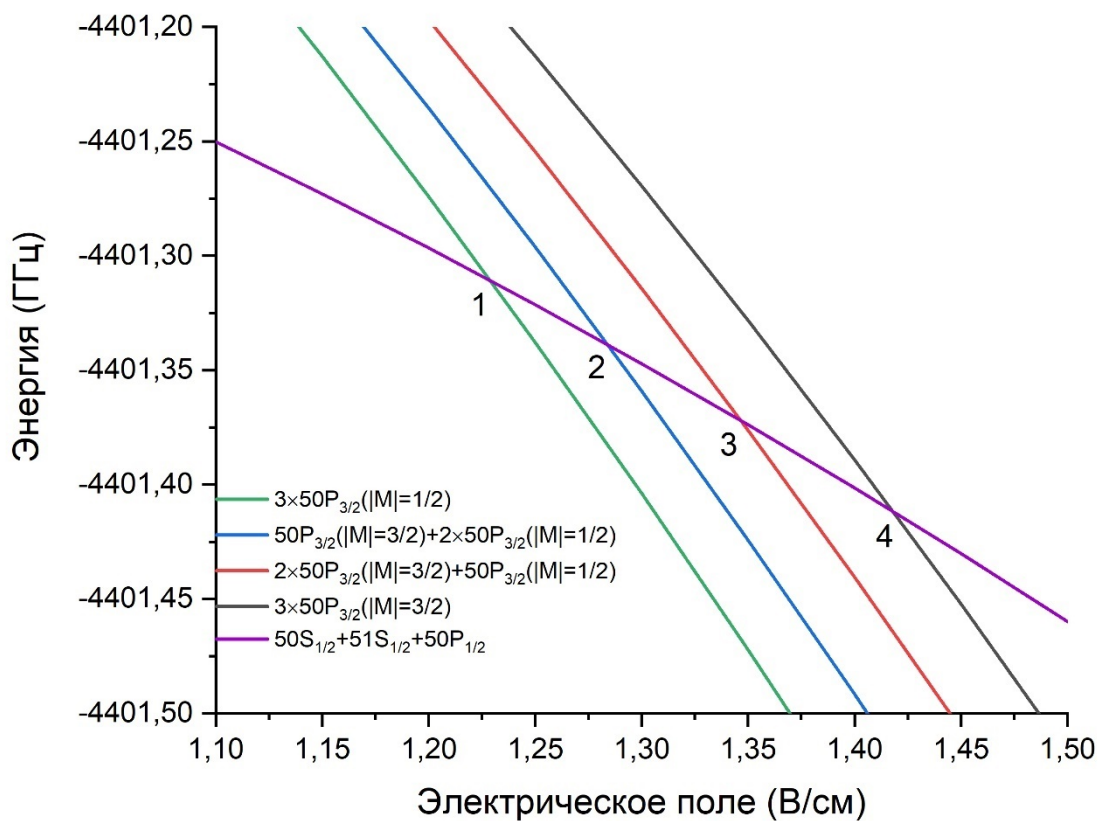


Рис. 14. Расчетная штарковская структура резонансов Фёрстера нового типа $3 \times 50P_{3/2} \rightarrow 50S_{1/2} + 51S_{1/2} + 50P_{1/2}$ для трех ридберговских атомов Rb в начальных состояниях, отличающихся проекциями полных моментов атомов $|M|$ на ось квантования. Пересечения коллективных состояний (обозначены цифрами) соответствуют только трёхчастичным резонансам Фёрстера, когда все три атома изменяют свои состояния.

Как можно видеть из рис. 14, в рамках представленной нами схемы (87) могут наблюдаться четыре трёхчастичных резонанса, соответствующие различным начальным состояниям системы частиц. Поскольку все трёхчастичные переходы (1-4) идентичны с физической точки зрения, и отличаются только значениями резонансных полей, в дальнейшем мы сконцентрируемся на описании перехода 4 (88).

$$3 \times 50P_{3/2}(|M|=3/2) \rightarrow 50S_{1/2} + 51S_{1/2} + 50P_{1/2} \quad (88)$$

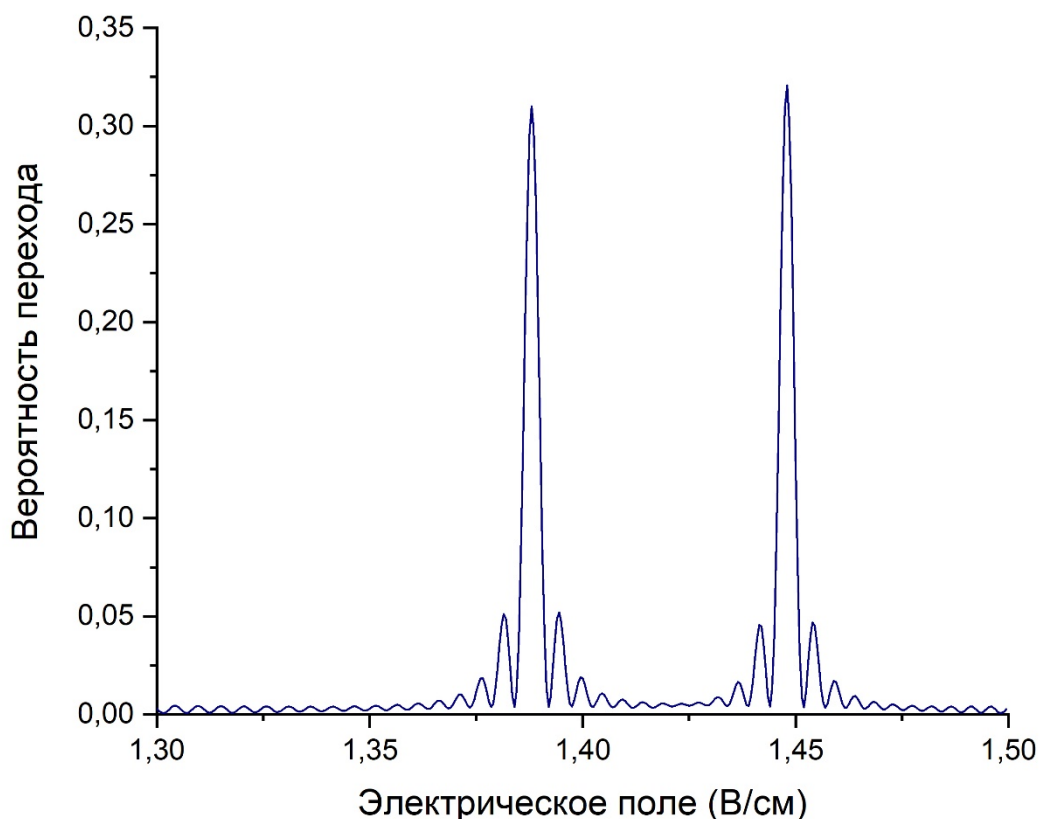


Рис. 15. Численно рассчитанные трёхчастичные резонансы нового типа $3 \times 50P_{3/2} (|M| = 3/2) \rightarrow 50S_{1/2} + 51S_{1/2} + 50P_{1/2}$ в виде зависимости вероятности переходов от электрического поля. Амплитуды левого ($E_1 = 1.38803$ В/см) и правого ($E_2 = 1.44794$ В/см) пиков равны 0.31593 и 0.32701. Контрастность пиков составляет 99.15%.

На рисунке 15 представлен вид трёхчастичных резонансов (88), полученный путём непосредственного численного моделирования в рамках описанной ранее физической модели при расстоянии между атомами $R = 4.5$ мкм и времени взаимодействия $t = 0.3$ мкс. При моделировании были учтены всегда резонансные обменные взаимодействия между S - и P -состояниями атомов, а также промежуточные нерезонансные взаимодействия, приводящие к штарковскому сдвигу уровней. В результате описанных взаимодействий резонанс испытывает динамический сдвиг, в связи с чем значение резонансного поля меняется относительно значения, представленного в

таблице 3. Необходимо также учесть, что в реальных ридберговских атомах также наблюдается зеемановская структура уровней, приводящая к наличию различных каналов взаимодействия с различными матричными элементами. Таким образом, мы можем ожидать появления не одиночных резонансов, а групп отдельных пиков, наблюдающихся в близких значениях электрического поля вследствие эффекта Ауслера-Таунса. Если различие достаточно велико, можно работать с отдельными каналами взаимодействия. Путем выбора пространственной конфигурации трех атомов некоторые каналы могут быть подавлены. В случае выбора фиксированной линейной конфигурации мы ожидаем увидеть только два хорошо разрешенных резонанса Фёрстера, соответствующих двум разным каналам взаимодействия [49]. Именно эта картина и наблюдается в результате проведенного численного эксперимента, где для левого и правого пиков значения резонансных полей равны соответственно 1.38803 и 1.44794 В/см. Амплитуды резонансов соответствуют расчётным ($\sim 1/3$), а их ширина в пересчёте на шкалу частот соответствует Фурье-ширине импульса взаимодействия.

Необходимо также учесть, что в случае строгой пространственной фиксации атомов должно демонстрироваться возникновение когерентных осцилляций населённостей при выборе внешнего поля в значении, близком к резонансному. На рисунке 16 приведена картина таких осцилляций при настройке на правый резонанс. Частота осцилляций в данном случае соответствует выбранному каналу взаимодействия.

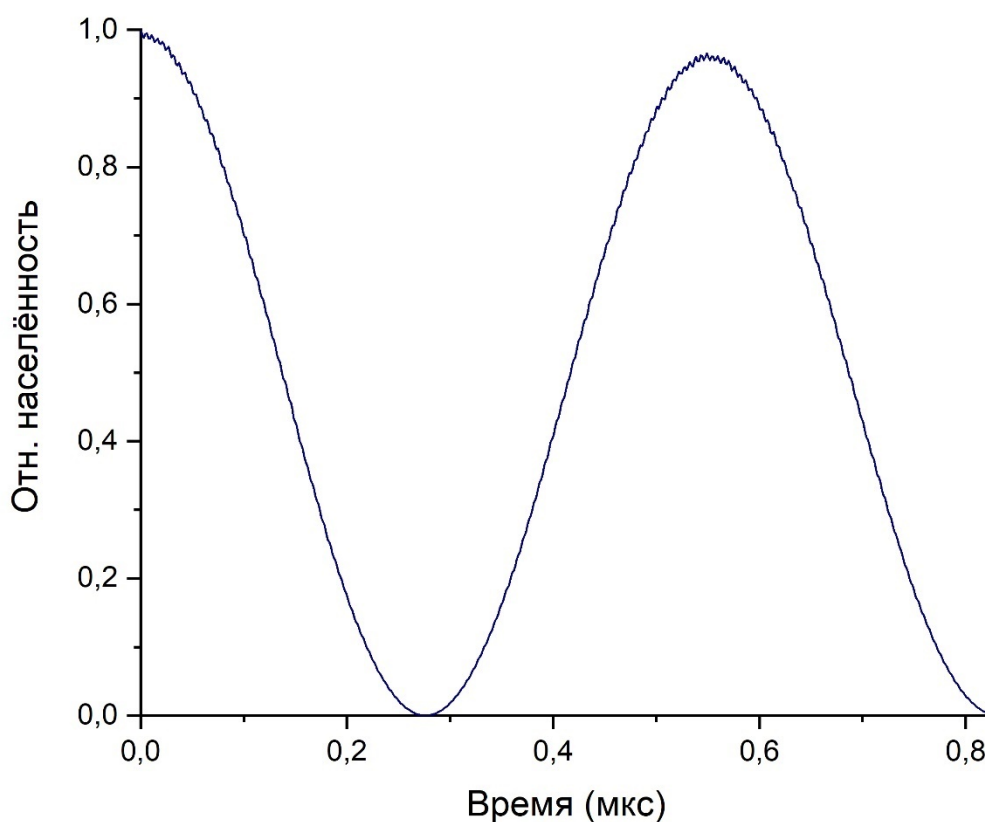


Рис. 16. Численно рассчитанные осцилляции населённости начального состояния в трёхчастичном резонансе $3 \times 50P_{3/2} (|M|=3/2) \rightarrow 50S_{1/2} + 51S_{1/2} + 50P_{1/2}$, соответствующем правому пику рис.15. Амплитуда осцилляций во втором максимуме ($t = 0.55$ мкс) составляет 0.963. Контрастность осцилляций составляет 95.28%.

Результаты для $n=60$:

Ниже будут приведены аналогичные результаты, полученные при моделировании трёхчастичных резонансов вида (89) в случае линейной конфигурации атомов. Данные результаты получены в рамках той же физической модели и с учётом тех же допущений, что и ранее описанные результаты для случая $n = 50$, и приводятся здесь для иллюстрации легитимности рассмотренного описания. Как и следовало ожидать, в данном случае резонансы наблюдаются при меньших значениях электрического поля,

что значительно усложняет точную настройку на резонанс, и, как следствие, несколько уменьшает полученную контрастность осцилляций населённости.

$$3 \times 60P_{3/2} \rightarrow 60S_{1/2} + 61S_{1/2} + 60P_{1/2} \quad (89)$$

Начальное состояние системы	Электрическое поле E , В/см
$ 60P_{3/2}(M =1/2)\rangle^{\otimes 3}$	0.3799
$ 60P_{3/2}(M =3/2)\rangle \otimes 60P_{3/2}(M =1/2)\rangle^{\otimes 2}$	0.3974
$ 60P_{3/2}(M =3/2)\rangle^{\otimes 2} \otimes 60P_{3/2}(M =1/2)\rangle$	0.4161
$ 60P_{3/2}(M =3/2)\rangle^{\otimes 3}$	0.4380

Табл. 4. Значения напряжённости полей в трёхчастичных резонансах вида (89) для начальных состояний системы с разными значениями $|M|$ атомов.

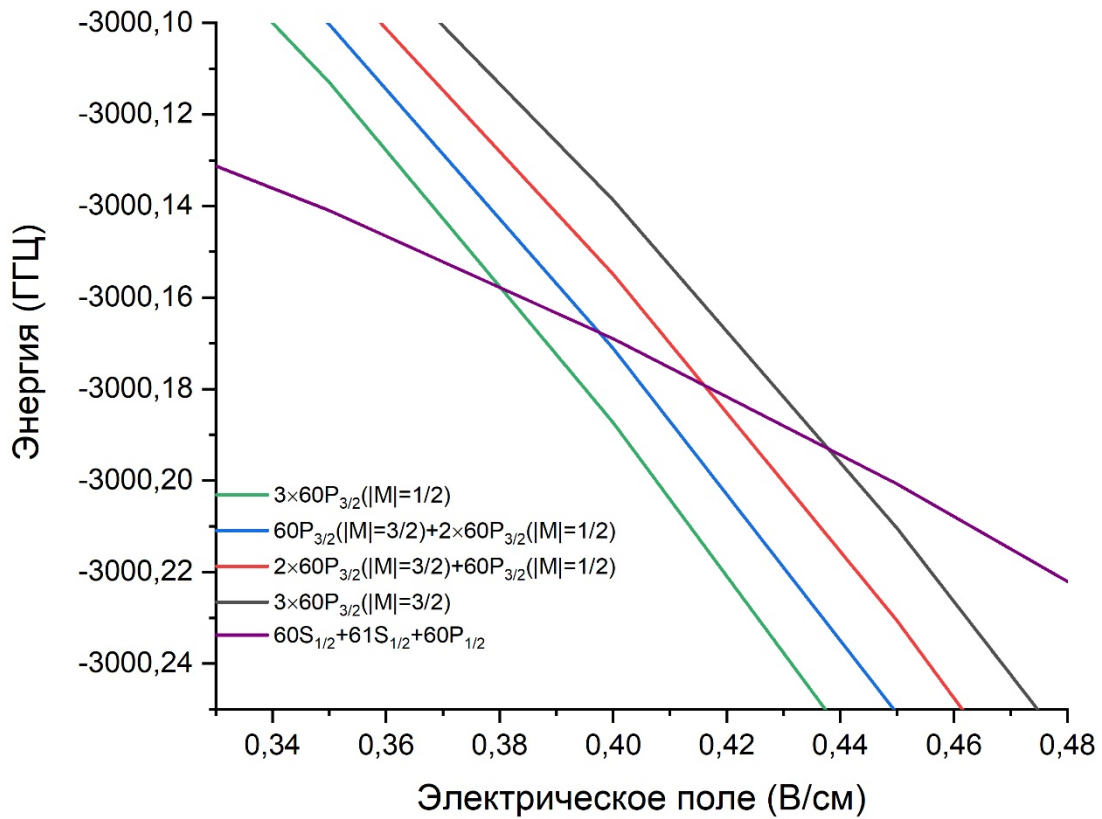


Рис. 17. Расчетная штарковская структура резонансов Фёрстера нового типа $3 \times 60P_{3/2} \rightarrow 60S_{1/2} + 61S_{1/2} + 60P_{1/2}$ для трех ридберговских атомов Rb в начальных состояниях, отличающихся проекциями полных моментов атомов $|M|$ на ось квантования.

Пересечения коллективных состояний (обозначены цифрами) соответствуют только трехчастичным резонансам Фёрстера, когда все три атома изменяют свои состояния.

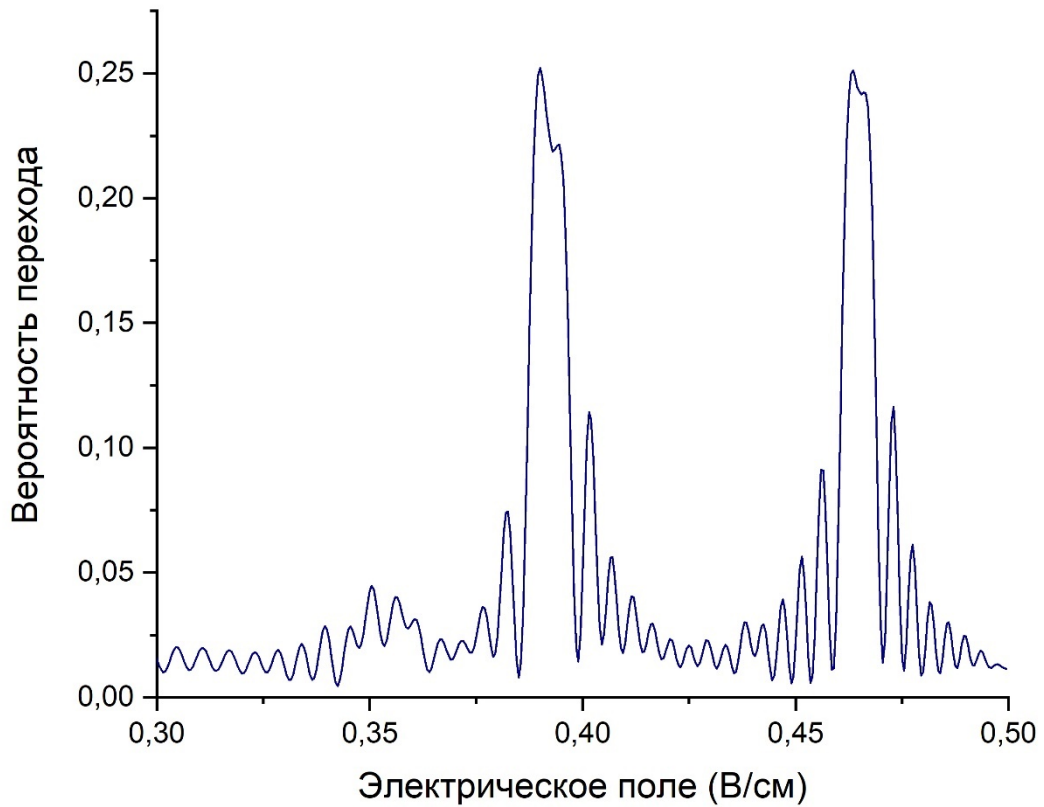


Рис. 18. Численно рассчитанные трёхчастичные резонансы нового типа $3 \times 60P_{3/2} (|M| = 3/2) \rightarrow 60S_{1/2} + 61S_{1/2} + 60P_{1/2}$ в виде зависимости вероятности переходов от электрического поля. Амплитуды левого ($E_1 = 0.39024$ В/см) и правого ($E_2 = 0.46342$ В/см) пиков равны 0,25274 и 0,25188. Контрастность пиков составляет 91,3%. Расстояние между атомами $R = 5.21$ мкм, время взаимодействия $t = 0.3$ мкс.

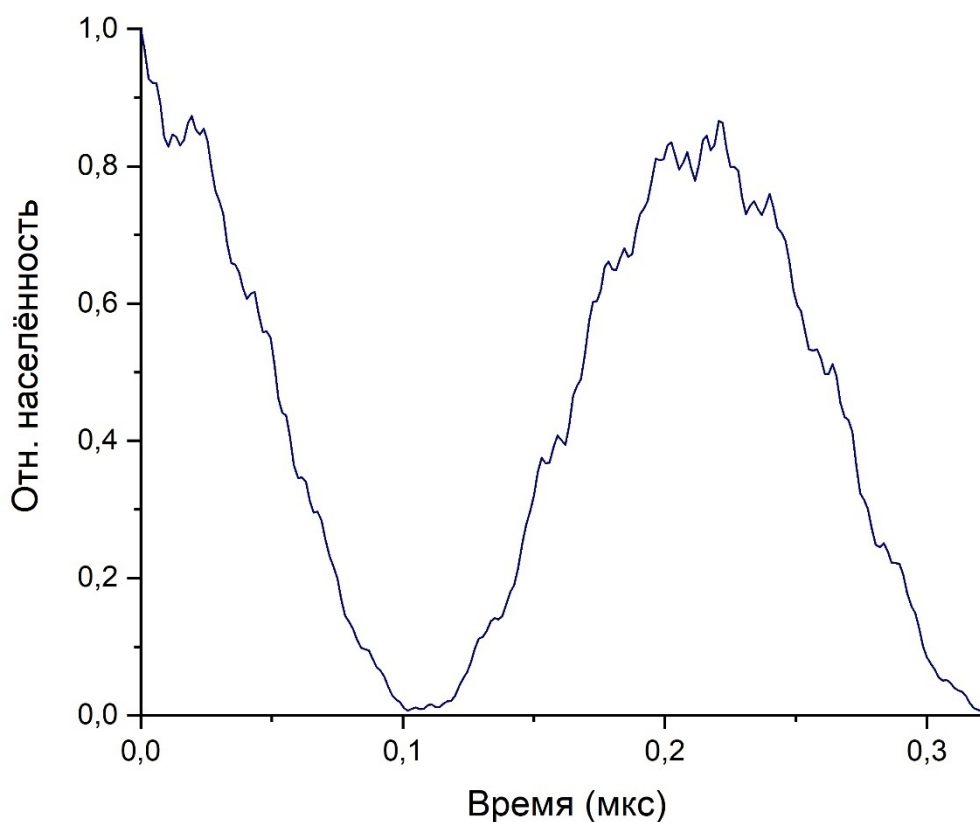


Рис. 19. Численно рассчитанные осцилляции населённости начального состояния в трёхчастичном резонансе $3 \times 50P_{3/2} (|M| = 3/2) \rightarrow 50S_{1/2} + 51S_{1/2} + 50P_{1/2}$, соответствующем правому пику рис.18. Амплитуда осцилляций во втором максимуме ($t = 0.22$ мкс) составляет 0.867. Контрастность осцилляций составляет 83.9%.

6.5. Обсуждение полученных результатов

Проанализируем спектры трёхчастичных резонансов Фёрстера, полученные нами в рамках численного моделирования. Рассматривая зависимость контрастности резонансов от параметров системы, можно прийти к заключению, что пики спектров характеризуются высокой чувствительностью к межатомным расстояниям, демонстрируя существенное уширение при достижении критических значений (~ 4 мкм). При этом каналы

взаимодействий теряют различимость, что приводит к потере когерентности в системе, и, как следствие, снижению амплитуды осцилляций населённостей при высоких энергиях взаимодействия. Таким образом, экспериментальные условия для наблюдения резонансов нового типа должны быть соответствующим образом адаптированы; в качестве варианта возможной реализации мы предлагаем выполнять их с одиночными атомами в пространственно разнесённых оптических дипольных ловушках с обеспечением наиболее жёсткой фиксации каждого атома, как это было сделано в работе [50]. Мы также можем отметить, что для наблюдения узких трёхчастичных резонансов необходимо обеспечение крайне тонкой настройки электрического поля (с контролем в пределах 1 мВ/см), резонансные значения которого для высоких ридберговских уровней быстро убывают.

Обратимся теперь к основной задаче, поставленной нами в начале данной главы. Как мы помним, выбор новой схемы трёхчастичных резонансов был обусловлен её пригодностью для реализации схем трёхкубитных вентиляей. Покажем преимущества данной схемы на примере резонанса (90).

$$3 \times 50P_{3/2} (|M| = 3/2) \rightarrow 50S_{1/2} + 51S_{1/2} + 50P_{1/2} \quad (90)$$

В ходе проведения расчётов нами было продемонстрировано, что при соблюдении строгой пространственной локализации и в отсутствие существенных шумов внешнего поля при реализации трёхчастичного резонанса Фёрстера реализуются высококогерентные осцилляции населённостей между коллективными уровнями трёхчастичной системы. Как видно из рисунка 15, в спектре имеется два хорошо разрешенных трёхчастичных пика, реализующихся при значениях электрического поля 1.38803 и 1.44794 В/см. При осуществлении точной настройки на пик (точность ~ 0.1 мВ/см) наблюдаются когерентные резонансные осцилляции населённостей с амплитудой 96.3% и контрастной чистотой 95.28%. Как было показано в работе [37], наличие полноамплитудных высококонтрастных осцилляций населённостей позволяет рассматривать трёхчастичные

резонансы в качестве основы для трёхчастичных квантовых операций. Также важным фактором является высокая изолированность пиков ($\Delta E \sim 60$ мВ/см), что уменьшает вероятность их перекрывания и облегчает настройку резонансного поля при экспериментальной реализации.

7. Заключение

Высокая потребность современной науки в инструментах для моделирования взаимодействий в сложных физических системах мотивирует исследовательские группы из всех стран мира заниматься разработкой квантовых симуляторов. Активно развиваются направления реализации цифровых и аналоговых симуляций с использованием холодных ионов [13], полярных молекул [51], сверхпроводящих кубитов [52] и ЯМР-кубитов [38].

Данная работа посвящена разработке универсального алгоритма квантовой симуляции сложных молекулярных систем и схемы реализации данного алгоритма с использованием квантовых регистров на основе ультрахолодных атомов в массивах оптических дипольных ловушек. Под универсальностью здесь понимается возможность использования алгоритма для осуществления симуляций любых соединений, безотносительно их сложности. В ходе работы также был проведён подробный анализ существующих алгоритмов квантовой симуляции, а также схем реализации многокубитных операций с использованием ридберговских атомов.

В результате работы была представлена схема универсального квантового алгоритма A-R-IPEA, основанная на итерационной оценке фазы и адиабатическом приготовлении квантового состояния. Ключевой особенностью предлагаемой схемы является тот факт, что точность итогового моделирования в ней зависит только от числа итераций и не имеет каких-либо физических ограничений. Таким образом, при физической реализации алгоритма, можно ожидать высокого качества симуляции.

Для тестирования алгоритма было проведено численное моделирование симуляции молекулы водорода по методу A-R-IPEA с использованием двухкубитной схемы. При реализации двухкубитных операций применялись квантовые вентили на основе эффекта дипольной блокады [43-45]. В результате проведённого моделирования была определена зависимость

точности аппроксимации энергии основного состояния молекулы от числа итераций, а также зависимость точности приготовления начального состояния регистра от времени эволюции и параметра разбиения.

Анализируя возможность применения A-R-IPEA для симуляции многочастичных молекул (необходимое число кубитов в регистре состояния $n > 2$), мы предложили для решения проблемы уменьшения точности вследствие неидеальности отдельных одно- и двухчастичных квантовых гейтов использовать в регистрах высокой размерности трёхкубитовые квантовые гейты, основанные на трёхчастичных резонансах Фёрстера нового типа $3 \times nP_{3/2} \rightarrow nS_{1/2} + (n+1)S_{1/2} + nP_{1/2}$. В ходе исследования представленной резонансной схемы были построены штарковские диаграммы атомов рубидия и определены поляризуемости ридберговских состояний. В рамках предложенной физической модели были численно смоделированы и исследованы спектры резонансов. Продемонстрировав наличие высококонтрастных осцилляций населённостей между коллективными состояниями трёхатомной системы, мы показали, что резонансы данного типа хорошо подходят для реализации многокубитных квантовых операций.

Результаты проведённого исследования были опубликованы в рецензируемых научных изданиях (работы [40, 49]), а также представлены в рамках международных конференций (МНСК-2019, 2020; ФУХА-2019).

В дальнейшем планируется изучение фазовой динамики трёхчастичных резонансов нового типа и построение полной схемы квантового вентиля Тоффоли на их основе. Также мы ставим своей целью осуществление экспериментальной реализации показанного здесь алгоритма для получения подтверждения его работоспособности. Имея весьма глобальные планы по изучению всех вопросов, связанных с возможностью применения ридберговских атомов в области квантовых вычислений, мы верим в потенциал этих исследований и свой неизбежный успех.

8. Благодарности

Автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю И. И. Бетерову за помощь в проведении представленных здесь исследований, ценные советы и терпение, а также всему коллективу лаборатории №32 ИФП СО РАН и доктору Патрику Шене за помощь и поддержку.

Численное моделирование алгоритма итерационной оценки фазы поддержано грантом РФФИ 17-02-00987. Разработка схемы контролируемых вращений поддержана грантом РФФИ 18-12-00313. Моделирование адиабатического приготовления начального состояния и расчёт трёхчастичных взаимодействий нового типа проведены в рамках гранта РФФИ 19-52-15010. Работа также поддержана Новосибирским государственным университетом и Российской академией наук.

9. Список литературы

1. Barredo D. et al. Synthetic three-dimensional atomic structures assembled atom by atom //arXiv preprint arXiv:1712.02727. – 2017.
2. Petrosyan D. et al. High-fidelity Rydberg quantum gate via a two-atom dark state //Physical Review A. – 2017. – Т. 96. – №. 4. – С. 042306.
3. Bernien H. et al. Probing many-body dynamics on a 51-atom quantum simulator //Nature. – 2017. – Т. 551. – №. 7682. – С. 579-584.
4. Zhang J. et al. Quantum simulation of the universal features of the Polyakov loop //Physical review letters. – 2018. – Т. 121. – №. 22. – С. 223201.
5. Nielsen M. A., Chuang I. Quantum computation and quantum information. – 10th Anniversary Edition. – N.Y.: Cambridge University Press, 2010.
6. Georgescu I. M., Ashhab S., Nori F. Quantum simulation //Reviews of Modern Physics. – 2014. – Т. 86. – №. 1. – С. 153.
7. Lloyd S. Universal quantum simulators //Science. – 1996. – С. 1073-1078.
8. Buluta I., Ashhab S., Nori F. Natural and artificial atoms for quantum computation //Reports on Progress in Physics. – 2011. – Т. 74. – №. 10. – С. 104401.
9. Ladd T. D. et al. Quantum computers //Nature. – 2010. – Т. 464. – №. 7285. – С. 45-53.
10. Hensgens T. et al. Quantum simulation of a Fermi–Hubbard model using a semiconductor quantum dot array //Nature. – 2017. – Т. 548. – №. 7665. – С. 70-73.
11. García-Álvarez L. et al. Digital quantum simulation of minimal AdS/CFT //Physical review letters. – 2017. – Т. 119. – №. 4. – С. 040501.
12. De Raedt K. et al. Massively parallel quantum computer simulator //Computer Physics Communications. – 2007. – Т. 176. – №. 2. – С. 121-136.
13. Friedenauer A. et al. Simulating a quantum magnet with trapped ions //Nature Physics. – 2008. – Т. 4. – №. 10. – С. 757-761.

14. Hilbert M., López P. The world's technological capacity to store, communicate, and compute information //science. – 2011. – T. 332. – №. 6025. – C. 60-65.
15. Buluta I., Nori F. Quantum simulators //Science. – 2009. – T. 326. – №. 5949. – C. 108-111.
16. Daskin A., Kais S. Decomposition of unitary matrices for finding quantum circuits: application to molecular Hamiltonians //The Journal of chemical physics. – 2011. – T. 134. – №. 14. – C. 144112.
17. Ortiz G. et al. Simulating fermions on a quantum computer //Computer physics communications. – 2002. – T. 146. – №. 3. – C. 302-316.
18. Wang H., Ashhab S., Nori F. Efficient quantum algorithm for preparing molecular-system-like states on a quantum computer //Physical Review A. – 2009. – T. 79. – №. 4. – C. 042335.
19. Somma R. et al. Simulating physical phenomena by quantum networks //Physical Review A. – 2002. – T. 65. – №. 4. – C. 042323.
20. D'Ariano G. M., Paris M. G. A., Sacchi M. F. Quantum tomography //Advances in Imaging and Electron Physics. – 2003. – T. 128. – C. 206-309.
21. Ortiz G. et al. Quantum algorithms for fermionic simulations //Physical Review A. – 2001. – T. 64. – №. 2. – C. 022319.
22. Wei H., Xue X. Quantum isomorphic simulation //arXiv preprint quant-ph/9702050. – 1997.
23. Zagoskin A. M., Savel'ev S., Nori F. Modeling an adiabatic quantum computer via an exact map to a gas of particles //Physical review letters. – 2007. – T. 98. – №. 12. – C. 120503.
24. Dobšíček M. et al. Arbitrary accuracy iterative quantum phase estimation algorithm using a single ancillary qubit: A two-qubit benchmark //Physical Review A. – 2007. – T. 76. – №. 3. – C. 030306.
25. Farhi E. et al. Quantum computation by adiabatic evolution //arXiv preprint quant-ph/0001106. – 2000.

26. Kempe J., Kitaev A., Regev O. The complexity of the local Hamiltonian problem //SIAM Journal on Computing. – 2006. – Т. 35. – №. 5. – С. 1070-1097.
27. Aspuru-Guzik A. et al. Simulated quantum computation of molecular energies //Science. – 2005. – Т. 309. – №. 5741. – С. 1704-1707.
28. Xia T. et al. Randomized benchmarking of single-qubit gates in a 2D array of neutral-atom qubits //Physical review letters. – 2015. – Т. 114. – №. 10. – С. 100503.
29. Делоне Н. Б. Ридберговские атомы //Соросовский образовательный журнал. – 1998. – №. 4. – С. 90-95.
30. Lukin M. D. et al. Dipole blockade and quantum information processing in mesoscopic atomic ensembles //Physical Review Letters. – 2001. – Т. 87. – №. 3. – С. 037901.
31. Theis L. S. et al. High-fidelity Rydberg-blockade entangling gate using shaped, analytic pulses //Physical Review A. – 2016. – Т. 94. – №. 3. – С. 032306.
32. Tretyakov D. B. et al. Controlling the interactions of a few cold Rb Rydberg atoms by radio-frequency-assisted Förster resonances //Physical Review A. – 2014. – Т. 90. – №. 4. – С. 041403.
33. Tretyakov D. B. et al. Observation of the Borromean three-body Förster resonances for three interacting Rb Rydberg atoms //Physical review letters. – 2017. – Т. 119. – №. 17. – С. 173402.
34. Карлов Н. В. Лекции по квантовой электронике. – М.: Наука, 1988. – Т. 52.
35. Бетеров И. И. и др. Резонансное диполь-дипольное взаимодействие ридберговских атомов для реализации квантовых вычислений //Квантовая Электроника. – 2018. – Т. 48. – №. 5. – С. 453-459.
36. Kaulakys V. Consistent analytical approach for the quasi-classical radial dipole matrix elements //Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 1995. – Т. 28. – №. 23. – С. 4963.

37. Beterov I. I. et al. Fast three-qubit Toffoli quantum gate based on three-body Förster resonances in Rydberg atoms //Physical Review A. – 2018. – T. 98. – №. 4. – C. 042704.
38. Du J. et al. NMR implementation of a molecular hydrogen quantum simulation with adiabatic state preparation //Physical review letters. – 2010. – T. 104. – №. 3. – C. 030502.
39. Peruzzo A. et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor //Nature communications. – 2014. – T. 5. – C. 4213.
40. Ashkarin I. N. et al. Scheme of a hydrogen-molecule quantum simulator based on two ultracold rubidium atoms //Quantum Electronics. – 2019. – T. 49. – №. 5. – C. 449.
41. Grimm R., Weidemüller M., Ovchinnikov Y. B. Optical dipole traps for neutral atoms //Advances in atomic, molecular, and optical physics. – Academic Press, 2000. – T. 42. – C. 95-170.
42. Sheng C. et al. High-fidelity single-qubit gates on neutral atoms in a two-dimensional magic-intensity optical dipole trap array //Physical review letters. – 2018. – T. 121. – №. 24. – C. 240501.
43. Beterov I. I. et al. Simulated quantum process tomography of quantum gates with Rydberg superatoms //Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 2016. – T. 49. – №. 11. – C. 114007.
44. Beterov I. I. et al. Quantum gates in mesoscopic atomic ensembles based on adiabatic passage and Rydberg blockade //Physical Review A. – 2013. – T. 88. – №. 1. – C. 010303.
45. Beterov I. I. et al. Coherent control of mesoscopic atomic ensembles for quantum information //Laser Physics. – 2014. – T. 24. – №. 7. – C. 074013.
46. Levine I. N., Busch D. H., Shull H. Quantum chemistry. – Upper Saddle River, NJ : Pearson Prentice Hall, 2009. – T. 6.

47. Walker T. G., Saffman M. Consequences of Zeeman degeneracy for the van der Waals blockade between Rydberg atoms //Physical Review A. – 2008. – T. 77. – №. 3. – C. 032723.
48. Beterov I. I. et al. Quasiclassical calculations of blackbody-radiation-induced depopulation rates and effective lifetimes of Rydberg $n S$, $n P$, and $n D$ alkali-metal atoms with $n \leq 80$ //Physical Review A. – 2009. – T. 79. – №. 5. – C. 052504.
49. Cheinet P. et al. Three-body Förster resonance of a new type in Rydberg atoms //Quantum Electronics. – 2020. – T. 50. – №. 3. – C. 213.
50. Ravets S. et al. Coherent dipole–dipole coupling between two single Rydberg atoms at an electrically-tuned Förster resonance //Nature Physics. – 2014. – T. 10. – №. 12. – C. 914-917.
51. Lewenstein M. Polar molecules in topological order //Nature Physics. – 2006. – T. 2. – №. 5. – C. 309-310.
52. You J. Q., Nori F. Atomic physics and quantum optics using superconducting circuits //Nature. – 2011. – T. 474. – №. 7353. – C. 589-597.