第 55 卷 第 4 期 2006 年 4 月
1000-3290/2006/55(04)/1591-05
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.55,No.4,April,2006

由各向异性海森伯自旋环链组成的量子位及其通用量子逻辑门*

严晓波[1)] 王顺金[1)2)†]

1)(四川大学物理系,成都 610064)

2)(兰州重离子加速器国家实验室,兰州 730000)

(2004 年 12 月 10 日收到;2005 年 12 月 12 日收到修改稿)

研究了各向异性耦合的三粒子海森伯自旋环链团簇在随时间变化的磁场中的运动.该系统的哈密顿量具有 $SU(2)$ 代数结构.用代数动力学方法对此系统进行求解,得到了严格的解析解.基于严格解,可以构造一位量子逻辑门.通过调节磁场强度和频率,就可以控制该量子逻辑门,实现一位量子逻辑门的任何操作.

关键词:代数动力学,自旋环链团簇,一位量子逻辑门

PACC:0365,7335

1. 引 言

量子计算机中的信息是用量子逻辑门来进行处理的.量子逻辑门是一种量子力学的幺正变换,用算符表示,它将一个量子态演化为另一个量子态[1].量子逻辑门是实现量子计算的基础.

怎样设计一个物理系统并控制它以实现量子逻辑门,一直是人们关注的问题.1995 年,Monroe 等[2]首次利用离子阱装置实现两位的 CN 门(控制非门)的演示实验,证实了量子计算的可行性.在量子逻辑门实现方面,除了离子阱装置外,比较流行的还有核磁共振系统[3]、量子点系统[4]、链团簇组成的量子位及其通用一位量子逻辑门.在时间有关的磁场中运动的各向异性耦合的海森伯自旋环链团簇是一个典型的非自治量子系统,其哈密顿量具有 $SU(2)$ 代数结构.代数动力学[6,7]可以求解具有代数结构的非自治系统.

因此,本文用代数动力学方法对该系统进行求解,并基于严格的解析解,通过调节磁场实现一位量子逻辑门.

2. 系统的哈密顿量与严格的解析解

在随时间变化的磁场中,系统的哈密顿量为

$$\begin{aligned}\hat{H}(t) &= J(\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2+\hat{S}_2\cdot\hat{S}_3+k\hat{S}_1\cdot\hat{S}_3)\\&\quad+\mu_{\rm B}B(t)\cdot\sum_{i=1}^{3}\hat{S}_i\\&=\hat{H}_{\rm int}+\hat{H}_{\rm Zeeman}.\end{aligned}\tag{1}$$

设

$$\begin{aligned}\hat{S}_z &= \sum_i \hat{S}_i^z,\\\hat{S}_y &= \sum_i \hat{S}_i^y,\\\hat{S}_x &= \sum_i \hat{S}_i^x;\end{aligned}\tag{2}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_{123} &= \hat{S}_1+\hat{S}_2+\hat{S}_3,\\\hat{S}_{13} &= \hat{S}_1+\hat{S}_3.\end{aligned}\tag{3}$$

可证明 $\hat{S}_{123}$ 和 $\hat{S}_{13}$ 都满足角动量的对易关系,而且有

$$\begin{aligned}[\hat{H}_{\rm int},\hat{S}_z] &= 0,\\[\hat{H}_{\rm int},\hat{S}_y] &= 0,\\[\hat{H}_{\rm int},\hat{S}_x] &= 0;\end{aligned}\tag{4a}$$

---

* 国家自然科学基金(批准号:90503008,10375039)、教育部博士点基金和中国科学院兰州重离子加速器国家实验室基金资助的课题.

† E-mail:sjwang@home.swjtu.edu.cn

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_{123}^2] = 0,$$
$$[\hat{S}_z, \hat{S}_{13}^2] = 0; \tag{4b}$$

$$[\hat{H}, \hat{S}_{123}^2] = 0,$$
$$[\hat{S}_{123}^2, \hat{S}_{13}^2] = 0. \tag{4c}$$

下面求 $\hat{H}_{\text{int}}$ 的本征值和能级的简并度，它们显然与 k 有关.由于

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{J}{2}\left(\hat{S}_{123}^2 - \frac{9}{4}\right) + \frac{J(k-1)}{2}\left(\hat{S}_{13}^2 - \frac{3}{2}\right), \tag{5}$$

由(4a),(4b)式可知，$\hat{S}_{123}^2$，$\hat{S}_{13}^2$，$\hat{S}_z$ 彼此对易并与 $\hat{H}_{\text{int}}$ 对易,所以 $\hat{H}_{\text{int}}$ 的完备互易算子集为 $\{\hat{H}_{\text{int}}, \hat{S}_{123}^2, \hat{S}_{13}^2, \hat{S}_z\}$，它们有共同的本征态.$\hat{S}_{123}^2$，$\hat{S}_{13}^2$ 的本征值分别为 $S(S+1)$和 $S'(S'+1)$.由角动量的耦合规则知，S'只能取 0 和 1.当 $S'=0$，$S=\frac{1}{2}$；当 $S'=1$，$S=\frac{1}{2}$或$\frac{3}{2}$. 这三个不可约表示对应的 $\hat{H}_{\text{int}}$ 的不变子空间的维数分别为 2，2 和 4.把 S 和 S' 的值代入(5)式，便得到 $\hat{H}_{\text{int}}$ 的能级公式

$$E_{\text{int}}(S,S') = \frac{J}{2}\left[S(S+1) - \frac{9}{4}\right] + \frac{(k-1)J}{2} \times \left[S'(S'+1) - \frac{3}{2}\right]. \tag{6}$$

下面就 k 的取值范围分三种情况加以讨论.

(1)当 $k>1$ 时，基态能级为

$$E\left(\frac{1}{2},0\right) = -\frac{3Jk}{4}, \tag{7a}$$

是二重简并的.第一激发态能级为

$$E\left(\frac{1}{2},1\right) = -\frac{3J}{4} + \frac{J}{4}(k-1), \tag{7b}$$

也是二重简并的.第二激发态能级为

$$E\left(\frac{3}{2},1\right) = \frac{3J}{4} + \frac{J}{4}(k-1), \tag{7c}$$

是四重简并的.

(2) 当 $k<1$ 时，基态能级为

$$E\left(\frac{1}{2},1\right) = -\frac{3J}{2} + \frac{3kJ}{4}, \tag{8a}$$

是二重简并的.第一激发态能级为

$$E\left(\frac{1}{2},0\right) = -\frac{3kJ}{4}, \tag{8b}$$

也是二重简并的.第二激发态能级为

$$E\left(\frac{3}{2},1\right) = \frac{3kJ}{4}, \tag{8c}$$

是四重简并的.

(3) 当 $k=1$ 时，回到各向同性情况，能级公式为

$$E_{\text{int}}(S,S') = \frac{J}{2}\left[S(S+1) - \frac{9}{4}\right]. \tag{9a}$$

这时，$S=\frac{1}{2}$，$S'=0,1$ 的第一、第二两条能级的能量为

$$E\left(\frac{1}{2},1\right) = E\left(\frac{1}{2},0\right) = -\frac{3J}{4}, \tag{9b}$$

是四重简并的.$S=\frac{3}{2}$，$S'=1$ 的第三条能级的能量为

$$E\left(\frac{3}{2},1\right) = \frac{3J}{4}, \tag{9c}$$

也是四重简并的.

相应的本征函数 $\psi(S,S',S_z)$仿射 $SU(2)$的不可约表示 $D^S(S')$空间.

$D^{1/2}(0)$：

$$\psi\left(\frac{1}{2},0,-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle),$$
$$\psi\left(\frac{1}{2},0,+\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle). \tag{10a}$$

$D^{1/2}(1)$：

$$\psi\left(\frac{1}{2},1,-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{6}}(|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - 2|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle),$$
$$\psi\left(\frac{1}{2},1,+\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle). \tag{10b}$$

$D^{3/2}(1)$：

$$\psi\left(\frac{3}{2},1,-\frac{3}{2}\right) = |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle,$$
$$\psi\left(\frac{3}{2},1,-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle),$$
$$\psi\left(\frac{3}{2},1,+\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle),$$
$$\psi\left(\frac{3}{2},1,+\frac{3}{2}\right) = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle. \tag{10c}$$

(10)式中$|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$表示系统第一个粒子处于自旋

向上、第二个粒子处于自旋向下、第三个粒子处于自旋向上的态,其他类似.

考虑外磁场时，不同 S_z 的能级要发生数量为 $S_z\mu_B B_0$ 的塞曼劈裂. 因此，$k\neq 1$ 时的各向异性耦合的三粒子环的能量最低的不可约表示都是二能级系统.适当选择 J,k 和 B_0,可使其他激发态的不可约表示远离能量最低的不可约表示，使得这个各向异性耦合的三粒子环的能量最低的二能级不可约表示可以做成一个量子位.设这个量子位的两个态为 φ_1,φ_2，劈裂后的基矢是 $\hat{S}_z$ 的本征态，对应本征值为 $\pm\frac{1}{2}$.

考虑 $k>1$ 的情况.当磁场随时间变化时，哈密顿量依赖时间，系统成为非自治的，需要求解时间有关的薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{H}(t)\psi. \tag{11}$$

这可以用代数动力学方法求解.通过规范变换

$$\bar{\psi}(t)=U_g^{-1}\psi(t), \tag{12a}$$

$$U_g=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda(t)\hat{S}_y}. \tag{12b}$$

规范变换后的波函数 $\bar{\psi}(t)$满足的薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\bar{\psi}=\hat{\bar{H}}(t)\bar{\psi}. \tag{13}$$

利用恒等式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda(t)\hat{S}_i}\hat{S}_j\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda(t)\hat{S}_i}=\hat{S}_j\cos\lambda(t)+\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k\sin\lambda(t) \tag{14}$$

可以求得在规范参考系中的 $\hat{\bar{H}}(t)$,

$$\begin{aligned}\hat{\bar{H}}(t)&=U_g^{-1}\hat{H}(t)U_g-\mathrm{i}U_g^{-1}\frac{\partial}{\partial t}U_g\\&=\hat{H}_{\mathrm{int}}+(\mu_B B_x\cos\lambda(t)+\mu_B B_z\sin\lambda(t))\hat{S}_x\\&\quad+(\mu_B B_y+\dot{\lambda}(t))\hat{S}_y\\&\quad+(\mu_B B_z\cos\lambda(t)-\mu_B B_x\sin\lambda(t))\hat{S}_z.\end{aligned} \tag{15}$$

由(4a)式知,$\hat{H}_{\mathrm{int}}$在规范变换下是不变的.

若使磁场 $\boldsymbol{B}(t)$和 $\lambda(t)$满足

$$\begin{aligned}B_x(t)&=B_0\sin\omega t,\\B_y(t)&=\frac{\omega}{\mu_B},\\B_z(t)&=B_0\cos\omega t,\end{aligned} \tag{16}$$

$$\lambda(t)=-\omega t, \tag{17}$$

则规范变换后的哈密顿量简化为

$$\begin{aligned}\hat{\bar{H}}(t)&=\hat{H}_{\mathrm{int}}+\mu_B B_0\hat{S}_z\\&=\hat{H}_{\mathrm{int}}+\hbar\omega_0\hat{S}_z,\end{aligned} \tag{18a}$$

$$\omega_0=\frac{\mu_B B_0}{\hbar}. \tag{18b}$$

由初条件

$$\bar{\psi}(0)=\psi(0)=\alpha\varphi_1+\beta\varphi_2, \tag{19}$$

求得方程(13)的解为

$$\bar{\psi}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}3kJt/4\hbar}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\alpha\varphi_1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\beta\varphi_2). \tag{20}$$

原来方程的解可由下列逆变换得出:

$$\begin{aligned}\psi(t)&=U_g\bar{\psi}(t)\\&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}3kJt/4\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda(t)\hat{S}_y}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\alpha\varphi_1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\beta\varphi_2)\\&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}3kJt/4\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t)\hat{S}_y}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\alpha\varphi_1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\beta\varphi_2).\end{aligned} \tag{21}$$

若用矩阵表示波函数

$$\psi(t)=M(t)\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}, \tag{22}$$

则时间演化算子为

$$M(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}3kJt/4\hbar}\times\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\cos(\omega t/2)&-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\sin(\omega t/2)\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\sin(\omega t/2)&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\cos(\omega t/2)\end{bmatrix}. \tag{23}$$

$M(t)$正是一位通用量子逻辑门.

3. 一位特殊量子逻辑门的实现

几个常用的一位量子逻辑门是 X 门、Y 门、Z 门、S 门、T 门、H 门，可以通过调节参数 ω,ω_0 和 kJ 来实现.调节上述 3 个参数使得在时刻 t 满足相应的条件,则该时刻 t 系统就在物理上分别实现了上述 6 个特殊的一位量子逻辑门的操作功能,即该时刻系统的幺正时间演化产生的量子态就是该逻辑门产生的量子态(t 的选取应根据量子逻辑门操作的时间要求决定).下面给出实现这 6 个量子逻辑门的物理参数条件.

(1)X 门

当$\frac{\omega t}{2}=\frac{\pi}{2},\frac{\omega_0 t}{2}=\frac{\pi}{2},\frac{3kJt}{4\hbar}=\frac{\pi}{2}$时,

$$M=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}. \tag{24}$$

(2)Y 门

当$\frac{\omega t}{2}=\frac{\pi}{2},\frac{\omega_0 t}{2}=\pi,\frac{3kJt}{4\hbar}=\frac{\pi}{2}$时,

$$M=\begin{bmatrix}0&\mathrm{i}\\-\mathrm{i}&0\end{bmatrix}. \tag{25}$$

(3)Z 门

当$\frac{\omega t}{2}=\pi,\frac{\omega_0 t}{2}=\frac{\pi}{2},\frac{3kJt}{4\hbar}=\frac{\pi}{2}$时,

$$M=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}. \tag{26}$$

(4) S 门

当$\frac{\omega t}{2}=\pi$，$\omega_0 t=\frac{\pi}{2}$，$\frac{3kJt}{4\hbar}=\frac{5\pi}{4}$时，

$$M=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{i}\end{bmatrix}. \tag{27}$$

(5) T 门

当$\frac{\omega t}{2}=\pi$，$\omega_0 t=\frac{\pi}{4}$，$\frac{3kJt}{4\hbar}=\frac{9\pi}{8}$时，

$$M=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}\end{bmatrix}. \tag{28}$$

(6) H 门

当$\frac{\omega t}{2}=\frac{3\pi}{4}$，$\omega_0 t=\pi$，$\frac{3kJt}{4\hbar}=\frac{\pi}{2}$时，

$$M=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix}. \tag{29}$$

对于 $k<1$ 的情况，只需把(24)—(29)式中的 $-\frac{3}{4}kJ$换成$\left(\frac{k}{4}-1\right)J$，便可求出相应的量子逻辑门.

我们知道，单粒子逻辑门易受环境的影响[8]而造成计算出错，用自旋链团簇组成的多粒子系统的逻辑门却具有很好的抗环境干扰性能[9].本文研究的各向异性耦合的三粒子海森伯环链同样具有比单粒子量子位和单粒子逻辑门更好的抗环境干扰能力.对于耦合的五粒子海森伯自旋环链团簇组成的量子位和逻辑门的研究正在进行之中.

[1] Zhang Z J，Zhang Z L，Li A M 2002 *Quantum Computation and Encrypted Communications* (Wuhan：Central China Normal University Press) (in Chinese) [张镇九、张昭理、李爱民 2002 量子计算与通信加密(武汉 华中师范大学出版社)]

[2] Monroe C，Meekhof D M，King B E *et al* 1995 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **75** 4714

[3] Gershenfeld N A，Chuang I L 1997 *Science* **275** 350

[4] Loss D，Divincenzo D P 1998 *Phys*. *Rev*. A **57** 120

[5] Turchette Q A，Hood C J，Lange W *et al* 1995 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **75** 4710

[6] Wang S J 1999 *Prog*. *Phys*. *Chin*. **19** 331 (in Chinese) [王顺金 1999 物理学进展 **19** 331]

[7] Wang S J，Li F L，Zuo W *et al* 2000 *J*. *Quantum Opt*. **6** 1 (in Chinese) [王顺金、李福利、左 维等 2000 量子光学学报 **6** 1]

[8] Wang S J，An J H，Jia C L *et al* 2003 *J*. *Phys*. *A* **36** 829

[9] Su X F，Wang S J 2005 *Int*. *J*. *Phys*. B **19** 2481

Single qubit and its universal logic gate made of an annular spin cluster with anisotropic Heisenberg-chain *

Yan Xiao-Bo[1)] Wang Shun-Jin[1)2)†]
1)(*Department of Physics, Sichuan University, Chengdu 610064, China*)
2)(*National Laboratory of Heavy Ion Accelerator, Lanzhou 730000, China*)
(Received 10 December 2004; revised manuscript received 12 December 2005)

Abstract

We investigate an annular spin cluster made of three particles with anisotropic Heisenberg-chain controlled by a time-dependent magnetic field. The system has an $SU(2)$ algebraic structure. Using algebraic dynamical method, we have obtained the exact analytical solution to the time dependent Schrödinger equation. Based on the analytical solution, it is shown that the system can be used as a universal single qubit logic gate controlled by the strength and frequency of the magnetic field, and consequently six special single qubit logic gates can be realized.

Keywords: algebraic dynamics, annular spin cluster, universal single qubit logic gate
PACC: 0365, 7335

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 90503008, 10375039), the Doctoral Fund of Ministry of Education of China and the Foundation of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, China.
† E-mail: sjwang@home.swjtu.edu.cn