

核磁共振量子计算中的赝纯态制备*

方细明 朱熙文 冯 芒 高克林 施 磊

(中国科学院武汉物理与数学研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071)

(1998 年 10 月 5 日收到; 1999 年 1 月 13 日收到修改稿)

研究了少数量子位赝纯态的制备方案, 比较两种不同的逻辑标志赝纯态的差异, 分析了形成“垃圾块”的原因, 提出了减少甚至消除“垃圾块”的方法.

PACC: 0367; 8980

1 引 言

量子计算是利用量子力学规律实现信息处理的量子过程. 初步实验^[1-3]表明, 这一设想已初露曙光. 量子算法如 Shor^[4]的大数质因子分解, Grover^[5]的量子搜寻, Hogg^[6]量子搜寻等的研究表明, 量子计算具有经典计算不可比拟的强大功能, 能够完成经典计算所不能完成的工作. 因此, 量子计算已经成为科学家们关心的热点课题. 可用于实现量子计算的物理体系非常丰富, 如冷囚禁离子系统, 量子点系统, 腔量子电动力学系统, 核磁共振系统^[7]等等. 目前, 已经实现量子计算初步实验的体系有 Monroe 等^[1]的超冷离子体系的实验, Chuang 等^[3]及 Jones 等^[2]的核磁共振体系的实验. 如何用这两种体系实现量子计算, 存在一定差别. 对超冷离子体系, 利用纯微观量子态演化实现量子计算, 由于环境影响, 脆弱的微观量子态往往易受破坏, 又难于控制操作, 要获得较多量子位的量子体系, 实验上仍然困难重重. 核磁共振体系量子计算利用宏观系综的演化实现量子计算, 环境对其影响很小, 而且核自旋能方便地用脉冲系列进行控制操作, 因此, 核磁共振量子计算的前景非常看好. 然而, 一般宏观系综并不能用于量子计算, 因为它不具备量子纯态的特性, 只有纯粹量子系综才具有与纯量子态相同的特性, 可以用来实现量子计算. 宏观系综不可能制备成纯粹量子系综, 但是, 却可以制备成这样一个特殊状态, 即所谓赝纯态, 它的行为与纯粹量子系综完全一样, 因而可以用于量子计算. 核磁共振量子计算正是在赝纯态上实施脉冲操作而完成量子计算过程的, 赝纯态的制备是实现核磁共振量子计算的基础. 因此, 制备赝纯态的方法倍受关注. Cory 等^[8]提出空间平均制备赝纯态的方法, Chuang 等^[9]提出逻辑标记和 Knill 等^[10]提出时间平均的赝纯态制备方法, 它们各具特色. 本文对逻辑标记制备赝纯态的方法进行了进一步探讨, 分析了所谓“垃圾块”的成因, 提出了减少“垃圾块”的方案, 在不增加核自旋数目的前提下增加赝纯子系综的数目, 这样也间接地提高了信噪比.

* 国家自然科学基金(批准号: 19734060)资助的课题.

2 赝纯态及其制备

单个磁矩为 μ 的核自旋处于磁感应强度为 $\mathbf{B}$ 的外场中, 其能量为 $E = -\mu \cdot \mathbf{B}$, 设 $\mathbf{B}$ 沿 z 方向, 则 $E = -\mu_z B$, μ_z 为 μ 的 z 方向分量. 热平衡状态下各能态上的粒子数分布遵从玻耳兹曼分布

$$P(E) = Q_0 \exp\left[-\frac{\mu_z B}{k_B T}\right], \quad (1)$$

其中 T 为系统的温度, k_B 为玻耳兹曼常量, Q_0 为配分函数. 密度算符 ρ 表示为

$$\rho = \rho_0 \exp\left[-\frac{\hat{H}}{kT}\right] = \rho_0 \exp\left[-\frac{\mu_z B}{kT}\right], \quad (2)$$

μ_z 为核磁矩算符的 z 分量. 对于自旋为 $\frac{1}{2}\hbar$, 旋磁化 $\gamma = 2\mu_z/\hbar$ 的核, 记 $\alpha = \gamma\hbar B/kT$. 高温近似下, 即在 $kT \gg \mu_z B$ 的条件下, 有 $\rho = \frac{1}{2}(1 \pm \alpha)$, 或表示为

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \alpha I_z) = \frac{1}{2}I + \rho_\Delta, \quad (3)$$

其中 I 为二维单位矩阵, I_z 是泡利矩阵的 z 分量, ρ_Δ 称偏移密度矩阵, 密度矩阵的演化完全由偏移密度矩阵的演化决定. N 个核自旋磁矩为 $\mu_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 相互作用很弱的核自旋体系, 处于磁感应强度为 $\mathbf{B}$ 的外场中, 热平衡时的粒子数分布可表示为

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2 \dots \otimes \rho_N. \quad (4)$$

高温近似下可写成

$$\rho = \frac{1}{2^N}I + \rho_\Delta. \quad (5)$$

例如, 二个核自旋系统的密度矩阵热平衡态下的高温近似形式为

$$\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{4} \begin{bmatrix} \alpha_1 + \alpha_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1 - \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha_1 + \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha_1 - \alpha_2 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

式中 $\alpha_i = 2\mu_{zi}B (i = 1, 2)$. 热态下 ρ_Δ 是对角化的, 但明显 ρ_Δ 的形式不是纯系综的密度矩阵形式. 如果将系统制备到这样的特殊状态, 使得整个 ρ_Δ (或分块) 的对角元(峰值)只有一个不同, 其他的都相等, 这时的 ρ_Δ (或其子块) 与纯系综密度矩阵仅差一个常数(本底), 其随时间演化规律与纯系综的密度矩阵随时间的演化规律完全一样, 系统的这种状态就是赝纯态^[7].

如何将系统从热态制备成赝纯态? 对于二个和四个自旋体系 Gershenfeld 等^[7] 给出了具体方法, 并指出多于四个自旋的体系, 将会出现不可承载信息的“垃圾块”, 例如, 六个自旋体系只能制备出三量子位的赝纯态. 但是, 并没有给出“垃圾块”的成因以及减少“垃圾块”的方法. 我们以 $N = 5$ 和 6 的核自旋体系为例, 对形成“垃圾块”的原因作出具体分析, 指出得到 $N - 2$ 量子位的赝纯态的方法, 并给出减少“垃圾块”的对策.

首先讨论具有五个核自旋体系的赝纯态制备. 五个自旋体系处于热平衡态时其偏移密度矩阵的对角元如表 1 所示. 此时 α_i ($i=1, 2, 3, 4, 5$) 的差别已经忽略, 这种近似处理对于同核弱耦合系统是合理的.

表 1 五个自旋体系热平衡态的偏移密度矩阵对角元

↓↓↓↓↓	↓↓↓↓↑	↓↓↓↑↓	↓↓↓↑↑	↓↓↑↓↓	↓↓↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑
5	3	3	1	3	1	1	-1
↓↑↓↓↓	↓↑↓↓↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑
3	1	1	-1	1	-1	-1	-3
↑↓↓↓↓	↑↓↓↓↑	↑↓↑↑↓	↑↓↑↑↑	↑↓↑↑↓	↑↓↑↑↑	↑↓↑↑↓	↑↓↑↑↑
3	1	1	-1	1	-1	-1	-3
↑↑↓↓↓	↑↑↓↓↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
1	-1	-1	-3	-1	-3	-3	-5

对系统按图 1 作么正变换, 图 1 中编号 1, 2, 3, 4, 5 与核自旋排列次序自左至右对应, 自旋向上表示 1, 向下表示 0, 点与 ⊙ 相连表示控制非操作, 黑点表示以 1 为控制条件, 图 1 中白点表示 0 为控制条件. 系统的偏移密度矩阵变成表 2.

表 2 五个自旋体系热平衡态经图 1 变换后的偏移密度矩阵对角元

↓↓↓↓↓	↓↓↓↓↑	↓↓↓↑↓	↓↓↓↑↑	↓↓↑↓↓	↓↓↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑
5	1	1	1	-1	3	3	3
↓↑↓↓↓	↓↑↓↓↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑
3	-1	-1	-1	-3	1	1	1
↑↓↓↓↓	↑↓↓↓↑	↑↓↑↑↓	↑↓↑↑↑	↑↓↑↑↓	↑↓↑↑↑	↑↓↑↑↓	↑↓↑↑↑
3	-1	-1	-1	-3	1	1	1
↑↑↓↓↓	↑↑↓↓↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
1	-3	-3	-3	-5	-1	-1	-1

若以右端的二个自旋取向向下作为标志, 则只能得到四块可分辨的子赝纯态, 它们是上图的第一行的两块和最后一行的两块, 即两个量子位. 若对系统再按图 2 作变换, 则系统的偏移密度矩阵变为表 3.

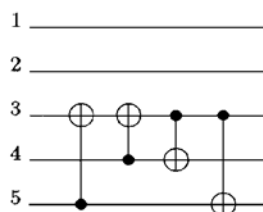


图 1

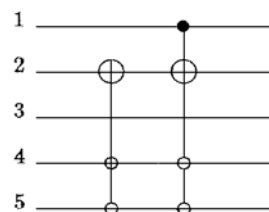


图 2

这样只用右端的二个自旋取向向下作为标记, 所有子赝纯态都可分辨, 即可获得三量子位的存储空间, “垃圾块”被消除. 最后的变换实际上就是交换峰值, 使不可分辨的子赝

纯态变得可以分辨. 上述赝纯态的制备过程中, 由于使用自旋的逻辑状态作为赝纯态的标志, 因此叫逻辑标志法.

表3 五个自旋体系热平衡态经图1和图2变换后的偏移密度矩阵对角元

↓↓↓↓↓	↓↓↓↓↑	↓↓↓↑↓	↓↓↓↑↑	↓↓↑↓↓	↓↓↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑
3	1	1	1	-3	3	3	3
↓↑↓↓↓	↓↑↓↓↑	↓↑↑↓↓	↓↑↑↑↑	↓↑↑↓↓	↓↑↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑
5	-1	-1	-1	-1	1	1	1
↑↓↓↓↓	↑↓↓↓↑	↑↑↓↓↓	↑↑↓↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
3	-1	-1	-1	-3	1	1	1
↑↑↓↓↓	↑↑↓↓↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
1	-3	-3	-3	-5	-1	-1	-1

实验上, 上述操作可很方便地实现, 如控制非操作, 可用图3所示的脉冲系列来实现, 图3中窄方框表 $\pi/2$ 脉冲, 宽方框表 π 脉冲, 方框顶上的字母表施加脉冲的方向, r 为延迟时间, 其值为 $1/4J$, J 是两个自旋的耦合强度. 后面用到的多重控制操作, 可以分解为控制非操作与单个位的旋转操作的组合来实现, 对此本文不作详述.

六个自旋体系处于热平衡态时其偏移密度矩阵的对角元如表4所示, 基于同样的理

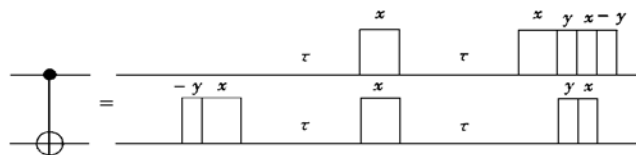


图3

表4 六个自旋体系热平衡态的偏移密度矩阵的对角元

↓↓↓↓↓	↓↓↓↓↑	↓↓↓↑↓	↓↓↓↑↑	↓↓↑↓↓	↓↓↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑
6	4	4	2	4	2	2	0
↓↑↓↓↓	↓↑↓↓↑	↓↑↑↓↓	↓↑↑↑↑	↓↑↑↓↓	↓↑↑↑↑	↓↑↑↑↓	↓↑↑↑↑
4	2	2	0	2	0	0	-2
↑↓↓↓↓	↑↓↓↓↑	↑↑↓↓↓	↑↑↓↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
4	2	2	0	2	0	0	-2
↑↑↓↓↓	↑↑↓↓↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
2	0	0	-2	0	-2	-2	-4
↑↓↑↓↓	↑↓↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
4	2	2	0	2	0	0	-2
↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
2	0	0	-2	0	-2	-2	-4
↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
2	0	0	-2	0	-2	-2	-4
↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑
0	-2	-2	-4	-2	-4	-4	-6

由, $\alpha_i (i=1, 2, 3, 4, 5, 6)$ 的差别已经忽略.

对系统作如图 4 的幺正变换, 图 4 中编号 1, 2, 3, 4, 5, 6 与核自旋排列次序自左至右对应. 系统的偏移密度矩阵变成表 5.

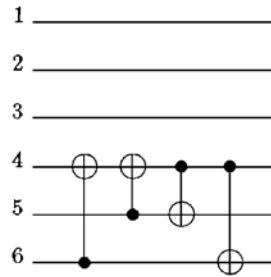


图 4

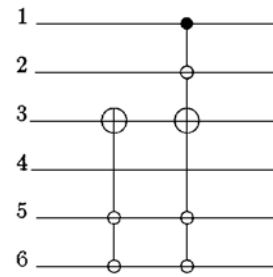


图 5

表 5 六个自旋体系热平衡态经图 4 变换后的偏移密度矩阵对角元

↓↓↓↓↓↓	↓↓↓↓↓↑	↓↓↓↓↑↑	↓↓↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↓	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↓	↓↑↑↑↑↑
6	2	2	2	0	4	4	4
↓↑↑↑↓↓	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↓	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↓	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↓	↓↑↑↑↑↑
4	0	0	0	-2	2	2	2
↑↑↓↓↓↓	↑↑↓↓↑↑	↑↑↓↓↑↓	↑↑↓↓↑↑	↑↑↓↓↑↓	↑↑↓↓↑↑	↑↑↓↓↑↓	↑↑↓↓↑↑
4	0	0	0	-2	2	2	2
↑↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑
2	-2	-2	-2	-4	0	0	0
↑↓↑↑↓↓	↑↓↑↑↑↑	↑↓↑↑↑↓	↑↓↑↑↑↑	↑↓↑↑↑↓	↑↓↑↑↑↑	↑↓↑↑↑↓	↑↓↑↑↑↑
4	0	0	0	-2	2	2	2
↑↓↑↑↑↓	↑↓↑↑↑↑	↑↓↑↑↑↓	↑↓↑↑↑↑	↑↓↑↑↑↓	↑↓↑↑↑↑	↑↓↑↑↑↓	↑↓↑↑↑↑
2	-2	-2	-2	-4	0	0	0
↑↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑
2	-2	-2	-2	-4	0	0	0
↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↓	↑↑↑↑↑↑
0	-4	-4	-4	-6	-2	-2	-2

若以右端的二个自旋取向向下作为标志, 则只能得到四块可分辨的子赝纯态, 它们是上图的第一行的两块和最后一行的两块, 即两个量子位存储空间. 其他子赝纯态不可分辨, 因为多个子赝纯态有相同的本底与峰值. 若再增加一个自旋取向作为标志, 则可从二、三、五行的六块中挑出两块, 四、六、七行的六块中挑出两块, 共得到八块可分辨的子赝纯态, 即三个量子比特的存储空间, 仍然还存在不可分辨的子赝纯态. 若对系统再按图 5 作变换, 则系统的偏移密度矩阵变为表 6.

这样只用右端的两个自旋取向向下作为标记, 所有子赝纯态都可分辨, 即可获得四量子位的存储空间, “垃圾块”被消除. 最后的变换实际上就是交换峰值, 使不可分辨的子赝纯态变得可以分辨, 用此方法可使更多自旋体系的“垃圾块”减少, 使得系统的存储空间扩大.

表 6 六个自旋体系热平衡态经图 4 和图 5 变换后的偏移密度矩阵对角元

↓↓↓↓↓↓	↓↓↓↓↓↑	↓↓↓↓↑↑	↓↓↓↑↑↑	↓↓↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑
4	2	2	2	-2	4	4	4
↓↑↑↑↓↓	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↑	↓↑↑↑↑↑
6	0	0	0	0	2	2	2
↑↑↓↓↓↓	↑↑↓↓↓↑	↑↑↓↓↑↑	↑↑↓↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑
2	0	0	0	-4	2	2	2
↑↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑
4	-2	-2	-2	-2	0	0	0
↑↓↓↓↓↓	↑↓↓↓↓↑	↑↓↓↓↑↑	↑↓↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑
4	0	0	0	-2	2	2	2
↑↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑
2	-2	-2	-2	-4	0	0	0
↑↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑
0	-2	-2	-2	-6	0	0	0
↑↑↑↑↓↓	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑	↑↑↑↑↑↑
2	-4	-4	-4	-4	-2	-2	-2

由于信噪比 $S \propto nVN\alpha/2^N$, 其中 n 为样品的分子密度, V 为样品体积, N 为样品分子的核自旋数目. 能用较少核自旋数 N 的分子得到较多可用赝纯态, (当 $N=5, 6$ 时为 $N-2$), 与文献[9]的方法相比, 在获得同样数目的赝纯态条件下, 本文提出的方法可间接地提高信噪比. 例如, 按 Gershenfeld 等^[7]方案, 要制备三量子位的赝纯态, 需用六个自旋体系, 此时信噪比为 $S_G \propto knv6\alpha/2^6$, 用我们的方案制备三量子位的赝纯态, 只需五个自旋体系, 信噪比为 $S \propto knv5\alpha/2^5$, 故用本方案信噪比可提高 $S/S_G \approx 2$ 倍.

3 结 语

逻辑标志法制备赝纯态还有另外的方式, 如文献[9]中所示, 它将系统直接制备成很大的子赝纯态, 然后用整个大子赝纯态模拟多量子位的演化, 实验量子计算. 与本文所提方案比较, 在相同核自旋数目的条件下, 文献[9]的方案获得的量子位数较少, 但是, 它能方便地推广到一般情况. 另外, 由于本文的方法能间接地提高信噪比, 对于灵敏度的改善无疑是个佳音. 除了逻辑标志法外, 如引言所述, 还有时间平均法和空间标记法. 在同样多的核自旋数目下, 时间平均法能用 N 个自旋制备出 N 位量子比特, 但是, 却需要对多次计算的结果作相应的处理, 才能得出需要的信息, 对于处理少数量子比特的实验, 无疑是非常有效的, 对于多量子比特的计算, 其局限性是显而易见的. 空间标志法也能用 N 个自旋制备出 N 位量子比特, 由于制备过程中在 z 方向上使用了梯度脉冲场, 因此损失了体系的极化强度, 牺牲了信噪比, 这是此法的缺陷.

- [1] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano and D. J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.*, **75**(1995), 4714.
- [2] J. A. Jones, M. Mosca and R. H. Hansen, *Nature*, **393**(1998), 344.
- [3] I. L. Chuang, N. Gershenfeld and M. Kubinec, *Phys. Rev. Lett.*, **80**(1998), 3408.

- [4] P. W. Shor, Report No. quant-ph/9508027.
- [5] L. K. Grover, *Phys. Rev. Lett.*, **79**(1997), 325.
- [6] T. Hogg, *Phys. Rev. Lett.*, **80**(1998), 2473.
- [7] N. Gershenfeld and I. L. Chaung, *Science*, **275**(1997), 350.
- [8] D. G. Cory, Mark D. Price and Timothy F. Havel, Rport No. quant-ph/9709001.
- [9] I. L. Chaung, N. Gershenfeld, M. G. Kubinec and D. W. Leung, *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A454**(1998), 447.
- [10] E. Knill, I. Chaung and R. Laflamme, *Phys. Rev.*, **A57**(1998), 3348.

PREPARATION OF PSEUDO-PURE STATES FOR NMR QUANTUM COMPUTATION*

FANG XI-MING ZHU XI-WEN FENG MANG GAO KE-LIN SHI LEI

(*State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics,*

Wuhan Institute of Physics and Mathematics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071)

(Received 5 October 1998; revised manuscript received 13 January 1999)

ABSTRACT

After analyzing the course of forming ‘garbage blocks’, we proposed an alternative for preparing the pseudo-pure states. It can be used to reduce or even to remove the ‘garbage blocks’.

PACC: 0367; 8980

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19734060).