



关于采样问题的量子优越性综述

黎颖 韩泽尧 黎超健 吕劲 袁晓 吴步娇

Review on quantum advantages of sampling problems

Li Ying Han Ze-Yao Li Chao-Jian Lü Jin Yuan Xiao Wu Bu-Jiao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 210201 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211428

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211428>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

量子计算与量子模拟

Quantum computation and quantum simulation

物理学报. 2018, 67(12): 120301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180710>

新型超导量子比特及量子物理问题的研究

Novel superconducting qubits and quantum physics

物理学报. 2018, 67(22): 228501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180845>

三种降采样成像策略的性能优化以及与传统傅里叶望远镜的比较

Performance optimization of three down-sampling imaging strategies and their comparison with the conventional Fourier telescope

物理学报. 2019, 68(7): 074203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181801>

多个子玻色-爱因斯坦凝聚气体膨胀叠加形成的量子涡旋现象研究

Quantum vortex phenomenon of many sub-Bose-Einstein condensations formed by expansion and superposition

物理学报. 2018, 67(1): 010501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171708>

经典场驱动对量子系统生存概率的影响

Influence of classical field driving on survival probability in quantum Zeno and anti-Zeno effect

物理学报. 2019, 68(23): 230303 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191078>

抽样法与灵敏度法 k_{eff} 不确定度量化

Uncertainty quantification in the calculation of k_{eff} using sensitivity and stochastic sampling method

物理学报. 2017, 66(1): 012801 <https://doi.org/10.7498/aps.66.012801>

专题: 量子计算与量子信息

编者按 量子计算与量子信息是当前受到普遍关注的研究领域. 人们热切地期盼这个领域的突破将我们带入下一次工业革命. 然而, 习惯于线性思维的人们往往对于量子技术的短期发展有过高的期待, 而对于更长时间尺度上的种种可能缺乏想象力. 近年来, 各方势力关于量子技术所展开的政治和商业博弈, 更让这个领域从来不缺少话题.

量子优越性究竟意味着什么? 什么是近未来最有价值的量子应用? 量子计算的材料基础是什么? 2020年12月, 中国科学院物理研究所量子计算研究中心组织了“量子计算与量子信息研讨会”, 以探讨这个领域的现状与挑战. 本期专题收录了由参会专家撰写的5篇综述和1篇研究论文, 希望对于回答上面的这些问题有所帮助. 更希望人们心中关于量子技术的美好愿望早日实现!

(客座编辑: 王磊 中国科学院物理研究所)

关于采样问题的量子优越性综述*

黎颖¹⁾²⁾ 韩泽尧¹⁾²⁾ 黎超健²⁾³⁾ 吕劲¹⁾ 袁晓²⁾ 吴步娇^{2)†}

1) (北京大学物理学院, 北京 100871)

2) (北京大学前沿计算研究中心, 北京 100871)

3) (广东工业大学计算机科学与技术学院, 广东 510006)

(2021年8月2日收到; 2021年10月4日收到修改稿)

利用量子态的叠加性和纠缠, 量子计算为显著地加速经典算法, 例如大数分解、求解线性方程组、量子多体系统模拟等问题, 提供了可能. 随着量子计算机硬件的快速发展, 探索量子计算超越经典计算极限方向的研究受到了越来越多的重视. 针对一类特定的问题, 现有的量子设备已经展现出超越经典计算机的能力. 但由于一些量子算法 (诸如大数分解等问题) 需要依赖于一个通用的大规模的容错的量子计算机, 考虑到现阶段的量子设备的量子比特数十分有限, 且容易与环境发生退相干, 近期的研究主要集中在探索基于含噪声的中等规模量子设备以及浅层量子线路的量子优越性. 一些采样问题被作为演示量子优越性的候选项提出. 本文介绍和总结了几个可以在现阶段的量子设备上实现的量子优越性问题, 并就其中两个备受关注的量子优越性问题——随机量子线路模拟和玻色采样及其衍生的采样问题的理论和实验进展、经典模拟算法等展开讨论. 随着上述两类量子优越性问题的超导和光学量子平台的实现, 我们预期当前和近期的量子设备将解决更多问题, 从而实现更一般的量子优势.

关键词: 量子优越性, 随机量子线路, 玻色采样, 经典模拟

PACS: 02.70.-c, 03.65.-w, 03.67.Ac

DOI: 10.7498/aps.70.20211428

1 引言

一些重要的诸如 Shor 算法的例子预示了量子计算机相较于经典计算机具有更强的能力^[1,2]. 但

这些一般量子算法的实现需要具有数千逻辑量子比特或数百万物理量子比特的通用量子计算机^[3,4]. 而目前最先进的量子设备远不能达到运行这些算法的要求. 除了量子比特的数量远远不够外, 目前的量子设备还存在着两个关键的不足: 1) 单个量

* 国家自然科学基金 (批准号: 91964101) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: bujiaowu@gmail.com

子门的误差; 2) 量子设备与环境的退相干作用. 为了有效地阐释量子计算机和经典计算机相比的优势所在, Harrow 和 Montaro^[5] 形式化地定义了量子优越性问题需要满足的 4 个条件 (以及一个可选的条件): 1) 一个具有良好定义的计算问题; 2) 一个可以求解该问题的适用于当前量子设备的量子算法; 3) 任何经典模拟器需要超大规模的时间和空间; 4) 复杂性理论的假设支持. 除以上 4 个条件外, 另一个可选的条件为: 存在一个可以有效区分量子算法和经典竞争者使用有限资源的输出结果的方法. 近些年来, 一些采样问题被作为量子优越性的候选项提出.

广义的采样问题是指得到特定分布的一个样本. 于是可以由多次独立采样的结果得出样本背后分布的性质. 在量子采样问题中, 在指定测量基矢下, 经过一个量子过程后得到的最终的量子态可以被视为基矢的特定分布, 因此, 对该量子态的一次测量就对应一次采样. 本文讨论的具有量子优越性的采样问题包括随机线路的采样问题^[6,7]、瞬时量子多项式线路的采样问题^[8]、玻色采样^[9]及其衍生出的问题^[10–13], 以及含有一个干净的量子比特的高混合的确定性量子计算 (DQC1)^[14–16]. 理论上, 这些采样问题在基于一定复杂性假设下都是经典求解困难的.

随机线路采样 随机量子线路是指: 一类构造为单量子比特门层和双量子比特门层交替出现的量子线路, 其中单量子比特门层中的比特门具有一定的随机性, 但单比特和多比特门的排放位置固定的一种线路簇, 而一次采样则对应于对一个容易制备的量子初态 (通常是全 0 态), 经过随机线路后在计算基下进行一次测量, 即采样. 在随机线路采样这一量子优越性问题的进程中, Boixo 等^[6]提出了一个特定网格结构的量子随机线路采样问题, 并估计当量子设备在有接近 50 个量子比特时, 经典计算机即无法有效模拟该电路, 从而预计 50 个量子比特的量子超导处理器即可以实现量子霸权. 因为当下的量子计算机的噪音和退相干作用, 该文献也论述了如何去验证量子设备采样的可靠性. 随后, Arute 等^[7]实现了 53 个量子比特——悬铃木处理器的 20 层随机量子线路, 并在其上展示了量子优越性的采样实验. 悬铃木处理器可以在 200 s 的时间内以 0.2% 的保真度采样百万量级次一个量子电路. 中国科学技术大学潘建伟团队^[17]实现了 66 个

量子比特的超导设备——祖冲之 2.0, 当 66 个量子比特全部运行时, 可达到单比特门的误差平均值为 0.14%, 两比特门的误差平均值为 0.76%, 读取误差的平均值为 4.77%. 为了验证该设备的有效性, 他们在其上执行了 56 个量子比特, 20 层的随机线路采样实验. 最近, 该团队又在祖冲之 2.0 的基础上升级了祖冲之 2.1 超导量子芯片, 把平均读出保真度从 95.48% 提高到 97.74%, 并在祖冲之 2.1 上实现了 60 个量子比特 24 层随机线路的采样实验^[18].

对于随机线路采样问题, 是否存在有效的经典模拟器也受到了广泛研究. 针对 Boixo 等^[6]提出的随机线路的特定结构, Iboldsymbol 团队^[19]利用张量网络的方法, 在 Iboldsymbol 的超算上计算出了 7×7 量子比特、深度为 27 层的随机线路的所有振幅, 以及 7×8 量子比特、深度为 22 层的部分振幅. 之后, Google 团队^[20]利用冯诺依曼路径的方法, 在 Google 云平台上实现了 7×8 量子比特、深度为 30 层的 2×10^5 个振幅的计算. 与此同时, 阿里团队^[21]提出, 他们可以利用一个分布式经典模拟算法, 在阿里云平台上实现 8×8 量子比特、深度为 40 层的一个振幅的计算, 以及 $9 \times 9 \times 40$, $10 \times 10 \times 35$, $11 \times 11 \times 31$, $12 \times 12 \times 27$ 的一个振幅的计算 (这里 $l_1 \times l_2 \times d$ 表示 $l_1 \times l_2$ 的量子比特上的深度为 d 的电路). Li 等^[22]通过将张量网络和“隐分解”的方法相结合, 在太湖之光上实现了 7×7 量子比特、深度为 39 层的全振幅的计算, 以及深度为 56 层的一个振幅的计算. 本源量子团队^[23]估算他们可以在 16 天内针对该类型电路实现 72 比特, 22 层的一次采样. Chen 等^[24]在神威上进行模拟, 可运行一维链上的 1000 量子比特以及二维 125×8 量子比特 42 层一个振幅的计算, 72 量子比特 32 层 (2D-Bristlecone) 的随机量子线路的一次采样. 阿里团队之后又在文献^[25]中提出他们可以对 Bristlecone-70 结构 (70 量子比特) $1 + 32 + 1$ 深度的随机线路, 通过阿里云平台在 0.43 s 内求出任意振幅 (以及 70 量子比特 $1 + 36 + 1/1 + 40 + 1$ 深度采样时间 5.6/580.7 s). 这里需要注意的是全振幅的模拟可以用来生产若干次采样的样本, 另一方面, 一次采样也可以利用蒙特卡罗等方法通过计算少量次振幅进行估计.

针对 Arute 等^[7]提出的 53 量子比特的量子计算机, Iboldsymbol 团队^[26]在 2019 年针对该问题设计了经典模拟采样算法, 并通过小的样例估计出

在 Summit 超算上可在少于 2.55 天的时间内得到 20 层的采样, 以及 6.45 天内得到 36 层的采样. 之后阿里团队^[27]在 2020 年针对该电路采样问题, 进行经典模拟, 并在阿里云上进行测试, 可在少于 20 天的时间内实现该问题的模拟 (42 层, 保真度 0.2%). 近期文献^[28]通过一种张量网络方法可以只用 60 GPU 在 5 天内模拟 (20 层, 保真度 73.9%).

瞬时量子多项式线路的采样 和随机线路采样类似, 瞬时量子多项式线路的采样也是针对一种特定结构的量子线路的采样, 与随机线路不同的是, 瞬时多项式线路除了第一层和最后一层外, 中间层都是由对易的对角门构成, 因为是对易的, 所以中间的所有门可以通过任意的时间次序执行, 这也解释了这里的“瞬时”的含义. Shepherd 和 Bremner^[8]介绍了一个量子优越性问题——瞬时量子多项式 (instantaneous quantum polynomial time, IQP) 协议. IQP 协议是一个受限的, 非通用的量子计算模型. 该协议可以被视为是一个两体的经典通信信道. Alice 设计了一个经典不可解的问题, 并拥有一个可用来验证结果的正确性的隐变量. Bob 用 Alice 的输入执行 IQP 线路 (一个多项式深度的电路). 最终, Alice 通过结合协议运行的时间以及收到结果的正确性来论述量子霸权. Bremner 等^[29]证明了 IQP 线路的计算即使以 41% 的乘法性近似也是经典模拟困难的. 之后 Bremner 等^[30]进一步证明了在基于一些额外的复杂性假设下, 该问题的加法性近似也是经典模拟困难的. IQP 协议后来被推广到量子计算的连续变量 (continuous variable, CV) 模型中^[31,32].

玻色采样 玻色采样 (boson sampling, BS) 是建立在光学系统上的一个量子过程. 标准的 BS 是在线性光学网络的输入端的前 n 个模中每个注入一个光子, 该线性光学网络的元器件的组件系数具有一定的随机性, 并在输出端对光子数进行采样. Aaronson 和 Arkhipov^[9]在 2011 年提出了将 BS 作为量子优越性的一个候选问题. BS 的原型^[9]需要用到一个线性光学网络装置. 因为该原型需要制备很多个高品质的单光子, 实验上实现该过程也很困难. 后来 Lund 等^[10]在此基础上提出了散射玻色采样 (scattershot boson sampling, SBS), 该模型解决了初始模型单光子制备比较困难的问题, 但却需要一个额外的装置及测量过程来确定输入的光子模式. 之后 SBS 模型被进一步进行了改

良^[11], 即高斯玻色采样 (Gaussian boson sampling, GBS). GBS 之后被推广为振动玻色采样^[33], 该模型是在 BS 的启发下对分子谱的研究. GBS 利用单模压缩态 (single-mode squeezed states, SMSS) 作为输入, 且不需要通过额外的装置和测量来确定输入态. 需要强调的是, 虽然 GBS 是为了降低标准玻色采样和 SBS 实验的困难性提出的, 但目前仍然缺少严格的复杂性证据证明该过程是经典计算困难的. 然而, 有充分的理由相信该问题的确是经典计算困难的, 因为 Hafnian 问题 (GBS 的输出概率和矩阵的一个函数 Hafnian 相关) 可以作为积和式的推广代入玻色采样中, 即可得到 GBS. 除此之外, GBS 有很多应用, 比如求解图上的一些理论问题^[34–37]、近似优化问题^[38]、分子对接问题^[39]、点处理问题^[40]等. 考虑到 GBS 模型输出端收集每个模中的光子数的困难性, Quesada 等^[41]提出了带阈值的 GBS 模型, 该模型和 GBS 模型的区别是在接收端只是探测有无光子, 并不对光子数进行计数, 他们在文章中也论证了该模型的计算困难性. 最后, 上海交通大学的金贤敏团队^[13]近期也提出了时间戳玻色采样.

玻色采样及其衍生问题在实验上也取得了显著的进展^[42–51]. 特别地, Wang 等^[51]最近实现了在 60 个模中注入 20 个光子的干涉仪. Bentivegna 等^[52]实现了第一个 SBS 实验, 其中 6 个不同的光子对整合到光子电路中. Zhong 等^[49]实现了第一个 GBS 实验, 其中以很高的采样率实现了 5 个光子的 GBS. Su 等^[48]通过使用光子数分析探测器, 可以将高斯态转变为非高斯态, 并给出了使用 GBS 设备实现的非高斯态的制备. 值得关注的是, 近期潘建伟团队^[53]实现了一个 100 个模的线性光学网络——九章, 并在其上执行了带阈值的高斯玻色采样实验, 实验成功地在 67 个模中观测到光子.

玻色采样及其衍生问题的经典模拟在近些年也取得了一定进展. Neville 等^[54]通过 Metropolis 独立采样方法, 可以得到玻色采样的一次近似采样, 他们可以在普通笔记本上实现 30 个光子的一次近似采样, 在超算上可以实现 50 个光子的一次近似采样. 并通过和其他采样算法 (包括暴力采样、拒绝采样方法) 作比较, 来证明该近似采样算法的正确性. Clifford 和 Clifford^[55]给出了一个 $\theta(n2^n)$ 时间、多项式空间的一个精确采样算法, 其中 n 是光子数. Wu 等^[56]提出了一个 $O(m \sinh^2 r) +$

$O(\text{poly}(n)2^{8n/3})$ 时间、多项式空间的 GBS 模拟采样算法, 其中 m 是模数, n 是光子数, r 是压缩参数. 当有指数规模的计算空间时, 可以进一步将时间复杂性提升到 $O(m \sinh^2 r) + O(\text{poly}(n)2^{2n})$. 可以在华为昆仑服务器上实现 20 个光子的采样, 并通过模拟预测可在神威超算上实现 30 个光子的采样. Quesada 等 [41] 针对带阈值的 GBS 模型给出了一个 $O(mn2^n)$ 时间复杂性的一个经典模拟算法, 并在文献 [57] 中对 GBS 进行了经典模拟, 他们的算法可以在 56 个 CPU 的云上进行 20 个光子的精确采样.

量子随机线路采样作为量子霸权的候选项之一, 近几年来备受关注. 这一方向的超导量子设备在不断地更新, 经典无法超越量子的趋势也越来越显著. Iboldsymbol 更是计划在 2023 年实现 1000 量子比特的量子计算机. 相信在未来的某一天, 当量子随机线路的规模和精度各自达到某个阈值时, 人们将无法再找到可以在几个小时内甚至几年内在经典计算机上进行有效模拟的算法. 而在玻色采样及其衍生物实验中, 近期潘建伟团队 [53] 在基于光学器件搭建的实验平台上实现的高斯玻色采样至今仍无经典计算机可以有效模拟, 也充分显示了量子优越性的里程碑进展.

本文组织如下, 第 2 节介绍 3 种量子优越性相关的采样问题. 由于 IQP 电路的采样受到的关注较少, 在第 3 节和第 4 节介绍实验进展和经典模拟进展时, 只讨论了量子随机线路采样和玻色采样的进展. 第 5 节总结和讨论量子优越性的现状和未来.

2 优越性的问题简介

本节主要介绍量子随机线路的采样、IQP 电路采样和玻色采样问题需要处理的具体任务.

2.1 量子随机线路采样

2.1.1 方案介绍

在量子计算机上, 采样就是对随机线路进行测量. 而经典计算机上则对应的是计算输出的希尔伯特空间上的概率分布上的一次采样. 随机线路的采样在经典计算机上进行模拟被认为是困难的 (没有多项式时间的经典算法能够做到) [58]. 而对量子计算机本身, 要实现大规模高深度的计算也对硬件

的容错率提出了很高的要求. 因此量子电路的结构设计需要考虑到超导硬件的设计, 以及支持的简单门操作类型. 下面介绍两个特定结构的随机线路的模型.

Boixo 等 [6] 提出的随机线路模型如下:

- 执行一层 H 门.
- 重复 d 轮下面两步操作.

1) 交替地执行一次图 1 中的 CNOT 门, 这里一个黑点代表一个量子比特, 两个黑点之间的连线表示这两个量子比特有门作用.

2) 在每个量子比特上, 随机地作用一个集合 $\{I, X^{1/2}, Y^{1/2}, T\}$ 中的门.

这里 X, Y 依次为 Pauli- X 门和 Pauli- Y 门. 令 $A^t := e^{-itA/2}$. 根据该定义可得图 1 中 $X^{1/2}$ 和 $Y^{1/2}$ 门的定义.

随机线路采样是从这样的随机线路中进行一次采样 (在电路结束时对电路在计算基下进行测量). 如果想要体现量子的性质, 这里深度 d 需要满足一定要求. 理想的量子随机线路采样的输出分布的概率值满足 Potor-Thomas 分布, Boixo 等 [6] 通过模拟实验展示了在深度超过 20 层时, 量子电路输出的概率值跟 Portor-Thomas 分布逐渐开始靠近.

Google 团队在 2019 年提出了一个更大规模的网格结构, 门的摆放更复杂的量子随机线路模型——悬铃木量子计算机, 并且在量子设备上进行了测试, 可以在几秒内实现 53 个量子比特, 20 层两比特门的随机线路保真度至少为 0.2% 的采样, 该随机线路结构如图 2 所示 [7].

因此, 在 Google 提出的随机量子线路采样问题框架中 [6,7], 随机量子线路 U 是由一系列电路层组成的, 每层电路在一组单比特和双比特门中按照一定的限制随机地选取一系列门, 电路层的深度为 d 时, 产生的分布为 $p_U(x) = |\langle x | \psi_d \rangle|^2$, 其中 x 是计算基下的比特串.

随后, 中国科学技术大学潘建伟团队 [17] 实现了一个规模更大的 66 量子比特的超导设备——祖冲之 2.0 处理器. 该处理器的结构也是网格状结构, 研究团队在其上实现了 56 个量子比特, 20 层的随机量子线路采样实验. 在祖冲之 2.0 基础上升级的祖冲之 2.1 的平均读出保真度由 95.4% 提升到了 97.74%, 潘建伟团队在祖冲之 2.1 上实现了 60 量子比特 24 层深度的随机量子线路 [18].

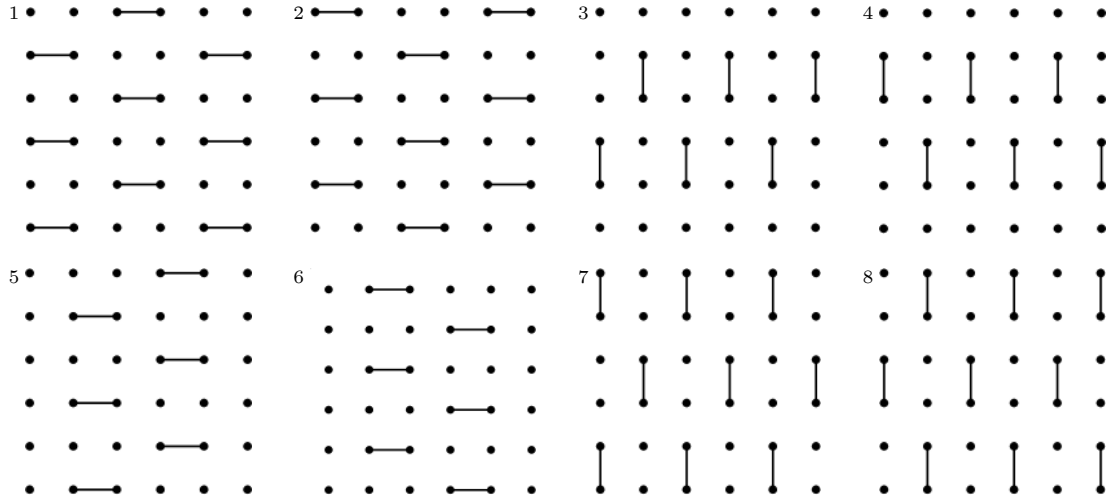


图 1 随机线路的 CNOT 门的 8 种不同的摆放方式^[6]. 其中第 0 层全部摆放 H 门, 电路中每 8 层循环一次 (重复图中 1—8 层), 空白节点处随机放置 $I, T, X^{1/2}, Y^{1/2}$ 门, 两比特门为 CZ 门

Fig. 1. Eight different layouts of the CNOT gate in the random circuit, where all of qubits are performed H gate in the 0-th layer, and cycle once every 8 layers in the circuit (repeat 1–8 layers of this graph), the blank vertices are laid out $I, T, X^{1/2}, Y^{1/2}$ randomly, and the two-qubit gates are all CZ gates^[6].

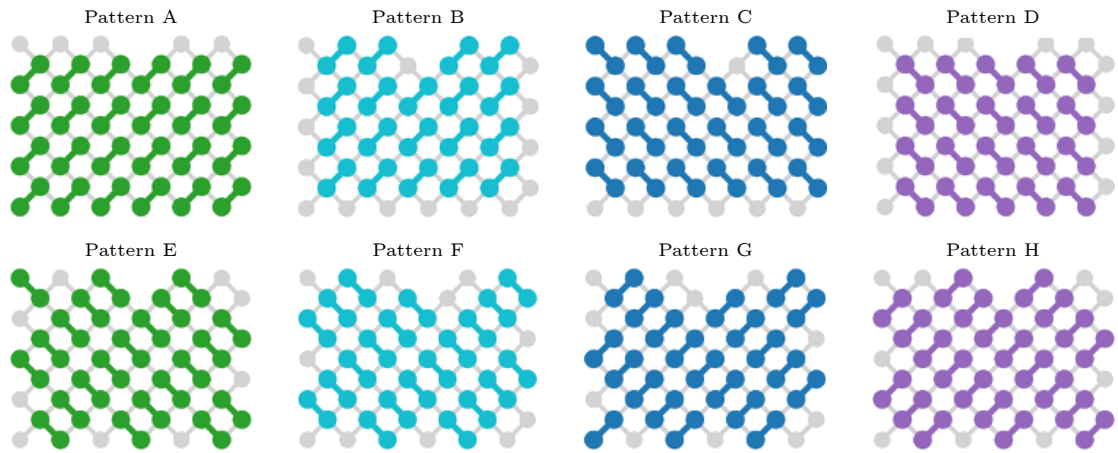


图 2 悬铃木处理器随机线路架构^[7]. 其中第 0 层全部摆放 H 门, 电路每层迭代重复模式 ABCDCDBA, 两个模式中间由一层随机放置的单比特门 $X^{1/2}, Y^{1/2}, W^{1/2}$ 构成, 两比特门为控制相位门和部分 i SWAP 门的乘积 (部分 i SWAP 门后跟随一个控制相位门构成)

Fig. 2. Random circuit architecture for Sycamore processor, where all of qubits are performed H gates in the 0-th layer, the layer of the circuit iterates and repeats the pattern ABCDCDBA, a layer of random single-qubit gates are performed between two modes, which constructed by $X^{1/2}, Y^{1/2}, W^{1/2}$, the two-qubit gate is the multiplication of the partial- i SWAP gate and control-phase gate (constructed by partial- i SWAP gate followed by a control-phase gate)^[7].

2.1.2 随机线路采样的基准

Boixo 等^[6] 通过交叉熵差别 (cross entropy difference) 论述了他们提出的网格上的量子线路采样的正确性. 他们展示了当电路可模拟时, 其交叉熵可以被高效地通过测量估计出. 当经典计算机无法有效模拟时, 可以通过将电路划分为若干子部分分别进行模拟来对交叉熵进行估计, 从而对输出结果的正确性进行测试. 接下来简述一下量子优越性的基准——交叉熵的定义.

首先, 令 $|\psi\rangle = U|0\rangle$ 为一个给定的随机线路 $U \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$ 的输出态. 考察样本集合 $S = \{x_1, \dots, x_m\}$, 其中 x_i 是一个长度为 n 的二进制串, 通过对 $|\psi\rangle$ 的每个量子比特在计算基下进行一次测量得到. 令 $p_A(x|U)$ 表示满足由算法 A 构造出的分布中样本 $x \in \{0, 1\}^n$ 出现的概率, 其中算法 A 构造的分布是对 $U|0\rangle$ 在计算基下展开的分布的模拟, $p_U(x)$ 表示 x 的精确的概率值. $p_A(x)$ 和 $p_U(x)$ 之间的交叉熵定义为

$$H(p_A, p_U) \equiv - \sum_{x \in \{0,1\}^n} p_A(x|U) \log p_U(x). \quad (1)$$

Boixo 等^[6]论述了如果该 7×7 网格的随机线路深度足够大, 则 $p_U(x)$ 的分布接近 Porter-Thomas 分布 $N e^{-Np}$, 这里 $N = 2^n$ 为态空间大小. 因此, 在对该随机线路采样的优越性进行验证时, 他们通过对实验测量结果所得的分布和 Porter-Thomas 分布进行比较, 判断该输出的分布是否真实有效. 实际计算该交叉熵时, 通常是通过采样得到的包含 m 个样本的集合 S 来对其均值进行估计. 此外, 他们定义了一个用于衡量算法 A 采样正确性的量——交叉熵差别:

$$\begin{aligned} \Delta H(p_A) &\equiv H_0 - H(p_A, p_U) \\ &= \sum_x \left(\frac{1}{2^n} - p_A(x|U) \right) \frac{1}{\log p_U(x)}. \end{aligned} \quad (2)$$

这里算法 A 既可以是多项式时间或者指数时间的经典模拟算法, 也可以是量子设备实现. 如果算法 A 输出的样本满足均匀分布, $\Delta H(p_A) = 0$, 如果算法 A 能够真实还原出 $p_U(x)$ 的理论分布, $\Delta H(p_A) = 1$. Boixo 等^[6]提出通过判断交叉熵差别是否大于 0 来判断其量子效应. 注意到这里为了得到交叉熵差别, 需要一个强大的经典计算机来得到 $p_U(x_j)$.

在验证悬铃木处理器输出结果的正确性中, Arute 等^[7]提出利用线性交叉熵作为基准的保真度. 该线性交叉熵定义为

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{XEB}} &\equiv 2^n \langle P(x_i) \rangle_i - 1 \\ &= 2^n \sum_{x \in \{0,1\}^n} p_A(x|U) p_U(x) - 1, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 n 是量子比特的数目, $P(x_i)$ 是理想的量子电路测得 x_i 的概率, 且这里的 x_i 是利用算法 A (算法 A 可以是实验观测) 得到的二进制串. 如果实验没有任何误差, 对实验结果进行采样得到的平均值 $\mathcal{F}_{\text{XEB}} = 1$. 如果实验输出的是一个均匀分布, 此时 $\mathcal{F}_{\text{XEB}} = 0$. 对于实际的量子设备, $\mathcal{F}_{\text{XEB}}$ 是一个介于 0—1 之间的数. 这里需要注意的是, 给定一个 x_i , $P(x_i)$ 的值只能通过经典模拟该量子线路进行计算. 因此, 由于量子优越性问题的困难性, 当线路规模足够大时, $\mathcal{F}_{\text{XEB}}$ 是无法在有效的时间内计算得到的, 因此需要近似的方法对 $\mathcal{F}_{\text{XEB}}$ 进行估计. 比较 (2) 式和 (3) 式可知, 线性交叉熵和交叉熵差别的唯一区别是这里直接用概率替换了原来的对数项.

Arute 等^[7]说明了当保真度大于 32% 时, (对数) 交叉熵区分具有更小的标准差, 反之当保真度小于 32% 时, 线性交叉熵具有更小的标准差. 由于验证悬铃木处理器的保真度较小, 因此 Arute 等^[7]中采用的是线性交叉熵方法进行保真度的分析. Aaronson 和 Gunn^[59]证明了与线性交叉熵相关的一个判定量子优势的问题无经典多项式时间算法可以求解.

2.2 IQP 线路的采样

一个 IQP 线路是一个形式为 $C = H^{\otimes n} D H^{\otimes n}$ 的量子线路, 其中 H 是 Hadamard 门, D 是由 n 的多项式个对角门生成的一个对角矩阵^[60]. IQP 采样问题是通过将 C 作用于初始状态 $|0\rangle^{\otimes n}$ 而产生的 n 位字符串上的分布 p 进行采样, 之后在计算基上测量每个量子比特 (p 表示初始无噪声分布). 当 D 是在集合: (1) $\sqrt{CZ}$, T 门; 或者 (2) Z, CZ, CCZ 中均匀选取时, IQP 线路的采样问题是经典模拟困难的. 该困难性基于玻色采样问题中的复杂性假设 PGC (permanent of Gaussian conjecture) 问题在 IQP 下的对应. Fujii 和 Tamate^[61]使用量子容错理论表明, 在噪声很小的情况下, IQP 线路的采样问题仍是计算困难的.

以上的 IQP 线路允许门在系统中的任何量子位之间应用. 这意味着 D 满足集合 (1) 的随机线路中可能有 $O(n^2)$ 个门, 满足集合 (2) 的随机线路可能有 $O(n^3)$ 个门, 其中许多是作用在非邻接量子比特上的. 从实验的角度来看, 特别是针对超导量子计算机, 这是具有挑战性的, 因为超导量子设备的量子比特的作用都是局限在近邻的. 如果想要将非邻接量子比特上的门调整到邻接量子比特上执行, 需要增加 SWAP 门, 但一个问题是 IQP 线路中不允许有 SWAP 门. 于是最近 Bremner 等^[62]提出了稀疏的 IQP 采样, 该稀疏的 IQP 采样与一个稀疏图相关, 且其采样在一定复杂性假设下仍是计算困难的. 已经被证明, 稀疏的 IQP 采样在有 $O(n \log n)$ 长度个门或者深度为 $O(\sqrt{n} \log n)$ 时, 在二维的格点结构下就可以证明其计算难需要的一个关键复杂性假设.

2.3 玻色采样及其衍生问题

继 Aaronson 和 Arkhipov^[9]提出玻色采样问

题后, 为了使得该问题更容易在实验上实现, 有很多更容易在实验上实现的衍生问题相继被提出.

2.3.1 玻色采样

原始的玻色采样问题^[9]可以描述为: n 个无相互作用、不可分辨的玻色子, 在单粒子希尔伯特空间维数为 m 的 Fock 空间中, 从某个给定的初始状态开始, 经过确定的演化, 在末状态进行投影到占据数表象基上的测量, 每次测量获得一个 n 玻色子态, 即称为进行了一次玻色采样. 在初始条件、演化给定的情况下, 采样结果将服从一个确定的概率分布.

以实现玻色采样实验最常用的平台——线性光学平台为例, 如图 3 所示, 将 n 个单光子由波导输入一个线性光学网络中, 该网络中可能存在不同波导模式间的互相叠加、干涉等, 所以也被称作干涉仪, 并可在输出的 m 根波导中探测到光子. 在理想情况下, 每根波导仅能携带一种模式, 输入态到输出态演化可以在占据数表象下记为

$$|s_1, s_2, s_3, \dots, s_m\rangle \rightarrow |t_1, t_2, \dots, t_m\rangle, \quad (4)$$

其中 s_i 表示向第 1, 2, 3, $\dots$ 个模式分别输入 $s_1, s_2, s_3, \dots$ 个光子 (在图 3 的示意图中, 前 n 个模式分别各输入了一个光子, 而后 $m - n$ 个光子数为 0, 这是实验实现时的一般做法), t_i 表示在第 i 个输出模式中探测到 t_i 个光子, 有 $\sum_{i=1}^m s_i = \sum_{i=1}^m t_i = n$. 遵从量子光学的一般记号, 描述单粒子演化的酉矩阵 U 定义为

$$b_j = \sum_{i=1}^n U_{ij} a_i, \quad (5)$$

其中 b_j , a_j 分别对应 m 个输出模式/输入模式光子的湮灭算符. 由于玻色子在这个过程中无相互作用, 整个 Fock 空间中多体态的演化算符 W (即输出态服从 $|\Psi_{\text{out}}\rangle = W |s_1, s_2, s_3, \dots, s_m\rangle$) 可以由单粒子的演化算符 U 完全确定, 故采样得到的分布也可以显式计算得到. Aaronson 和 Arkhipov^[9] 证明了

$$\langle t_1 t_2 \dots t_m | W | s_1 s_2 \dots s_m \rangle = \frac{\text{perm}(U_{\text{ST}})}{\sqrt{\prod_i t_i! \prod_i s_i!}}. \quad (6)$$

因此玻色采样结果服从的概率分布为

$$\begin{aligned} p(t_1, t_2, \dots, t_m) &= |\langle t_1 t_2 \dots t_m | W | s_1 s_2 \dots s_m \rangle|^2 \\ &= \frac{|\text{perm}(U_{\text{ST}})|^2}{\prod_i t_i! \prod_i s_i!}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中, U_{ST} 矩阵为将 U 矩阵的第 i 列重复 s_i 次、第 j 行重复 t_j 次形成的一个 n 维矩阵, perm 表示该矩阵的积和式, 对于一个一般的 n 维方阵 A , 积和式定义为

$$\text{perm}(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \prod_{i=1}^n a_{i, \sigma(i)}. \quad (8)$$

对比行列式定义 $\det(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \left(\text{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n a_{i, \sigma(i)} \right)$,

两者十分相似, 但对于积和式, 一般而言 $\text{perm}(AB) \neq \text{perm}(A) \text{perm}(B)$, 而能在多项式时间内计算行列式的快速算法均依赖于行列式的这一性质, 故积和式的计算对于经典计算机而言将会是一个困难的问题 (更严格的分析证明积和式计算属于 #P-hard 问题), 而显式地计算玻色采样的概率分布 (6) 式将包含积和式的计算, 从而, 我们期待可以借助玻色采样实现量子霸权.

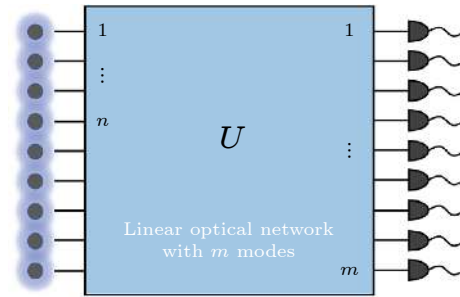


图 3 玻色采样模型^[56]. 输入是 n 个单光子, 经过线性光学网络后, 可在输出的 m 个模中探测光子

Fig. 3. Device of boson sampling^[56]. The input are n photons, and one can detect photons on the m output modes through a linear optical network.

应当注意, 一个能够实现玻色采样的量子计算机, 其“计算过程”即体现为多体玻色子态的制备、演化以及最终测量的过程; 另外, 高效地实现玻色采样并不意味着能够高效地计算积和式, 具体来说, 光子数/模式数的增多将使得输出端测量得到某一给定状态的概率大幅下降, 即“采样率”很低, 进而通过计数某种输出状态的频率来准确估计相应积和式的值也变得非常困难; 玻色采样过程可以看作是量子光学中 Hong-Ou-Mandel 实验的扩展, 从而, 类似于 Hong-Ou-Mandel 实验, 不同模式光子之间不可忽略的量子干涉现象导致的巨大的多体希尔伯特空间维数是实现量子霸权的先决条件, 而这对 U 矩阵的形式提出了要求, 即 U 的形式过于简单将导致该玻色采样过程成为经典计算机可

以有效模拟的, 一般认为, 酉演化 U 矩阵的选择应当服从随机酉矩阵的 Haar 测度, 即只要 U 足够任意, 便认为其可以实现量子优越性.

2.3.2 高斯玻色采样

玻色采样提出后, 受制于确定性单光子源制备等难点, 其实实验实现一直停留在小规模展示阶段, 难以达到实现量子优越性要求的 $n \approx 50$ 界限. 与此同时, 一些基于玻色采样的理论工作被相继提出, 例如容许光子损耗的玻色采样 (lossy boson sampling)^[12], 输入 $n+k$ 个光子, 但后选择出 n 个光子的输出态, 即容许 k 个光子的损耗, 由于对该过程的理论分析依赖于对损耗过程的理解, 所以对其能够实现量子优越性的阈值分析仍然有待解决.

在另外一些工作中, 研究者关注于利用非确定性的、更高效、易于制备的光子源, 以扩展原始的玻色采样, 达到实现量子优越性的目标. 如 Lund 等^[10] 提出了后来被称为 SBS 的方案, 如图 4 所示. 使用 m 模的线性光学网络, 将 m 个概率型光子源分别置于其输入端, 每个光子源将产生处于双模压缩态的光子 (区别于单光子源的输入态具有确定的光子数, 由于其光子数的概率分布特性, 也被称作高斯态的一种), 利用双模压缩态的特性, 可以设计光路, 在输出端后选择出 n 光子的测量事件, 但是, 这一方案的输入输出均有 $\binom{n^2}{n}$ 种可能, 导致了采样空间的大幅增长.

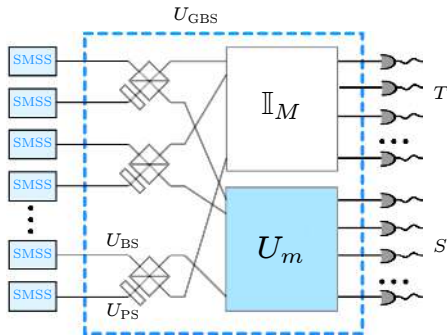


图 4 SBS 的装置简介^[63]. 该模型中输入为 $2m$ 个单模压缩态, 在其进入分束器和相移子装置后产生双模压缩态, 并通过一个额外的测量装置来固定 SBS 的线性光学装置 U_m 输入的光子数

Fig. 4. Brief introduction of SBS device^[63]. In this model, the input are $2m$ single-mode compressed states, and the two-mode compressed states are generated after entering the beam splitter and the phase-shifting sub-device. An additional measuring device is used to fix the number of input photons for the linear optical device U_m of SBS.

Kruse 等^[63] 随后注意到了 SBS 方案的缺陷: 该方法利用了概率型的光子源, 但其后选择过程却抛弃了光子源的概率特性. 他们据此提出了 GBS 的方案 (图 5), 去掉了 SBS 方案中的后选择过程, 直接将单模压缩态注入干涉仪, 并在输出端进行光子数测量, 他们证明了, 输出态测量得到光子数 $\mathbf{S} = (s_1, s_2, \dots, s_m)$ 的概率为

$$\Pr(\mathbf{S}) = \frac{1}{\sqrt{\det(\boldsymbol{\sigma})}} \frac{\text{Haf}(\mathbf{A}_S)}{s_1! s_2! \cdots s_m!}, \quad (9)$$

其中 $\mathbf{A}_S$ 是分别取 $\mathbf{A}$ 中 i 行/列和第 $m+i$ 行/列 s_i 次得到的矩阵, 矩阵 $\mathbf{A}$ 定义为

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I}_m \\ \mathbf{I}_m & 0 \end{pmatrix} [\mathbf{I}_{2m} - \boldsymbol{\sigma}_Q^{-1}], \quad (10)$$

且有 $\boldsymbol{\sigma}_Q = \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{I}_{2m}/2$. 协方差矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 只包含被观测出的模的信息 $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \bigoplus_{j=1}^m \cosh r_j & \bigoplus_{j=1}^m \sinh r_j \\ \bigoplus_{j=1}^m \sinh r_j & \bigoplus_{j=1}^m \cosh r_j \end{pmatrix}$ 和线性光学网络 U_m 的信息,

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_m & 0 \\ 0 & \mathbf{U}_m^* \end{pmatrix} \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger \begin{pmatrix} \mathbf{U}_m^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{U}_m^t \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Haf 表示 Hafnian 函数, 矩阵的 Hafnian 函数定义为

$$\text{Haf}(\mathbf{V}) := \sum_{\sigma \in \mathcal{M}_n} \prod_{j=1}^{n/2} V(\sigma_{2j-1}, \sigma_{2j}), \quad (12)$$

其中 $\mathcal{M}_n$ 是 $[n] := \{1, 2, \dots, n\}$ 中的所有完美匹配构成的集合, $V(i, j)$ 是 $\mathbf{V}$ 的第 (i, j) 个元素. 例如, 当 $n = 4$ 时, $\mathcal{M}_4 = \{(12)(34), (13)(24), (14)(23)\}$, 其中 (ij) 是一个匹配对, 因此

$$\begin{aligned} \text{Haf}(\mathbf{V}) &= V(1, 2)V(3, 4) + V(1, 3)V(2, 4) \\ &\quad + V(1, 4)V(2, 3). \end{aligned} \quad (13)$$

从定义来看, Hafnian 是排列不变量. 交换 $\mathbf{V}$ 中的任意两列, 以及相同标号的两行, 得到的新矩阵的 Hafnian 值保持不变. 由 Haf 的定义知, Haf 可以看作是积和式的扩展, 即:

$$\text{Perm}(\mathbf{G}) = \text{Haf} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^t & 0 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

从而, 任何能够计算 Hafnian 的算法也一定可以以同样的复杂度解决积和式的计算问题, 这一结果, 使得高斯玻色采样一经提出, 便成为在线性光学体系实现量子优势的有效方案. 类似于积和式, 精确地计算矩阵 Hafnian 是 #P-hard 的^[64], 这暗示着具有相同压缩参数的 GBS 是经典计算难的, 求解 Hafnian 的经典最好的算法需要时间 $O(n^3 2^{n/2})$ ^[65].

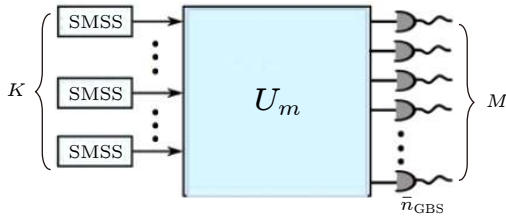


图5 GBS的装置简介^[63]. 输入端为 K 个单模压缩态注入线性光学网络, 在输出端的 M 个模中进行光子数探测

Fig. 5. Brief introduction to GBS device^[63]. The input terminal is a K single-mode compressed state injected into the linear optical network, and the photon number is detected in M modes at the output terminal.

更进一步地, 考虑到实验上光子探测器实现光子数分辨的难度, 即探测器很多时候只能准确判断某个模式有/无光子, 而不能判断有几个光子, 基于这点, 高斯玻色采样可以被扩展为带阈值的玻色采样, Hafnian 将继续扩展为 Torontonian^[41]. 带阈值的玻色采样也是最容易进行大规模实验的方案.

Quesada 等^[41]给出了带阈值的高斯玻色采样问题输出结果 $\mathbf{S} = (s_1, \dots, s_m)$ 的概率为

$$\Pr(\mathbf{S}) = \frac{\text{Tor}(\mathbf{A}_{\mathbf{S}})}{\sqrt{\det(\boldsymbol{\sigma})}}, \quad (15)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 是协方差矩阵, $\mathbf{A}_{\mathbf{S}}$ 是取 $\mathbf{A}$ 中与 $\mathbf{S}$ 相关的行和对应的列得到的矩阵, Tor 函数定义为

$$\text{Tor}(\mathbf{A}) = \sum_{z \in P([N])} (-1)^{|z|} \frac{1}{\sqrt{\det(\mathbf{I} - \mathbf{A}_{(z)})}}, \quad (16)$$

其中 $P([n])$ 是集合 $[n] = \{1, \dots, n\}$ 的一个指数集合 (包含所有子集合的集合), 是矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$ 的 Torontonian 函数.

3 实验进展

近几年来, 随机线路的采样和玻色采样及其衍生的采样问题在实验上均已取得了显著的进展. 下面简要介绍一下量子随机线路和玻色采样的近期实验设计方案.

3.1 量子随机线路采样的实验进展

2019 年, Google 团队首次在 Sycamore 超导量子平台上实现了量子优越性^[7]. Sycamore 量子芯片上有 53 个可用的量子比特, 86 个耦合器, 量子比特和耦合器都用 transmon 构成, 利用微波激发量子比特, 通过磁通调节耦合, 通过连接的谐振

器读出量子态. Sycamore 的平均单比特错误率达到了 0.15%, 同时激发时也只略微高出一点, 控制在 0.16%; 双比特平均错误率为 0.36%, 同时激发时为 0.62%; 单独读出错误率为 3.1%, 同时读出错误率为 3.8%. 通过简单地把门操作和读出操作的保真度相乘, 可以估计系统的保真度. 在该实验中, 最大的随机量子线路有 53 个量子比特, 1113 个单比特门, 430 个两比特门, 对每个量子比特进行一次测量, 通过相乘的简单模型估计系统的保真度可达到 0.2%. 交叉熵 $\mathcal{F}_{\text{XEB}}$ 的不确定度为 $1/\sqrt{N_s}$, 需要百万量级次抽样 (N_s) 来从实验上测定交叉熵.

交叉熵的测定需要对由超导随机量子线路抽样产生的百万量级的比特串中的每一个给出理想分布下对应的概率幅, 这个概率幅通过模拟随机量子线路得到, 但当随机量子线路的规模过大、纠缠程度太高时, 模拟随机量子线路在事实上是不可行的, 此时达到量子优越性区域. 为了表征量子优越性区域的超导量子电路的保真度, Google 团队在电路设计中采用了 3 种、两类线路. 线路按照连接的完整度分为 3 种: 全量子线路、删减量子线路、分割量子线路. 其中全量子线路是 2.1 节中描述的完整线路; 分割量子线路中量子电路被切分为两块, 两块之间没有相互作用的量子比特; 类似分割量子线路, 删减量子线路也对全量子线路里的双比特门进行了一些删减, 使得线路成为相对独立的两块, 但是仅仅删减了分割处的部分两比特量子门, 所以两块量子线路并不是完全独立的. 3 种不同完整度的量子线路的示意图如图 6(a) 左下角插图所示. 按照两比特门的纠缠程度分为两类线路, 其中双比特门排列为 EFGHEFGH 的线路中双比特门之间纠缠程度较小, 更容易模拟, 称为简单量子线路; 而双比特门排列为 ABCDCDBA 的线路更难模拟, 称为复杂量子线路. 简单量子线路和复杂量子线路的示意图分别如图 6(a) 右上角和图 6(b) 左上角插图.

Google 团队在实验中对量子线路层数为 $m = 14$ 的简单全量子线路、简单删减量子线路、简单分割量子线路进行了采样和模拟, 如图 6(a) 所示. 在经典可验证区域内, 全量子线路保真度与相应的分割量子线路、删减量子线路、简单乘积预测的保真度符合得很好, 所以在达到量子优越性的大规模复杂线路区域内, 可以通过相应的分割量子线路、删减量子线路和简单乘积预测复杂大规模线路的保

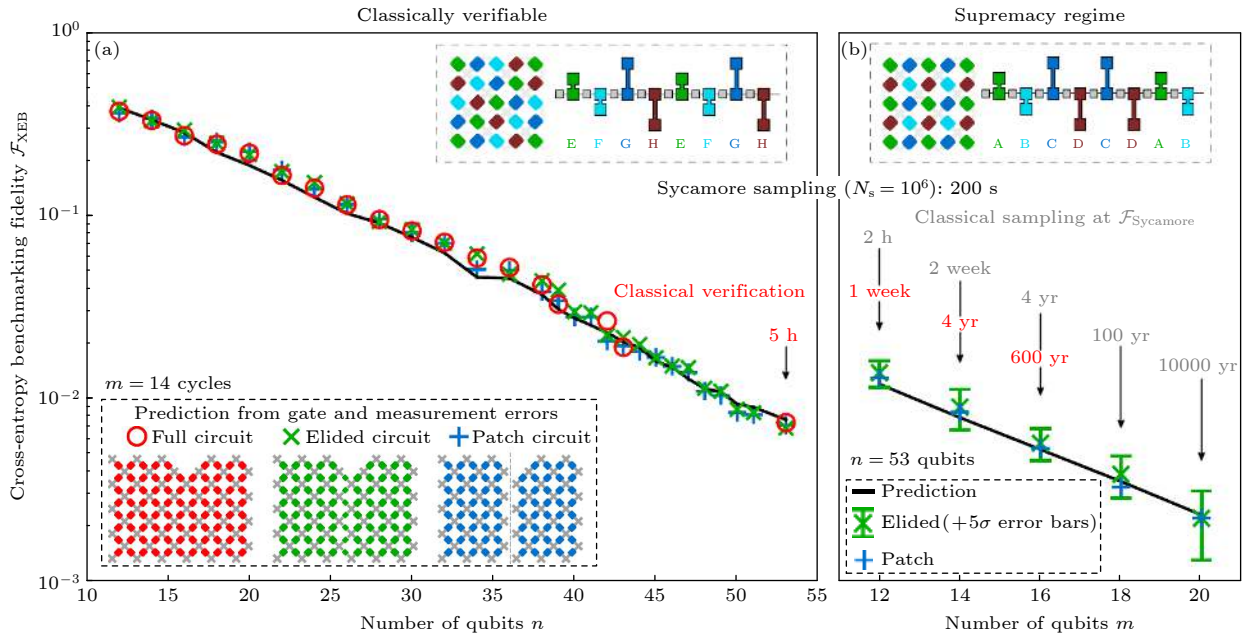


图 6 量子优越性证明的实验结果^[7] (a) 在经典可验证区, 简单全量子线路的保真度与简单删减量子线路、简单分割量子线路、简单乘积模型的保真度符合得很好, 每个数据点是多个随机量子线路采样的平均值; (b) 在量子优越区, 通过更简单的线路和简单乘积模型来估计复杂全量子线路的保真度. 红色时间标志表示经典模拟复杂全量子线路的验证任务需要的时间, 灰色时间标志表示经典模拟相应的采样任务需要的时间

Fig. 6. Experimental results of the proof of quantum advantage^[7]: (a) In the classical verifiable region, the fidelity of simple full quantum circuit accords well with that of simple truncated quantum circuit, simple split quantum circuit and simple product model. Each data point is the average of multiple random quantum circuit samples. (b) In the quantum advantage region, the fidelity of complex full quantum circuits is estimated by using simpler circuits and simple product models. The red time label represents the time required for the verification task of the classical simulation complex full quantum circuit, and the grey time label represents the time required for the corresponding sampling task of the classical simulation.

证度. 在量子优越性区域内, 53 量子比特的大规模 ABCDCDAB 复杂量子线路的保真度随着线路层数的加深而降低. 实验中最大的量子线路层数达到 20 层, 在 10 个相同规模的随机量子线路上进行了 30×10^6 次采样, 用删减量子线路估计的保真度达到 $F_{\text{XEB}} = (2.24 \pm 0.21) \times 10^{-3}$. 以 5 西格玛的置信度可以断言在 Sycamore 量子计算机上此类规模线路的平均置信度大于 0.1%. 实验结果如图 6(b) 所示.

估计经典计算机模拟需要消耗的计算资源时有两种估计, 一种是对验证任务的计算资源的估计, 一种是对采样任务的计算资源的估计. 如果实验中对超导随机量子线路进行了 10^6 次采样, 估计的保真度为 0.1%, 验证任务需要用经典计算机计算出全部的 10^6 次采样得到的比特串对应的概率幅, 而采样任务只需要计算 $10^6 \times 0.1\%$ 个比特串对应的概率幅, 因为对于采样任务而言, 大部分平庸的采样可以用均匀分布的背底表示. 对于 53 个量子比特的 20 层的复杂全量子线路, 在 Sycamore

上采样一百万次用了 200 s, 预计在 100 万核的经典计算机上通过 Schrödinger-Feynman 算法进行模拟以产生相同保真度的采样结果需要 10000 年, 而验证任务则需要几百万年^[7].

Sycamore 量子计算机对量子优越性的展示使得近期量子算法井喷式发展, 与此同时, 更高效的经典模拟算法也被提出来, 使得量子优越性显得不那么明显. 2021 年 6 月, 中国科学技术大学潘建伟团队延续 Google 团队的工作, 制造出了量子比特数更多、门控精确度更高的祖冲之量子计算机——祖冲之 2.0^[17]. 与 Sycamore 类似, 祖冲之量子计算机也是使用 transmon 作为量子比特; 与 Sycamore 相比, 祖冲之量子计算机的量子比特数提高到 66 个, 单比特门的精度提高到 99.86%, 两比特门的精度提高到 99.41%, 读出精度提高到 95.48%. 该团队^[17] 在祖冲之量子计算机上进行了最大规模为 56 量子比特、20 层量子线路的复杂全量子线路随机量子线路采样, 采样一百万个比特串耗时 230 s, 而实际实验中在 1.2 h 内进行了 1.9×10^7 次采样,

通过与 Sycamore 相同的估计方式估计出的祖冲之量子计算机在该规模下的保真度为 $(6.62 \pm 0.72) \times 10^{-4}$, 在 9 个西格玛的置信度下断言保真度不为 0. 用 Schrödinger-Feynman 算法模拟祖冲之量子计算机实现的最大规模采样任务需要 5.76×10^{17} 核时, 而用相同算法模拟在 Sycamore 上实现的最大规模采样任务只需要 8.90×10^{13} 核时; 用更高效的张量网络模拟方法, 模拟 Sycamore 最大任务需要 15.9 天, 而模拟祖冲之最大任务需要 8.2 年. 取决于使用的经典计算算法, 祖冲之量子计算机实现的最大规模采样任务对应的经典计算资源大概是 Sycamore 实现的最大规模采样任务对应的经典计算资源消耗 2—3 个数量级.

2021 年 9 月, 潘建伟团队又在祖冲之 2.0 的基础上升级到了祖冲之 2.1. 祖冲之 2.1 相对于祖冲之 2.0 的主要提升是将平均读出精度从 95.48% 提升到了 97.74%, 因此可以在祖冲之 2.1 上实现更大规模的、量子比特数为 60、线路深度为 24 层的随机量子线路. 这一采样任务在经典计算机上实现的复杂度比 Sycamore 实现的最难的采样任务高 6 个数量级, 比祖冲之 2.0 上实现的最难的采样任务高 3 个数量级^[18].

量子计算机和经典算法都在发展, 要从实验上验证量子优越性不是一个一蹴而就的事情, 需要不断地提高量子计算机的规模和精确度, 得益于量子计算机计算空间上随量子比特数的指数增长, 经典计算机很难模拟更大规模的量子线路.

3.2 玻色采样的实验进展

无论是理想玻色采样还是高斯玻色采样, 其装置都主要由 3 部分构成: 光子源、干涉仪以及最终的光子探测装置, 而不同的玻色采样在实验装置上的区别仅体现为光子源不同. 潘建伟团队^[53]在理想玻色采样、容许损耗的玻色采样、高斯玻色采样方面均完成了有代表性的实验工作, 下面以他们的方案为例进行介绍.

图 7 为理想玻色采样的实现方案, 其光子源使用了一个很高质量的 InAs/GaAs 量子点单光子源, 可以 76 MHz 的频率稳定产生单光子. 量子点可以看作是微纳加工制备的一个电子二能级体系, 利用其和谐振微腔的耦合, 光子的自发辐射得到增强, 最终可以实现由外加的脉冲激光光场将体系激发到高能级, 确定性地辐射出单光子, 故也称作

on-demand 单光子源.

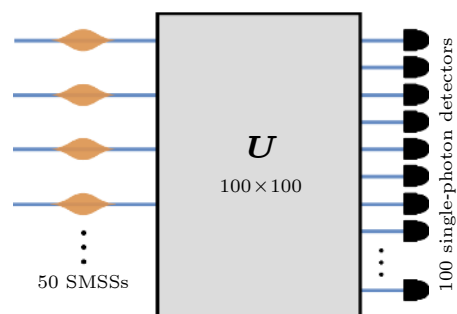


图 7 九章 GBS 实验示意图^[53]

Fig. 7. Illustration of the Jiuzhang GBS experiment^[53].

这些光子通过波导、反射镜与分束器构成的网络, 其中的 Pockels Cell 在外加电场的作用下可以受控地使光子偏振方向发生旋转, 而分束器将不同偏振的光子分离到不同的路径上, 如此实现了将单个光子源发出的全同光子分为 20 个一组, 每组同时输入一个 $m = 60$ 的干涉仪中, 干涉仪等价于一个非常紧凑的由反射镜和分束器组成的网络, 输出端接入 60 个独立的超导单光子探测器 (光子探测器为工作在超导态-正常态相变临界点的超导体, 利用相变点附近很小的电磁场变化可以带来很大电阻改变的这一特性, 实现对单光子事件的探测). 事实上, 该实验中在输出端探测到的最多光子数事件为 14 光子事件, 每小时能收集到约 6 次这样的采样. 于是, 该装置自然地能够完成对较少光子数的理想玻色采样与较多光子时的容许损耗采样.

大规模高斯玻色采样的实验实现, 即“九章”实验装置, 其干涉仪和探测器部分与前述理想玻色采样装置一致, 而光子源部分, “九章”采用泵浦激光作用于 25 块非线性晶体 PPKTP, 生成 25 个双模压缩态, 等效于 50 个单模压缩态, 输入进 $m = 100$ 的干涉仪中, 输出端可以测量到的事件平均包含 47 个光子, 至多记录到 76 个光子的符合计数.

4 经典模拟进展

尽管量子优越性问题是经典计算难的, 但由于目前量子设备的规模和误差等的约束, 经典模拟仍然是非常有必要的一个方向. 一方面, 经典计算机可以给出一个量子设备暂时不能达到的阈值, 另一方面, 经典计算机的模拟也可以用来验证量子设备的可靠性.

4.1 随机线路的经典模拟

Google 展示量子优越性的实验是在 53 可用量子比特的量子计算机上进行的最大规模为 53 量子比特、20 层深度的随机量子线路采样, 在 200 s 内可进行一百万次采样, 采样分布的保真度达到了 0.2%, 他们估计这一任务在目前最先进的超级计算机 Summit 上需要 10000 年才能完成^[7]. 但这一估算是基于 Google 团队提出的算法, 有没有更好的经典算法能够把模拟的时间减少到可实现的范围内, 对量子优越性成不成立提出了挑战. 同时, 高效的经典算法本身也可以用于量子模拟, 加速量子模拟器.

模拟量子电路主要有两种方法. 第一种方法存放整个量子态 $|\psi\rangle$ 并且进行演化, 这种方法被称为 Schrödinger 方法^[7], 这种方法的优点是计算复杂度和电路深度 d 是线性关系, 所以对比特数很少的电路非常有效, 但是它的空间复杂度随着量子比特数是呈指数增长的, 对量子比特数多的电路, 内存会成为一个瓶颈. 目前为止, 用这种方法在超算上实现的最大量子比特数电路的模拟是 49 个量子比特^[22]. Iboldsymbol 提出了一种利用硬盘来进行存储的基于张量网络方法的方案, 以模拟 49 量子比特 27 层深度电路的全振幅, 以及 56 量子比特深度为 22 层的电路的部分振幅^[19]. 为解决对内存需求过大的问题, Google 使用了 Schrödinger-Feynman 方法, 这个方法把电路切成两块, 用费曼路径积分把两块连起来, 每一块分别用 Schrödinger 方法进行计算, 但是这样势必会增加算法的时间复杂度, 正是基于这个方法才给出了在 Summit 上需要 10000 年时间的估计.

第二种方法基于张量网络, 只计算一个比特串或者一小部分比特串的振幅, 量子电路可以被表示为张量网络, 通过张量网络的缩并来计算一个特定比特串的振幅. 可以通过张量网络对应线图的最优树分解来找到张量网络的最佳缩并顺序, 一般而言, 找到图的最佳树分解是一个 NP 难的问题, 所以经常会用启发式算法来找. 虽然该方法得到的树分解不是最佳, 但也足够好的树分解. 张量网络方法的空间复杂度取决于缩并过程中出现的最大张量的阶数, 而最大张量的阶数与量子电路对应的线图的树宽呈指数关系^[66]. 当电路深度比较浅的时候, 树宽很小, 即使对量子比特数目很大的电路,

张量网络方法也是非常有效的算法. 但是张量网络的计算复杂度经常与电路深度成指数关系. 也可以通过图分解算法等进行针对特定电路的高度优化来寻找张量网络的好的缩并顺序^[67], 这样可以对 Sycamore 量子线路模拟在 Google 团队的估计上加速 10000 倍. 基于这项工作, 对缩并树的主干进行优化之后, 对于 20 层电路深度的 Sycamore 电路, 阿里巴巴在和 Summit 相当的超级计算机上实验, 可以在 20 天内完成 Google 团队估计需要 10000 年的算法^[27]. 最近的一篇基于张量网络的固定一部分比特串的工作, 针对 20 层深度的 Sycamore 量子电路, 5 天内在 60 个 GPU 的小集群上计算出两百万个比特串的振幅^[28].

Li 等^[22]在张量网络的基础上通过分析量子随机线路的结构, 开发 CZ 门的对角性质, 提出了一个新的技术——隐分解, 对于 7×7 量子比特的随机线路, 该方法可以多分解额外的 7 个 CZ 门且不需要额外的空间, 因此可以将 Iboldsymbol 提出的通过张量网络的 slicing 技术求解全振幅经典模拟方法^[19]中的被模拟电路的深度增加 8 层 (如图 1 中的 8 种排列模式).

4.2 玻色采样的经典模拟

由于玻色采样 (及其衍生问题) 求一个样本的概率的最大代价在于求解其中的积和式 (Hafnian 函数、Torontonin 函数), 因此对于玻色采样的经典模拟工作主要包括计算一个振幅和进行一次采样. 由于玻色采样的振幅可以显式地写出, 因此求一个振幅相对随机线路采样而言较为容易.

对于采用超级计算机进行单个矩阵积和式/Hafnian/Torontonin 的计算, Wu 等^[68]在天河二号上比较了两个目前最高效的积和式算法——Ryser 算法和 BB/FG 算法的运行效率, 两者计算单个积和式的复杂度均为 $O(n2^n)$. 得到单个 $n = 50$ 矩阵积和式计算需要天河二号约 100 min 的结论. 潘建伟团队^[69]通过在神威太湖之光超算上对矩阵的 Torontonin 函数进行求解对高斯玻色采样的经典计算耗时进行估算.

对于一个样本的采样问题, Clifford 和 Clifford 通过条件概率的思想大大降低了进行一次采样的时间 (和计算全振幅相比)^[55]. 具体来讲, 由于玻色采样其概率空间的特殊性, 可以将一个 n 维的概率分布每一维单独采样, 并计算下一维的条件概率,

即将 (7) 式的概率分布转化为“第 k 个光子在第 r_k 个出口被探测到”, 并将其概率分布表示为

$$p(r_1, r_2, \dots, r_n) \\ = p(r_1)p(r_2|r_1) \cdots p(r_n|r_1, r_2, \dots, r_{n-1}), \quad (17)$$

如此, 可以依次对 n 个光子出口位置进行采样, 通过化简该条件概率函数, 并对以上 n 个条件概率依次进行采样, 就可以实现经典计算机对玻色采样问题的一次采样的模拟. 注意到这里

$$p(r_k|r_1, \dots, r_{k-1}) = \frac{p(r_1, \dots, r_k)}{p(r_1, \dots, r_{k-1})}, \quad (18)$$

因此只要求得所有的边缘概率分布函数, 就可以依次采样得到 $r_1, r_2, \dots, r_n$.

对于玻色采样, 基于以上条件采样的方法及对边缘概率函数的优化方法, Clifford 和 Clifford^[55] 证明了进行一次采样的时间可以和计算常数个积和式的时间相等. 同时, Neville 等^[54] 通过 Metropolis 独立采样方法, 可以得到玻色采样的一次近似采样, 他们可以在普通笔记本上实现 30 个光子的采样, 在超算上实现 50 个光子的近似采样. 但对于高斯玻色采样和带阈值的高斯玻色采样, 目前还没有结论证明其采样复杂性可以降低到求解常数个 Hafnian 函数或是 Torontonian 函数. 但目前较好的后两者采样算法^[41,56,57,70] 都是利用了第二种方法中条件概率的思想去降低求解的代价.

5 总结和讨论

近几年来, 量子计算机的规模和精度都得到了极大的提升, 目前世界上最先进的量子计算机已经达到了 50—100 个量子比特^[17,18,53], 单个门的误差也降低到了 0.2% 左右^[7,49]. 无论是学术界还是工业界, 对量子计算的热情都急速增长. 未来量子计算的发展, 很大程度上依赖于量子计算机硬件性能的提升与量子算法在物理化学生物等领域的实际应用的探索. 本文所梳理的对采样问题的量子优越性的研究, 旨在找出一些量子计算机相较于经典计算机具有计算能力优势的问题. 尽管当前的采样实验在一定范围内可以被经典模拟, 但随着实验上规模的逐渐增大和设备精度的不断提升, 经典模拟将变得越来越困难. 采样问题的量子优越性研究一方面验证了可控量子系统相较于经典计算更强的操作能力, 另一方面也为下一步解决经典困难问题提

供了基础. 随着经典计算机的性能提升与算法的发展, 经典计算机的算力也在提升, 所以如果希望量子计算机能够永远战胜经典计算机, 就必须制备出大型稳定的通用量子计算机, 并且需要对错误具有一定的鲁棒性.

另一方面, 量子系统也在不断增大, 量子实验结果的正确性验证也越来越难. 潘建伟团队实现的基于带阈值的高斯玻色采样实验^[53] 和随机线路采样实验^[17] 在近期内仍未找到可以有效模拟和验证的经典模拟算法. 如何有效验证中等规模量子计算是目前的一个重要研究方向.

与此同时, 找到第一个有足够实际应用价值的超越经典计算机性能的问题, 是整个量子计算领域的重中之重. 由于量子计算机的性能随着规模的增大而指数增长, 以及量子计算机独特的叠加、纠缠等特性, 量子计算机和经典计算机的结合将成为早期应用中最早有可能出现的方案. QPU 与 CPU, GPU, TPU 等处理器的结合, 形成高效的异构体系, 并以云平台提供算力, 正在成为工业界积极探索的方向.

值得注意的是, 近期 Google 团队在 Sycamore 量子计算机上进行了一系列应用探索. 在优化问题中, 利用量子近似优化算法, 在 23 个物理量子比特上演示了 Sherrington-Kirkpatrick 模型和最大割问题的量子版本算法^[71]. 量子化学方面, 结合量子变分算法计算了氢链的结合能与二氮烯分子异构化反应的能量跃迁, 计算中最多用到了 12 个量子比特, 其中 6 个原子与 8 个原子的氢链的计算在引入错误抑制方案后, 达到了化学精度^[72]. 另外, 在量子模拟方面, 用 16 个量子比特模拟了一维 Fermi-Hubbard 模型的时间演化, 观察到了自旋-电荷分离现象^[73]. 然而遗憾的是, 量子计算机上演示的以上实际应用问题并未真正体现出量子计算机相较于经典计算机的优势.

在机器学习领域, 近期也有一些体现量子优越性的量子机器学习方案被提出, 比如 Liu 等^[74] 巧妙地设计了一个基于离散对数问题的学习问题, 并证明了其量子优越性. 具体来说, 该量子机器学习算法的量子分类器是一个传统的支持向量机, 通过使用容错量子计算机来估计核函数. 他们同时证明了在假设离散对数问题是经典困难的情况下, 没有经典的多项式时间的学习算法可以比随机选取更好. 但由于求解离散对数问题的量子算法需要大规模的通用量子计算机, 也许该优越性问题需要一定

时间才能真实体现其优势. 对于学习量子态的线性性质问题, Huang 等^[75]论述了可以通过量子计算机的纠缠能力, 将多个量子态的拷贝通过量子电路纠缠起来, 从而实现对直接通过经典测量的经典学习算法进行指数加速. 因为该实验需要的量子资源较少, 因此有望在不久的将来在中等规模带噪音等量子 (noisy intermediate-scale quantum, NISQ) 机器上进行展现.

本文对于量子优越性问题的回顾和探索在这里将告一段落, 但科学界对量子优越性的探索远不止以上这些问题. 随着工业界和高校在量子设备规模上的里程碑进展, 未来能够在量子设备上展现出优越性的问题将会越来越多.

参考文献

- [1] Shor P 1994 *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* Santa Fe, New Mexico, USA, November 20–22, 1994 p124
- [2] Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 150502
- [3] Nielsen M A, Chuang I 2002 *Quantum Computation and Quantum Information* (New York: Cambridge University Press) pp171–216
- [4] Babbush R, Gidney C, Berry D W, Wiebe N, McClean J, Paler A, Fowler A, Neven H 2018 *Phys. Rev. X* **8** 041015
- [5] Harrow A W, Montanaro A 2017 *Nature* **549** 203
- [6] Boixo S, Isakov S V, Smelyanskiy V N, Babbush R, Ding N, Jiang Z, Bremner M J, Martinis J M, Neven H 2018 *Nat. Phys.* **14** 595
- [7] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. 2019 *Nature* **574** 505
- [8] Shepherd D, Bremner M J 2009 *Proc. Math. Phys. Eng. Sci.* **465** 1413
- [9] Aaronson S, Arkhipov A 2011 *Proceedings of the Forty-third Annual ACM Symposium on Theory of Computing* San Jose, California, USA, June 6–8, 2011 p333
- [10] Lund A P, Laing A, Rahimi-Keshari S, Rudolph T, O'Brien J L, Ralph T C 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 100502
- [11] Hamilton C S, Kruse R, Sansoni L, Barkhofen S, Silberhorn C, Jex I 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 170501
- [12] Wang H, Li W, Jiang X, He Y M, Li Y H, Ding X, Chen M C, Qin J, Peng C Z, Schneider C, Kamp M, Zhang W J, Li H, You L X, Wang Z, Dowling J P, Höfling S, Lu C Y, Pan J W 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 230502
- [13] Zhou W H, Gao J, Jiao Z Q, Wang X W, Ren R J, Pang X L, Qiao L F, Zhang C N, Yang T H, Jin X M 2020 *arXiv: 2009.03327[quant-ph]*
- [14] Knill E, Laflamme R 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 5672
- [15] Morimae T, Fujii K, Fitzsimons J F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 130502
- [16] Fujii K, Kobayashi H, Morimae T, Nishimura H, Tamate S, Tani S 2016 *43rd International Colloquium on Automata, Languages, and Programming* Rome, Italy, July 11–15, 2016 p13
- [17] Wu Y L, Bao W S, Cao S R, et al. 2021 *arXiv: 2106.14734 [quant-ph]*
- [18] Zhu Q L, Cao S R, Chen F S, et al. 2021 *arXiv: 2109.03494v2 [quant-ph]*
- [19] Pednault E, Gunnels J A, Nannicini G, Horesh L, Magerlein T, Solomonik E, Wisnieff R 2017 *arXiv: 1710.05867[quant-ph]*
- [20] Boixo S, Isakov S V, Smelyanskiy V N, Neven H 2017 *arXiv: 1712.05384[quant-ph]*
- [21] Chen J X, Zhang F, Huang C, Newman M, Shi Y Y 2018 *arXiv: 1805.01450[quant-ph]*
- [22] Li R L, Wu B J, Ying M S, Sun X M, Yang G W 2019 *IEEE Trans. Parallel Distrib. Syst.* **31** 805
- [23] Chen Z Y, Zhou Q, Xue C, Yang X, Guo G C, Guo G P 2018 *Sci. Bull.* **63** 964
- [24] Chen M C, Li R L, Gan L, Zhu X B, Yang G W, Lu C Y, Pan J W 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 080502
- [25] Zhang F, Huang C, Newman M, Cai J J, Yu H J, Tian Z X, Yuan B, Xu H H, Wu J Y, Gao X, Chen J X, Szegedy M, Shi Y Y 2019 *arXiv: 1907.11217[quant-ph]*
- [26] Pednault E, Gunnels J A, Nannicini G, Horesh L, Wisnieff R 2019 *arXiv: 1910.09534[quant-ph]*
- [27] Huang C, Zhang F, Newman M, Cai J J, Gao X, Tian Z X, Wu J Y, Xu H H, Yu H J, Yuan B, Szegedy M, Shi Y Y, Chen J X 2020 *arXiv: 2005.06787[quant-ph]*
- [28] Pan F, Zhang P 2021 *arXiv: 2103.03074[quant-ph]*
- [29] Bremner M J, Jozsa R, Shepherd D J 2011 *Proc. Math. Phys. Eng. Sci.* **467** 459
- [30] Bremner M J, Montanaro A, Shepherd D J 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 080501
- [31] Douce T, Markham D, Kashefi E, Diamanti E, Coudreau T, Milman P, Loock P V, Ferrini G 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 070503
- [32] Arrazola J M, Rebertrost P, Weedbrook C 2017 *arXiv: 1712.07288[quant-ph]*
- [33] Huh J, Yung M H 2017 *Sci. Rep.* **7** 1
- [34] Arrazola J M, Bromley T R 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 030503
- [35] Schuld M, Brádler K, Israel R, Su D, Gupt B 2019 *Phys. Rev. A* **101** 032314
- [36] Brádler K, Friedland S, Izaac J, Killoran N, Su D Q 2021 *Spec. Matrices* **9** 166
- [37] Brádler K, Dallaire-Demers P L, Rebertrost P, Su D Q, Weedbrook C 2018 *Phys. Rev. A* **98** 032310
- [38] Arrazola J M, Bromley T R, Rebertrost P 2018 *Phys. Rev. A* **98** 012322
- [39] Banchi L, Fingerhuth M, Babej T, Ing C, Arrazola J M 2020 *Sci. Adv.* **6** eaax1950
- [40] Jahangiri S, Arrazola J M, Quesada N, Killoran N 2020 *Phys. Rev. E* **101** 022134
- [41] Quesada N, Arrazola J M, Killoran N 2018 *Phys. Rev. A* **98** 062322
- [42] Broome M A, Fedrizzi A, Rahimi-Keshari S, Dove J, Aaronson S, Ralph T C, White A G 2013 *Science* **339** 794
- [43] Carolan J, Meinecke J D A, Shadbolt P J, Russell N J, Ismail N, Wörhoff K, Rudolph T, Thompson M G, O'Brien J L, Matthews J C, Laing A 2014 *Nat. Photonics* **8** 621
- [44] Tillmann M, Dakić B, Heilmann R, Nolte S, Szameit A, Walther P 2013 *Nat. Photonics* **7** 540
- [45] Crespi A, Osellame R, Ramponi R, Brod D J, Galvao E F, Spagnolo N, Vitelli C, Maiorino E, Mataloni P, Sciarrino F 2013 *Nat. Photonics* **7** 545
- [46] Spagnolo N, Vitelli C, Bentivegna M, Brod D J, Crespi A, Flamini F, Giacomini S, Milani G, Ramponi R, Mataloni P, Osellame R, Galvao F E, Sciarrino F 2014 *Nat. Photonics* **8** 615
- [47] Spring J B, Metcalf B J, Humphreys P C, Kolthammer W S,

- Jin X M, Barbieri M, Datta A, Thomas-Peter N, Langford N K, Kundys D, Gates J C, Smith B J, Smith P G, Walmsley I A 2013 *Science* **339** 798
- [48] Su D Q, Myers C R, Sabapathy K K 2019 *Phys. Rev. A* **100** 052301
- [49] Zhong H S, Peng L C, Li Y, Hu Y, Li W, Qin J, Wu D, Zhang W J, Li H, Zhang L, Wang Z, You L X, Jiang X, Li L, Liu N L, Dowling J P, Lu C Y, Pan J W 2019 *Sci. Bull.* **64** 511
- [50] Barkhofen S, Bartley T J, Sansoni L, Kruse R, Hamilton C S, Jex I, Silberhorn C 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 020502
- [51] Wang H, Qin J, Ding X, Chen M C, Chen S, You X, He Y M, Jiang X, You L, Wang Z, Schneider C, Renema J J, Höfling S, Lu C Y, Pan J W 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 250503
- [52] Bentivegna M, Spagnolo N, Vitelli C, Flamini F, Viggianiello N, Latmiral L, Mataloni P, Brod D J, Galvão E F, Crespi A, Ramponi R, Osellame R, Sciarrino F 2015 *Sci. Adv.* **1** e1400255
- [53] Zhong H S, Wang H, Deng Y H, Chen M C, Peng L C, Luo Y H, Qin J, Wu D, Ding X, Hu Y, Hu P, Yang X Y, Zhang W J, Li H, Li Y X, Jiang X, Gan L, Yang G W, You L X, Wang Z, Li L, Liu N L, Lu C Y, Pan J W 2020 *Science* **370** 1460
- [54] Neville A, Sparrow C, Clifford R, Johnston E, Birchall P M, Montanaro A, Laing A 2017 *Nat. Phys.* **13** 1153
- [55] Clifford P, Clifford R 2018 *Proceedings of the Twenty-Ninth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms New Orleans, Louisiana, USA, January 7–10, 2018* p146
- [56] Wu B J, Cheng B, Zhang J L, Yung M H, Sun X M 2020 *Sci. Bull.* **65** 832
- [57] Quesada N, Chadwick R S, Bell B A, Arrazola J M, Vincent T, Qi H Y, García-Patrón R 2020 arXiv: 2010.15595[quant-ph]
- [58] Aaronson S, Chen L J 2016 arXiv: 1612.05903[quant-ph]
- [59] Aaronson S, Gunn S 2019 arXiv: 1910.12085[quant-ph]
- [60] Lund A P, Bremner M J, Ralph T C 2017 *NPJ Quantum Inf.* **3** 1
- [61] Fujii K, Tamate S 2016 *Sci. Rep.* **6** 1
- [62] Bremner M J, Montanaro A, Shepherd D J 2017 *Quantum* **1** 8
- [63] Kruse R, Hamilton C S, Sansoni L, Barkhofen S, Silberhorn C, Jex I 2018 *Phys. Rev. A* **100** 032326
- [64] Valiant L G 1979 *Theor. Comput. Sci.* **8** 189
- [65] Björklund A, Gupt B, Quesada N 2019 *J. Exp. Algorithmics* **24** 1
- [66] Markov I L, Shi Y Y 2008 *SIAM J. Sci. Comput.* **38** 963
- [67] Gray J, Kourtis S 2020 *Quantum* **5** 410
- [68] Wu J, Liu Y, Zhang B, Jin X, Wang Y, Wang H, Yang X 2018 *Nat. Sci. Rev.* **5** 715
- [69] Li Y X, Chen M C, Chen Y J, Lu H T, Gan L, Lu C Y, Pan J W, Fu H H, Yang G W 2020 arXiv: 2009.01177[quant-ph]
- [70] Quesada N, Arrazola J M 2019 *Phys. Rev. Res.* **2** 023005
- [71] Harrigan M P, Sung K J, Neeley M, et al. 2021 *Nat. Phys.* **17** 332
- [72] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. 2000 *Science* **369** 1084
- [73] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. 2010 arXiv: 2010.07965 [quant-ph]
- [74] Liu Y, Arunachalam S, Temme K 2021 *Nat. Phys.* **17** 1013
- [75] Huang H Y, Kueng R, Preskill J 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 190505

SPECIAL TOPIC—Quantum computation and quantum information

Review on quantum advantages of sampling problems*

Li Ying¹⁾²⁾ Han Ze-Yao¹⁾²⁾ Li Chao-Jian²⁾³⁾ Lü Jin¹⁾

Yuan Xiao²⁾ Wu Bu-Jiao^{2)†}

1) (*School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China*)

2) (*Center on Frontiers of Computing Studies, Peking University, Beijing 100871, China*)

3) (*School of Computer Science and Technology, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China*)

(Received 2 August 2021; revised manuscript received 4 October 2021)

Abstract

Exploiting the coherence and entanglement of quantum many-qubit states, quantum computing can significantly surpass classical algorithms, making it possible to factor large numbers, solve linear equations, simulate many-body quantum systems, etc., in a reasonable time. With the rapid development of quantum computing hardware, many attention has been drawn to explore how quantum computers could go beyond the limit of classical computation. Owing to the need of a universal fault-tolerant quantum computer for many existing quantum algorithms, such as Shor's factoring algorithm, and considering the limit of near-term quantum devices with small qubit numbers and short coherence times, many recent works focused on the exploration of demonstrating quantum advantages using noisy intermediate-scaled quantum devices and shallow circuits, and hence some sampling problems have been proposed as the candidates for quantum advantage demonstration. This review summarizes quantum advantage problems that are realizable on current quantum hardware. We focus on two notable problems—random circuit simulation and boson sampling—and consider recent theoretical and experimental progresses. After the respective demonstrations of these two types of quantum advantages on superconducting and optical quantum platforms, we expect current and near-term quantum devices could be employed for demonstrating quantum advantages in general problems.

Keywords: quantum advantages, random circuit sampling, Boson sampling, classical simulation

PACS: 02.70.-c, 03.65.-w, 03.67.Ac

DOI: 10.7498/aps.70.20211428

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 91964101).

† Corresponding author. E-mail: bujiaowu@gmail.com

基于测量的量子计算研究进展

张诗豪 张向东 李绿周

Research progress of measurement-based quantum computation

Zhang Shi-Hao Zhang Xiang-Dong Li Lü-Zhou

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 210301 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210923

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210923>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

中性原子量子计算研究进展

Experimental progress of quantum computation based on trapped single neutral atoms

物理学报. 2019, 68(3): 030305 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182133>

量子计算与量子模拟

Quantum computation and quantum simulation

物理学报. 2018, 67(12): 120301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180710>

马约拉纳零能模的非阿贝尔统计及其在拓扑量子计算的应用

Non-abelian statistics of Majorana modes and the applications to topological quantum computation

物理学报. 2020, 69(11): 110302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200812>

基于冗余图态的多人协作量子计算

Collaborative quantum computation with redundant graph state

物理学报. 2019, 68(11): 110302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190142>

含有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的自旋1键交替海森伯模型的量子相变和拓扑序标度

Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2020, 69(9): 090302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773>

基于量子Fisher信息的量子计量进展

Development on quantum metrology with quantum Fisher information

物理学报. 2019, 68(4): 040601 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181965>

专题: 量子计算与量子信息

基于测量的量子计算研究进展*

张诗豪¹⁾ 张向东²⁾ 李绿周^{1)†}¹⁾ (中山大学计算机学院, 量子计算与计算机理论研究所, 广州 510006)²⁾ (北京理工大学物理学院, 先进光电量子结构设计与测量教育部重点实验室, 北京 100081)

(2021 年 5 月 15 日收到; 2021 年 6 月 15 日收到修改稿)

相比于量子门电路模型, 基于测量的量子计算模型为实现普适量子计算提供了另一途径, 且经过近二十年的发展其内涵已得到了极大丰富. 本文对基于测量的量子计算模型的研究历史和现状进行综述. 首先简要介绍该模型的基本理论, 包括量子图态等资源态的概念和工作原理、模型的计算普适性和经典模拟方法、在相关量子信息处理领域的应用等. 接着从量子物理特性的角度概括基于测量的量子计算模型和量子多体系统之间的紧密联系, 包括量子纠缠、互文性、量子关联、对称保护拓扑序和量子物质相等作为计算资源所发挥的独特作用. 然后, 总结实现基于测量的量子计算模型的不同技术路线和实验成果. 这些理论和实验方面的进展是不断推动可扩展容错量子计算机研制的力量源泉. 最后, 对该领域未来的研究方向进行讨论和展望, 希望能启发读者进一步学习和探索相关课题.

关键词: 量子计算, 量子纠缠, 量子关联, 对称保护拓扑序**PACS:** 03.67.-a, 03.65.Ud, 03.67.Lx, 03.67.Ac**DOI:** 10.7498/aps.70.20210923

1 引言

量子计算与量子信息是当代科学的前沿, 具有广阔的发展前景^[1]. 在现代量子信息科学中, 有两类物理内涵丰富且实验可行的量子计算模型值得关注: 1) 基于幺正演化的量子门电路模型^[2]; 2) 基于测量的量子计算 (measurement-based quantum computation, MBQC) 模型^[3,4]. MBQC 模型在理论上和量子门电路模型等价, 都可以实现普适的量子计算. 就技术层面而言, MBQC 的实现仅取决于纠缠态的制备和对量子比特的测量操作, 方便在光学和离子阱等体系中进行实验演示^[5,6]. 随着量子技术的进步, MBQC 已用于构建量子 Toffoli 门^[7], 演示量子算法^[8-10], 展示量子纠错码^[11], 执行基于测量的量子网络编码^[12]等信息处理任务.

直观地看, 如果将量子门电路的构建比作逐块搭建积木至目标结构, 那么 MBQC 的执行更像从一整块木材中挖除多余部分以得到所要结果. 因此, 相比之下 MBQC 在实现量子计算时往往需要用到更多的量子比特 (quantum bit, qubit) 资源, 如执行 3-qubit 量子傅里叶变换 (quantum Fourier transform, QFT) 需制备 1 个 33-qubit 纠缠图态作为初始资源态^[13]. 此外, 量子电路的合成与优化有经典电路作为参照, 而 MBQC 没有直接的经典模型对应, 因而在量子算法的设计层面需要更多巧思. 尽管在实现量子计算上存在这些挑战, 但人们发现 MBQC 能与其他领域的研究相结合, 如将图论、量子纠缠理论、计算复杂性、物质拓扑相、统计物理等主题联系起来, 因而逐渐成为交叉领域的研究焦点^[14].

本文从量子物理学和计算机科学的角度概括

* 国家自然科学基金 (批准号: 61772565, 62102464)、广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2020B1515020050)、广东省重点研发项目 (批准号: 2018B030325001) 和中国博士后科学基金 (批准号: 2020M683049, 2021T140761) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lilvzh@mail.sysu.edu.cn

MBQC 模型的相关理论, 包括 MBQC 的基本原理、计算普适性及应用、相关衍生模型的计算特点及背后的物理属性, 并且梳理了不同技术路线下的实验进展, 探讨了未来的潜在研究方向. 希望能对当前带噪声中等规模量子 (noisy intermediate-scale quantum, NISQ) 时代^[15]下的研究有所启示.

2 MBQC 的基本原理

2.1 量子计算的基础概念

为了便于读者更好地领会本文主旨, 在正式介绍 MBQC 的理论模型之前, 这里先对量子计算中的一些关键概念进行说明.

量子信息处理的基本单元称为量子比特 (qubit), 它可以表示为两个状态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的叠加态:

$$|\psi_1\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle, \quad (1)$$

其中复数 c_0 和 c_1 称为振幅且满足归一化条件 $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$, 右矢 (ket) $|\cdot\rangle$ 是表示量子态的狄拉克符号. 1 个 qubit 态可视为 1 个二维复向量空间中的向量, 而 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 构成此向量空间的正交基, 称为计算基态 (computational basis state). 对于 n 个 qubit 构成的量子系统, 其计算基态 $|x_1 x_2 \cdots x_n\rangle$ 共有 2^n 个, 故此系统中的任意 1 个量子态都可以由 2^n 个振幅值确定. 因此, 用经典计算机存储 1 个 n -qubit 量子态的所有振幅信息需要指数级增长的空间. 实际上, 量子态中往往蕴含着丰富的关联和纠缠信息^[16], 其中 2-qubit 纠缠态的典型例子为 4 个正交 Bell 态:

$$|\beta_{00}\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}, \quad |\beta_{01}\rangle = (|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}, \quad (2)$$

$$|\beta_{10}\rangle = (|00\rangle - |11\rangle)/\sqrt{2}, \quad |\beta_{11}\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}. \quad (3)$$

量子计算即为对多量子比特所构成的量子态进行一系列特定操作以达成目标结果的新型计算模式, 其过程遵循量子力学规律. 主要有两类量子操作: 量子门变换操作和测量操作. 量子门可以表示为作用到量子态上的幺正矩阵, 常用的单量子比特门如泡利算符 (X, Y, Z) 和 Hadamard 门 (H) 为

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = X^\dagger, \quad Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = Y^\dagger, \quad (4)$$

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = Z^\dagger, \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

单量子比特旋转门操作为

$$R_x(-\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} & i \sin \frac{\alpha}{2} \\ i \sin \frac{\alpha}{2} & \cos \frac{\alpha}{2} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$R_y(-\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} & \sin \frac{\alpha}{2} \\ -\sin \frac{\alpha}{2} & \cos \frac{\alpha}{2} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$R_z(-\alpha) = \begin{bmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{bmatrix}. \quad (8)$$

常用的两量子比特门有受控非 (controlled-NOT, CNOT) 门和受控 Z (controlled- Z , CZ) 门:

$$\text{CNOT}^{(a,b)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\text{CZ}^{(a,b)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (9)$$

其上标 (a, b) 表示 2-qubit 门的受控位和靶位分别为 a 和 b . 理论上^[2] (6)–(8) 式中的单比特旋转门和 (9) 式的两比特门可以合成任意的幺正变换矩阵.

量子测量由一组作用到量子态空间的测量算符 $\{M_m\}$ 描述, 其中下标 m 表示测量 1 个量子态 $|\psi\rangle$ 后可能得到的结果, 其发生概率为

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle, \quad (10)$$

相应地系统状态在测量后变化为

$$|\psi\rangle \rightarrow M_m |\psi\rangle / \sqrt{p(m)}. \quad (11)$$

注意测量算符 $\{M_m\}$ 需满足完备性关系:

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I, \quad (12)$$

以确保对于任意量子态 $|\psi\rangle$, (10) 式所示测量态 $|\psi\rangle$ 后得到所有可能结果的概率之和为 1.

最常见的量子测量是投影测量 (projective measurement) 操作, 由 1 个可观测量 O 描述. O 是作用到量子态空间上的厄米算符, 具有谱分解:

$$O = \sum_m m P_m, \quad (13)$$

其中 P_m 为 O 本征空间的投影算符, m 为相应本征值. 测量量子态 $|\psi\rangle$ 得到结果 m 的概率为

$$p(m) = \langle \psi | P_m | \psi \rangle, \quad (14)$$

且测量后量子系统的态变化为

$$|\psi\rangle \rightarrow P_m |\psi\rangle / \sqrt{p(m)}. \quad (15)$$

可以看出, 当一般量子测量中符合 (12) 式的算符 $\{M_m\}$ 为厄米算符, 且满足 $M_m M_{m'} = \delta_{m,m'} M_m$ 时, (10) 式和 (11) 式可分别约化到 (14) 式和 (15) 式, 即为执行投影测量操作. 通常 (13) 式中的投影算符 P_m 可以写为 $|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|$ 的形式, $|\varphi_m\rangle$ 称为投影测量基. 例如, 以 (1) 式为测量基可对量子态做单比特局域测量, 以 (2) 式和 (3) 式为测量基可执行量子态态中所用 Bell 测量 [17,18].

在量子门电路模型中, 通过排布好的量子门对输入态执行特定么正变换以得到目标输出态, 并可由测量操作读取结果. 下面着重介绍本文关注的对象: 基于测量的量子计算模型 (MBQC).

2.2 MBQC 理论模型

首先需要指出的是, 所谓基于测量的量子计算并非只能执行测量操作, 而是指计算的过程主要由测量操作序列来确定. 大部分情况下, 人们提到 MBQC 默认指的就是自 2001 年 Raussendorf 和 Briegel [3,4] 提出的单向量子计算 (one-way quantum computation, 1WQC) 模型. 但是严格来讲, MBQC 也包含其他一些理论模型, 如基于隐形传态的量子计算 (teleportation-based model of quantum computation, TQC) 模型 [19], 基于量子态转移的方法 [20,21], 关联空间中的 MBQC 模型 [22,23] 等. 下面主要对 1WQC 进行解释, 并简要介绍 TQC.

与量子电路模型通过门变换得到目标态不同, 1WQC 模型的执行过程分为 3 步: 1) 制备“普适资源态”, 即系统初始制备 1 个可用于普适量子计算的特定纠缠态, 并划分为 S_1 和 S_2 两部分; 2) 依次对 S_1 部分执行适应性单 qubit 测量, 即该过程中的测量操作都是作用在单 qubit 上的, 且后一步测量操作的设置依赖于前一步的测量结果; 3) 对 S_2 中 qubit 进行泡利修正, 根据第 2) 步中测量 S_1 的结果, 对作为输出态的 S_2 部分执行 (4) 式和 (5) 式中的局域泡利操作 X 和 Z , 从而确定性地得到目标态 [24–26]. 如果还需进一步读取该输出态的测量结果, 那么泡利修正可直接吸收到对输出态的测量操作中 [3,4], 此时整个计算过程就只包含对资源态的适应性测量. 1WQC 最常用的普适资源态为量子簇态 (cluster states) 和图态 (graph states) [13,27,28], 这里对二者进行简要介绍. 2001 年 Briegel 和 Raus-

sendorf [27] 考虑在具有伊辛类型相互作用的自旋链或自旋晶格中的量子比特, 按特定哈密顿量进行演化得到态为

$$|\varphi\rangle_C = \bigotimes_{c \in C} \left(|0\rangle_c \bigotimes_{t \in T} \sigma_z^{(c+t)} + |1\rangle_c \right). \quad (16)$$

其中 C 为一部分量子比特形成的“簇 (cluster)”, 对于一维链、二维晶格和三维晶格分别有 $T = \{1\}$, $T = \{(1, 0), \{0, 1\}\}$ 和 $T = \{(1, 0, 0), \{0, 1, 0\}, \{0, 0, 1\}\}$, 当 $c + t \notin C$ 时 $\sigma_z^{(c+t)} = 1$, 这样的 (16) 式称为簇态. 簇态同时具有所谓的最大连通性 (maximum connectedness) 和纠缠持久性 (persistency of entanglement), 并经论证可用作 1WQC 模型的资源态 [3]. 类似地, 量子簇态的定义被进一步推广到与图相联系的量子图态 [4]. 首先考虑 1 个由 N 个顶点的集合 $V = \{a_1, a_2, \dots, a_N\}$ 和连接它们的边的集合 E 构成的图 $G = (V, E)$. 图 G 的邻接矩阵 A_G 为 1 个 $N \times N$ 矩阵, 其元素为

$$(A_G)_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } \{a_i, a_j\} \in E, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (17)$$

并且对于 1 个给定的顶点 $a \in V$, 其近邻顶点的集合 $N_a \subset V$ 中的元素 b 满足 $\{a, b\} \in E$.

对于任意 1 个图 $G = (V, E)$, 都可以定义 1 个对应图态. 令每 1 个顶点 $a \in V$ 对应一个 qubit, 考虑与之相关的 1 个厄米算符:

$$K_G^{(a)} = X^{(a)} \bigotimes_{b \in N_a} Z^{(b)}, \quad (18)$$

其中上标表示顶点, X 和 Z 为 (4) 式和 (5) 式中的泡利算符. 则对于所有 $a \in V$, (18) 式可表示的 N 个不同算符 $\{K_G^{(a)}\}_{a \in V}$ 构成了 N -qubit 系统的一组对易力学量完全集, 因此它们具有一组共同本征态. 将 $K_G^{(a)}$ 的本征值为 1 的共同本征态称为与图 G 对应的图态 $|G\rangle$, 即有

$$K_G^{(a)} |G\rangle = |G\rangle, \quad a = 1, 2, \dots, N. \quad (19)$$

在量子信息理论中, 由集合 $\{K_G^{(a)}\}_{a \in V}$ 生成的有限阿贝尔群 $S_G = \langle \{K_G^{(a)}\}_{a \in V} \rangle$ 也被称为图态 $|G\rangle$ 的稳定子群 (stabilizer group).

图态 $|G\rangle$ 也可以根据图的结构直接制备. 首先将所有顶点处的 qubit 制备为叠加态 $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, 然后对所有邻接顶点 $\{a, b\} \in E$ 上的一对 qubit 执行 (9) 式中的么正操作 $CZ^{(a,b)}$, 就可得到

图态 $|G\rangle$:

$$|G\rangle = \left(\prod_{\{a,b\} \in E} CZ^{(a,b)} \right) |+\rangle^V, \quad (20)$$

其中 $|+\rangle^V = \bigotimes_{a \in V} |+\rangle_a$.

不同结构的图会导致具有不同性质的图态, 见图 1, 其中线性簇态和马蹄形簇态均为图态特例^[29], 星形图态在局域幺正变换下等价于 GHZ 态^[30], 可扩展的 2D 方格图态用于执行普适 MBQC^[3,28]. 在大多数 MBQC 的相关研究中, 都将簇态视为定义在特定晶格结构上的图态例子^[4,13,28,31], 可按 (20) 式直接制备. 下面介绍如何基于簇态确定性地执行任意单 qubit 旋转操作和 2-qubit CNOT 门.

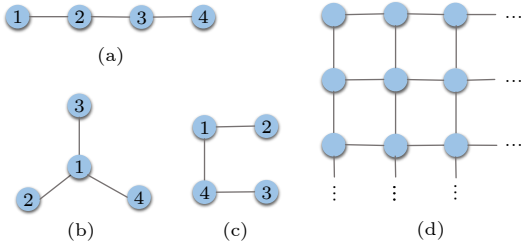


图 1 不同类型的图态 (a) 线性簇态; (b) 星形图态; (c) 马蹄形簇态; (d) 可扩展的二维方格图态

Fig. 1. Different types of graph states: (a) A linear cluster state; (b) a star-graph state; (c) a horseshoe cluster state; (d) the scalable 2D square graph state.

目标量子电路 $|\psi_{\text{out}1}\rangle = HR_z(-\alpha)|+\rangle$ 如图 2(a), 其中 H 和 $R_z(-\alpha)$ 表达式见 (5) 式和 (8) 式. 图 2(b) 为相应基于测量的实现方案: 输入态 $|+\rangle|+\rangle$ 经过 CZ 门后, 对第 1 个 qubit 执行基 $|\pm_\alpha\rangle = (|0\rangle \pm e^{i\alpha}|1\rangle)/\sqrt{2}$ 中的测量, 所得结果 $m \in \{0, 1\}$, 相应第 2 个 qubit 所处态为 $(|+\rangle + (-1)^m e^{-i\alpha} |-\rangle)/\sqrt{2}$. 因此为了确定性得到 $|\psi_{\text{out}1}\rangle$, 图 2(b) 中以 m 作为控制位对第 2 个 qubit 做泡利 X 修正, 所得输出态为

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{out}2}\rangle &= X^m(|+\rangle + (-1)^m e^{-i\alpha} |-\rangle)/\sqrt{2} \\ &= (|+\rangle + e^{-i\alpha} |-\rangle)/\sqrt{2} \\ &= e^{-i\alpha/2} |\psi_{\text{out}1}\rangle. \end{aligned} \quad (21)$$

$|\psi_{\text{out}2}\rangle$ 与 $|\psi_{\text{out}1}\rangle$ 仅相差一个整体相位因子, 即图 2(b) 等价实现了图 2(a).

进一步地, 以上构造方法可推广到实现任意单 qubit 旋转 $U = HR_z(-\gamma)R_x(-\beta)R_z(-\alpha)$. 将未经泡利 X 修正的图 2(b) 中线路作为基本单元串联 3 次, 其中各 qubit 的测量基分别为 $|\pm_\alpha\rangle$, $|\pm_\beta\rangle$, $|\pm_\gamma\rangle$ 并得到结果 $k, l, m \in \{0, 1\}$, 则 qubit 4 上的态为

$$\begin{aligned} &X^m[HR_z(-\gamma)]X^l[HR_z(-\beta)]X^k[HR_z(-\alpha)]|+\rangle \\ &= X^m Z^l X^k HR_z((-1)^{l+1}\gamma) \\ &\quad \times R_x((-1)^{k+1}\beta)R_z(-\alpha)|+\rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

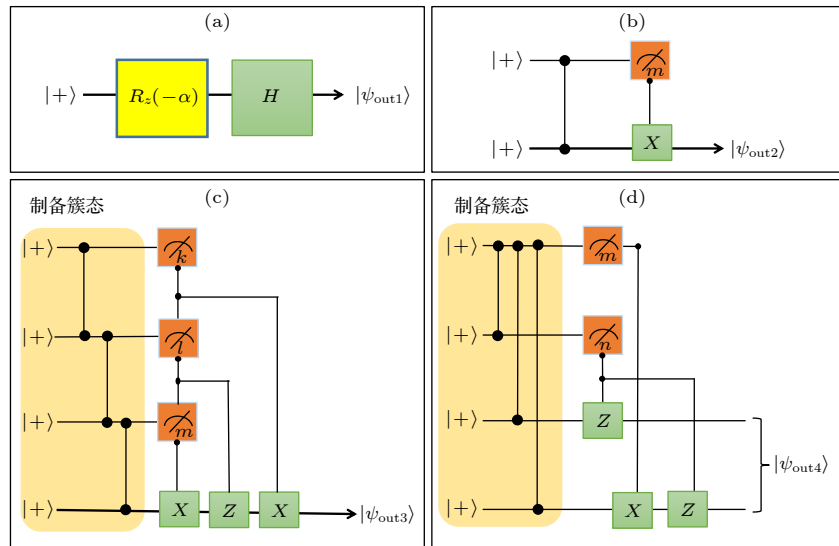


图 2 单向量量子计算执行量子门操作 (a) 输入态 $|+\rangle$ 经过 $R_z(-\alpha)$ 旋转和 Hadamard 门作用; (b) 以测量纠缠态的方式等价地实现 (a); (c) 为 (b) 的扩展, 制备并测量 4-qubit 线性簇态以实现任意的单量子比特旋转门; (d) 以 4-qubit 星形簇态执行 CNOT 门

Fig. 2. Realization of quantum gates in the 1 WQC model: (a) Input state $|+\rangle$ undergoes a $R_z(-\alpha)$ rotation and a Hadamard gate; (b) a circuit equivalent to (a) by measuring an entangled state; (c) a generalization of (b) to prepare and measure a 4-qubit linear cluster state for implementing arbitrary single-qubit rotation gates; (d) a circuit performing the CNOT gate via a star cluster state.

由 CZ 门与测量操作之间的对易关系^[4,32]可知, 以上线路等价于先用 3 个 CZ 门作用到输入态 $|+\rangle_1|+\rangle_2|+\rangle_3|+\rangle_4$, 再分别在基 $|\pm_\alpha\rangle, |\pm_\beta\rangle, |\pm_\gamma\rangle$ 中测量 qubit 1, 2 和 3 并得到 qubit 4 的态为 (22) 式. 因此, 为了实现任意旋转门的效果 $U|+\rangle$, 如图 2(c) 所示用 CZ 门制备 1 个如图 1(a) 所示的 4-qubit 线性簇态, 且测量结果 k, l, m 依次决定后续测量基的设置以及对输出态 qubit 4 的泡利修正操作, 即可确定性地得到 $|\psi_{\text{out}3}\rangle = e^{-i(\alpha+\beta+\gamma)/2}U|+\rangle$. 实际上制备所用资源簇态的方式并不唯一, 如光量子体系常用的“融合操作 (fusion operation)”^[30,33,34]. 此外, 容易验证当图 2(c) 中 qubit 1 的输入态为任意单量子比特态 $|\psi_{\text{in}}\rangle$ 时, 运行此线路得到 qubit 4 上的输出态与 $U|\psi_{\text{in}}\rangle$ 等价.

接下来, 介绍如何实现普适量子计算所需的 2-qubit CNOT 门. 注意图 1(b) 所示图态可视为六角晶格结构上的星形簇态^[34], 当在泡利 X 基中测量其 qubit 1 和 2 并分别得到结果 $m, n \in \{0, 1\}$, 则剩余两个 qubit 3 和 4 所处的输出态为

$$(Z_3^n \otimes X_4^m Z_4^n) \text{CNOT} |+\rangle_3 |+\rangle_4. \quad (23)$$

因此, 如图 2(d) 所示先制备这样的星形簇态, 再对 qubit 1 和 2 做泡利 X 测量并对作为输出态的 qubit 3 和 4 做相应泡利修正 ($Z_3^n \otimes Z_4^n X_4^m$), 可确定性实现 $|\psi_{\text{out}4}\rangle = \text{CNOT} |+\rangle_3 |+\rangle_4$. 更一般地, 可验证当图 2(d) 中的输入 qubit 3 和 2 换成任意 2-qubit 态 $|\psi_{\text{in}}\rangle$ 时, 则经过后续操作最终 qubit 3 和 4 所处输出态为 $|\psi_{\text{out}4}\rangle = \text{CNOT} |\psi_{\text{in}}\rangle$. 类似地, 测量图 1(c) 中马蹄形簇态的 qubit 1 和 4 并对 qubit 2 和 3 做泡利修正, 可以实现 2-qubit CZ 门^[29]. 以上理论显示一般的输入态本身也可以由测量簇态来得到, 因此当如图 1(d) 所示 2D 方格图态足够大时, 通过精心设计测量模式并辅以适当的泡利修正就能够确定性地实现普适量子计算^[3]. 若量子方案需要对输出态做读取测量, 那么泡利修正操作也可以合并到测量操作中^[4]. 相比于 1WQC 使用单比特测量来完成计算, 下面简要介绍另一种使用两比特测量的 MBQC 模型——基于传态的量子计算 (TQC).

1999 年 Gottesman 和 Chuang^[19] 提出使用量子传态技巧^[17,18] 和单 qubit 操作来实现普适量子计算. 图 3(a) 为量子传态的 1 个例子: Alice 对制备好的单 qubit 态 $U|\alpha\rangle$ 和 (2) 式中 Bell 态 $|\beta_{00}\rangle$ 的 1 个 qubit 执行联合 Bell 测量, 并将测量结果 a 和

b 发送给 Bob. 后者对 $|\beta_{00}\rangle$ 态的另 1 个 qubit 执行 $Z^b X^a$, 即可得到态 $U|\alpha\rangle$. 实际上 Alice 的操作等价于在一组新基 $\{(U^\dagger \otimes I)|\beta_{ij}\}\{|\beta_{ij}\rangle$ 为 (2) 式和 (3) 式中的 Bell 态) 中对态 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta_{00}\rangle$ 的 1 个 qubit 做 2-qubit 测量^[35], 则此时对 U 的实现只用到联合测量操作和泡利修正.

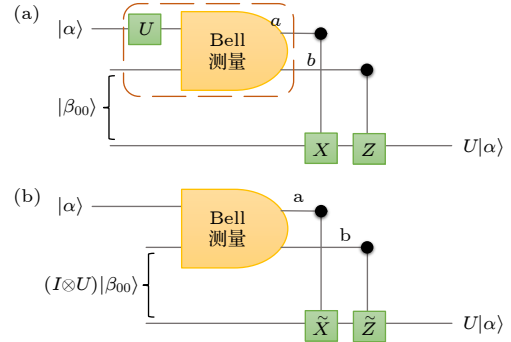


图 3 基于传态的方案实现单量子比特门 (a) 一方远程制备态 $U|\alpha\rangle$ 并通过 Bell 测量和泡利修正传给另一方, 注意 U 和 Bell 测量可以直接合并成新的联合测量; (b) 利用制备好的资源态 $(I \otimes U)|\beta_{00}\rangle$ 来间接执行 $U|\alpha\rangle$

Fig. 3. Teleportation-based scheme for implementing any sing-qubit gate: (a) State $U|\alpha\rangle$ is remotely prepared at one site and teleported to another site via Bell measurement and Pauli corrections, note here U and Bell measurement can be directly combined into a new joint measurement; (b) the scheme to indirectly implement $U|\alpha\rangle$ via a prepared resource state $(I \otimes U)|\beta_{00}\rangle$.

另一种间接执行 U 的方式如图 3(b) 所示, 将态 $|\alpha\rangle$ 和资源态 $(I \otimes U)|\beta_{00}\rangle$ 中的 1 个 qubit 做 Bell 测量, 并根据测量结果对另 1 个 qubit 做修正操作 $\tilde{X} = UXU^\dagger$ 和 $\tilde{Z} = UZU^\dagger$, 即可确定性地得到目标输出态 $U|\alpha\rangle$. 这样的传态技巧可以从单量子比特门 U 推广到多量子比特门的作用, 如用 CNOT 门作用 2-qubit 态等价于制备资源态 $(I^{(1)} \otimes \text{CNOT}^{(3,2)} \otimes I^{(4)})|\beta_{00}\rangle|\beta_{00}\rangle$ 并执行两组 Bell 测量和相应泡利修正^[19]. 因此, 这种利用传态思想的计算方法的好处在于: 即便目标操作 U 难以直接实现, 也可以通过制备已知的初始资源态来间接地执行 U . 在 Gottesman-Chuang 方案的启发下, 后又发展出各种不同的 TQC 模型, 如 Leung^[35] 提出对任意双量子比特执行适应性 2-qubit 测量来完成计算.

研究者们已揭示出 one-way 模型和 TQC 模型之间的紧密联系^[21,36,37]: 二者的执行依赖于相近的基本要素和底层原理, 因此在一些具体案例中

(如价键态计算模型^[38])具有等价性,并能启发一些兼顾两者长处的混合计算模型^[39,40].不同 MBQC 模型的计算效果与所依赖多体量子系统的物理特性有关,将在后文第 3 部分详述.

2.3 MBQC 的计算普适性及其经典模拟

在 1WQC 模型中,对 2D 方格簇态执行特定模式的单 qubit 测量就可以实现普适量子计算.反过来 1 个自然的问题是:用于 MBQC 的普适资源态具有何种必要属性?更确切地,既然涉及有限纠缠的系统可以被经典计算机有效模拟^[41],那么执行普适 MBQC 的资源态中需要多少纠缠?最强的“普适性”可以自然地定义为对资源态执行单 qubit 操作来产生任意量子态的能力,则此意义下的普适资源态(如 2D 簇态)的多种纠缠度量必然随系统尺寸呈现无界增长.例如,2006 年 Nest 等^[32]引入熵纠缠宽度(entropic entanglement width)作为评判图态普适性的标准,并举出对应六角晶格、三角晶格、Kagome 晶格的普适资源图态例子.相对地,他们也揭示出 n 粒子 1D 簇态, GHZ 态, W 态以及某些 1D 自旋系统的基态至少不满足一种纠缠度量下的最大纠缠性,因此非普适资源^[25].当普适性的概念为只要求 MBQC 能够有效再现量子门电路的经典输出结果时,矩阵乘积态(matrix-product state, MPS)和投影纠缠对态(projected entangled pair state, PEPS)可以作为相应关联空间量子计算的普适资源^[22,23],而无需具备 2D 簇态呈现的一些纠缠特征(如最大局域纠缠).

检验一种特定 MBQC 模型计算能力的常用手段是考察其经典模拟方法:若目标 MBQC 模型存在以多项式时间实现的有效经典模拟,则意味着该模型不具备加速计算的能力.在某些图态(如 1D 簇态和 GHZ 态)上执行的 1WQC 可以用经典计算机有效模拟^[32,42,43].细致考虑图的拓扑结构和纠缠性质,研究者揭示出一系列特定资源态参与的 MBQC 可以用张量网络方法有效模拟,如任意两体划分的纠缠(Schmidt 数)较小^[44]或具有对数有界的 Schmidt-rank 宽度情形^[45],有限宽度的簇态计算^[46],以及图的树宽度较小且最大度(degree)为常数的图态计算^[42]等.除了图态外,参考平面图 Ising 模型的严格可解性,基于环面码(toric code)态这种量子资源的 MBQC 也可以有效经典模拟^[47].这些围绕经典模拟的研究不仅有助于深入理解

MBQC 计算能力的普适性,还能启发新的经典算法^[48,49].

2.4 MBQC 在量子信息领域的应用

MBQC 在量子信息处理领域具有多方面应用.首先,作为一种普适量子计算模型,MBQC 模型已用于构建量子 Toffoli 门^[7],演示 Deutsch-Jozsa, Bernstein-Vazirani 算法^[8,9]以及 Grover 量子搜索算法^[5,29,50],执行 QFT^[13,28]和量子加法器^[4],求解 Simon 问题^[10],计算非线性布尔函数^[51,52]等量子算法相关场景.值得一提的是,1WQC 和量子电路模型在执行这些算法上是多项式时间等价的,但前者可能在并行化方面优于后者^[53,54].例如,2010 年 Browne 等^[55]提出 QFT 在 1WQC 模型中能以常数深度近似执行,从而更有利于实验演示.因此,利用量子电路模型与 MBQC 模型之间的转换关系来研究电路的深度复杂性具有理论和实用意义.

其次,相比于使用量子纠错码的量子电路模型,MBQC 也为实现容错通用量子计算提供了新的途径.早在 2003 年, Raussendorf^[56]就讨论了容错 1WQC 方案:可使用 2D 簇态模拟 1D 容错量子电路.随后, Nielsen 和 Dawson^[57]也证明了当错误率低于某个阈值时,能够实现基于簇态的可扩展容错 1WQC,并以光学量子计算中的光子损失噪声和去极化噪声为例数值研究了容错阈值^[58]. Raussendorf 等^[59,60]还进一步利用 3D 簇态中的 2D 切片来模拟一种常用的纠错码——表面码(surface code),其中特定的测量模式可模仿拓扑量子计算中的任意子编织操作.这样以拓扑保护的量子门实现的容错 MBQC 具有较高的容错阈值^[61,62],且适合 qubit 和连续变量系统的实验演示^[63–65].

最后, MBQC 的理念还能运用到网络编码^[12]、盲量子计算^[66,67]、多人协作量子计算^[68]、量子博弈^[69]、量子通信^[70]等量子信息处理场景中.例如,量子网络编码技术有望提升分布式量子计算中的资源利用率,而使用量子簇态实施纠缠交换(entanglement swapping)或基于测量的纠缠分布(entanglement distribution)时可以给电路深度^[71]、最终的 Bell 态保真度^[12]等方面带来改善.又如盲量子计算是一种与 MBQC 模型有紧密联系的安全计算协议.未来量子计算机可能趋向于以云计算形式提供给客户使用,因此如何保证客户的数据和计算过程的私密性显得尤为重要.2009 年 Broadbent

等^[66]首次提出的通用盲量子计算协议中, 客户端将制备好的随机量子比特发送给服务器, 服务器将这些 qubit 制备为 brickwork 纠缠态并按客户的要求进行测量, 再将测量结果返回给客户端, 后者又根据这些测量结果确定后面量子比特的测量参数并发送给服务器. 这样双方不断交互进行直至所有量子比特都被测量, 协议完成. 此协议秉承 MBQC 的基本思想, 能够保证客户端的信息安全. 在物理学领域, MBQC 模型可以用作研究经典自旋模型^[72,73]、量子模拟架构^[74]及对称保护的拓扑相^[75]等物理理论的工具.

3 MBQC 的物理内涵

特定 MBQC 模型的计算能力与其内在的物理属性有紧密联系, 如一类利用量子关联及非适应性测量的计算模型可展现出相对经典局域隐变量模型的量子优势^[76]. 下面从量子纠缠、量子关联、对称保护的拓扑相等角度概述相关物理内涵.

3.1 MBQC 中的量子纠缠

MBQC 模型的计算能力可以追溯到其所用纠缠资源态的性质. 在 2.3 节中, 已概述了纠缠和 MBQC 的普适资源态及经典可模拟性之间的关系. 后续围绕量子纠缠在 MBQC 中作用的研究包括: 一些多体纠缠量子系统的基态 (如自旋 5/2 系统^[77]和自旋 3/2 系统^[78]) 可用作普适 MBQC 的资源态, 而某些具有两体相互作用的自旋 1/2 无阻挫哈密顿 (frustration-free Hamiltonian) 系统则无此能力^[79]; 关联空间中执行“普适态制备”意义下的 MBQC 时, 所用资源必然会展现类似簇态的极值纠缠特征^[80]; 近年类比量子图态提出的超图态^[81,82], 其独特的纠缠和非局域性质导致相应 MBQC 在一些方面优于图态方案, 例如 2016 年 Gachechiladze 等^[83]揭示出超图态相比于 GHZ 态对于粒子损失噪声具有更强的鲁棒性.

有趣的是, 2009 年 Gross 等^[84]发现随机态等具有过多纠缠的量子态反而无益于 MBQC 展现量子计算加速. 同年, Bremner 等^[85]也在抽象 MBQC 框架下得到了类似的结果. 实际上, 2017 年 Morimae^[86]论证了寻找适用于 MBQC 的资源态通常是 1 个困难任务.

3.2 MBQC 模型与量子关联

量子关联是量子计算、量子通信等领域的重要资源, 其具体表现如量子非局域性 (quantum nonlocality)^[87]和量子互文性 (quantum contextuality)^[88]可用于分析和诠释 MBQC 中通过测量纠缠资源态展现的计算能力.

2009 年, Anders 和 Browne 通过定义 1 个一般性的框架分析“关联的计算能力”^[89], 并以典型的 GHZ 和 CHSH 问题作为例子, 揭示出局域实在模型的违背和纠缠资源态的计算能力之间的有趣关系, 例如 3-qubit GHZ 态加上线性副处理 (经典异或门和非门) 足以实现经典计算所用的普适与非门. 如图 4 所示, 此计算模型包含两部分: 1 个关联多方资源态和 1 个经典控制计算机, 彼此之间可以交换经典信息. 其中关联多方资源由一些个体组成, 控制计算机可为其提供 k 个不同的测量设置, 每个个体经测量后得到 l 个可能结果中的 1 个并返回控制计算机. 当设置 $k = l = 2$ 时, 此框架与原始的量子 one-way 模型相符. 此外, 他们还从计算复杂度的角度探讨了在使用不同的资源态 (如簇态, 二维图态, 计算张量网络态等) 和仅包含经典 CNOT 操作和 NOT 操作的计算机时, 三种复杂度类别 $\oplus L$, P 和 BQP 之间可能的转化关系. 除了直接考察量子资源态中的关联, 2014 年 Hoban 等^[90]提出利用量子方式生成的概率分布中的关联, 来构

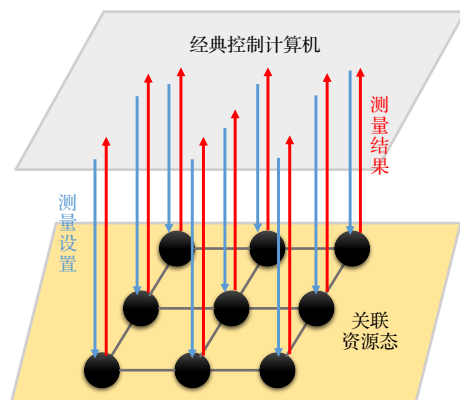


图 4 利用关联的计算模型. 经典控制计算机提供 k 个测量设置中的 1 个作为对关联多方资源态中个体的经典输入 (蓝色箭头), 并且接收 l 个测量结果中的 1 个 (红色箭头) 作为输出

Fig. 4. A computational model exploiting correlations. The classical control computer provides one of k measurement settings as the classical input (blue arrows) to each of the parties in the correlated resource state and receives one of l possible measurement results (red arrows) as the output.

造一种 MBQC 的经典对应 (称为“基于测量的经典计算”, MBCC), 可以展现特定量子模型的非经典计算特性, 如计算一种可能无法用传统经典计算设备有效模拟的 IQP* 量子线路。

与具有适应性测量的 MBQC 模型相比, 2011 年, Hoban 等^[91] 提出在一般的具有线性副处理 (做模 2 加法运算) 且非自适应的 MBQC (non-adaptive MBQC with linear side-processing, NMQC_⊕) 模型, 通过测量特定纠缠态得到的非局域关联结果可以实现对非线性布尔函数的确定性计算、与多方 Bell 不等式违背有关的概率计算等. 2013 年, Raussendorf^[51] 展示了在一些自然的假设下, 以高成功率计算 1 个非线性布尔函数的 MBQC 具有互文性. 互文 MBQC 中的 1 个有趣例子是求解离散对数问题的量子算法, 其相对经典算法能展现超多项式加速. 2017 年, Oestereich 和 Galvão^[52] 进一步基于互文性 MBQC 发展出的非线性函数计算模型中, 实现了可靠计算所需的 3-MAJ 门和 3 输入的 XNAND 门. 与仅能计算线性布尔函数的局域隐变量模型或非互文隐变量模型相比, NMQC_⊕ 模型仅用少量量子资源就能展现量子优势, 且 2017 年 Abramsky 等^[92] 提出一种互文性度量方式来量化这样的量子优势. 这是不同于某些量子霸权方案中通过不断扩展量子规模来达到量子优势的思路^[93], 为人们理解量子计算与经典计算之间的差异提供新颖的视角. 此外, 由于不需要用到传统适应性测量操作, NMQC_⊕ 模型对实验维持相干性的要求更低, 因而更容易在近期的实验平台上进行演示. 2021 年, Demirel 等^[76] 于实验上演示了利用 4 光子 GHZ 态来计算简单的低度非线性函数。

3.3 MBQC 与对称保护的拓扑相

具有特定群对称性的量子态所呈现的多体纠缠可导致所谓的对称保护拓扑序 (symmetry-protected topological order, SPTO) 现象^[94–97], 而 SPT 态可以为 MBQC 普适资源态的刻画提供一种新的视角. 2012 年, Else 等^[98] 论证了所有属于 1D 自旋链 SPT 相的基态都具有“量子计算导线 (quantum computational wires)”的统一属性, 如 $Z_2 \times Z_2$ 旋转对称性保护的 1D 簇态和 1D Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) 态, 并能确保 MBQC 中恒等门的完美操作. 2015 年, Miller 和 Miyake^[99] 展示

了 S_4 对称下的 1D SPT 相能以任意高保真度执行单 qubit 门操作且能作为 TQC 的潜在资源, 随后 2017 年 Raussendorf 等^[100] 将该结果推广到了执行更一般的 MBQC 模型。

在 1D 物质相研究的基础上, 2015 年 Nautrup 和 Wei^[101] 刻画了任意晶格上的元格态 (plaquette state) 呈现的非平凡 SPTO, 及用作 MBQC 的普适资源态. 与之不同的是, 2016 年 Miller 和 Miyake^[75] 提出将 3-qubit CCZ 门作用到位于 Union Jack 晶格中三角元胞上的 qubit, 可以得到具有 2D SPTO 的资源态 (系统具有 $Z_2 \times Z_2 \times Z_2$ 对称). 该工作指出具有 1D SPTO 的纠缠态 (如传统簇态) 配合任意单 qubit 测量可以实现普适量子计算, 而对于具有更加复杂纠缠形式的 2D SPTO 只需执行泡利测量就可以得到相同的结果. 基于 Union Jack 态实现普适 MBQC 的工作将凝聚态物理中 SPTO 的层级概念和量子计算中的所谓 Clifford 层级联系起来. 这样的量子计算普适性也于 2018 年推广到了 d 维量子比特 (qudit) 系统的非平凡 $Z_d \times Z_d \times Z_d$ SPT 态^[102]. 除了以上运用群上同调 (group cohomology) 工具构建 MBQC 的普适资源态及 SPTO 分类, 最近一两年的工作系统性地研究所谓“量子物质的计算相 (computational phases of quantum matter)”概念, 指出具有普适计算能力的对称保护量子相由所谓的子系统对称性保护^[103–105]. 在取得这些理论成果的同时, 2018 年以来对 SPT 态的表征和基于测量的算法也出现实验演示^[106,107].

4 MBQC 的实验进展

除了理论进展外, 在硬件方面当前量子技术已进入 NISQ 时代, 光量子、离子阱、超导体、半导体量子点等多条技术路线并行发展, 面向特定领域、特定问题的专用量子计算设备已取得了较大进步. 下面概述量子实验中对于 MBQC 算法的演示或相关量子原理的验证。

4.1 光量子系统

光子具有能同时应用于量子信息处理的多自由度 (极化、轨道角动量、空间模式、频率等) 和退相干率低等特点, 近年来研究者围绕 MBQC 计算模型开展了一系列基于光学系统的实验演示, 主要包括以下几方面:

2005年 Walther 等^[29]利用后选择技术制备4光子簇态并实现1WQC中的基本要素:单量子比特旋转门和两量子比特受控门,并演示四元素搜索的Grover算法.随后的光学实验扩展到利用多光子多自由度制备纠缠图态,且运用前馈技术来克服执行测量操作时的随机误差,从而执行确定性1WQC中的门操作^[5,34,50,108,109],并演示Deutsch算法^[8,110]和Simon算法^[10],量子博弈^[69],盲量子计算^[67],量子纠错码^[111],关联空间中的MBQC模型^[112]等.2019年,Reimer等^[113]利用光子的时间和频率自由度实验演示了基于多能级簇态的高维1WQC,显示出相对传统二能级簇态更高的抗噪特性.从技术上看,1WQC模型与集成光量子芯片技术的结合有助于未来可扩展的光学量子信息处理^[114,115].

在基于传态的计算模型方面,以Gottesman-Chuang传态计算理论^[19]为基础,2001年Knill-Laflamme-Milburn (KLM)方案^[116]仅用分束器、相移器、单光子源和光探测器等构成的线性光学系统就能有效实现量子计算.具体而言,光探测过程中潜在的非线性可以通过测量转移到量子比特上,从而实现普适计算.2005年,中国科学技术大学郭光灿课题组^[117]利用线性光学操控、参数下转换产生的光子极化-路径纠缠以及符合测量中的后选择技术,实现了TQC模型中关键的量子CNOT门传输.随后,该组又实现了传输单量子比特旋转作用于远程光子^[118].2010年,潘建伟课题组^[119]也发展出了基于其他光子自由度和纠缠态来实现传输量子门的实验方案及演示工作.

除了离散变量系统,近年来MBQC也在多模连续变量光学系统中得以实现.山西大学彭堃堃课题组^[120–123]和东京大学Furusawa课题组^[65,124–126]在制备连续变量光学簇态和实验演示MBQC方面积累了显著的系统性工作,当前基于连续变量系统执行容错MBQC的挑战在于低错误率立方相位门的实现及可扩展的光学集成等方面.

4.2 离子阱体系

早在1995年Cirac和Zoller^[127]就提出了将离子阱系统用于量子计算的方案.离子阱将一串离子囚禁在线性阱中,且用其冷却到基态的两个内能级编码1个量子比特.单比特操作可以通过激光脉冲寻址作用在相应离子上实现,两比特的受控操作可通过用离子串的公共质心及声子协助完成,测量离

子发出的荧光光谱就实现了量子态读取.离子阱系统在制备二维簇态上表现出良好的扩展性^[128],且可在2D离子阱阵列上演示适用于容错MBQC方案的3D簇态^[129].2013年Lanyon等^[6]制备多种不同类别的图态用于演示MBQC中的普适门操作和纠错码,并获得较高的态保真度.进一步地,该课题组^[130]也演示了离子阱系统图态对于多方Bell不等式的违背.

4.3 超导量子体系

在超导量子系统中,基于约瑟夫森效应构造超导约瑟夫森结作为量子比特,通过施加电流、电场或微波控制实现相应的量子门操作.早期MBQC相关的实验方案包括:超导量子电路中使用“一步法”制备大规模簇态^[131],与腔QED相结合的超导量子比特系统^[132–134]等.2019年,潘建伟组在超导电路系统制备具有真多方纠缠且保真度达到70%的12量子比特簇态^[135],Mooney等^[136]也基于IBM的量子云平台制备20量子比特规模的图态并用特定的纠缠见证(entanglement witness)进行刻画,且Albarrán-Arriagada等^[137]提出使用几十个量子比特执行1WQC且相比簇态更加节省资源的超导实验方案.这些成果为未来可扩展的MBQC奠定了理论和实验基础.目前已有一些基于超导电路的量子计算云平台问世(如IBM Q),方便研究者们实验演示各种MBQC相关的信息处理方案,如执行基于测量的量子网络编码^[12].

4.4 其他方案

当前,基于其他物理体系来制备量子簇态和图态或演示MBQC模型方案包括光学晶格囚禁冷原子体系^[138,139]、量子点^[140,141]、核磁共振(NMR)系统^[142]、腔量子电动力学(QED)^[143]等.整体而言,当前基于离散变量系统演示MBQC的实验规模还局限在几十个量子比特,而连续变量系统技术上可以产生具有上百万个不可分模式的簇态^[126].这些实验技术与方法的新进展为未来实现大规模MBQC提供了更多选择.

5 MBQC的未来研究展望

如前文所述,MBQC将量子信息处理和凝聚态物理领域中的问题相联系,相关研究内容至今还在不断拓展和深化.这里对未来具有潜力的研究方

向进行讨论和展望.

1) 构建基于新型资源态的 MBQC 模型. 例如在实现普适计算方面, 对一类具有对称保护拓扑序的 Union Jack 态执行单 qubit 泡利 X , Y 和 Z 测量^[75], 或对 2019 年 Takeuchi 等^[144] 构造的特定超图态仅用泡利 X 和 Z 测量都足以实现普适量子计算. 就计算鲁棒性而言, 超图态本身的一些非局域性和纠缠性质使得其对于局域实在 (local realism) 呈现指数增加的违背, 因而可以很好地抵抗粒子损失^[83]. 如何基于其他类别的资源态设计抗噪且操作简便的普适 MBQC 也符合实际的实验需求. 此外, 2019 年 Gachechiladze 等^[145] 提出了一种 3-一致超图态用作新型确定性 MBQC 的资源态, 且相关计算模型具有一些新的特征: 仅用泡利测量就可以实现普适计算; 允许并行执行所有的逻辑 CCZ 和 SWAP 门; 计算的逻辑深度等于逻辑 Hadamard 门的整体层数等. 因此, 有望进一步从深度复杂性和并行化计算的角度研究 MBQC 的优化方案.

2) 量子关联与特定计算模型之间的关系及其应用. 在 3.2 节中已介绍了 MBQC 模型和量子关联非经典性之间的紧密联系, 这些研究近年来启发了不少新奇的后继进展, 如 2018 年 Mansfield 和 Kashefi^[146] 提出“序列文本变换中的互文性”可能导致的计算优势, Frembs 等^[147] 展示在 d 维 qudit 系统中, 强非局域性配合经典线性处理足以估计高度多项式函数. 因此, 值得进一步探索的问题是: 其他类型的 MBQC 是否也具有特定的量子关联特性? 这样的特性能否带来相对经典算法的计算优势? 傅里叶分析理论表明任意的布尔函数都具有相应的多项式表示. 因此, 进一步发展和挖掘 NMQC_⊕ 以及 MBQC 模型的潜力, 有望构建出能计算任意非线性布尔函数且相对特定经典模型展现量子优势的新型计算模型, 并应用到依赖于 Bent 函数等高度非线性布尔函数的密码学^[148], 或需要非线性激活层的量子神经网络^[149] 等领域. 不同量子资源态在计算特定布尔函数的同时, 所得结果又能反过来用于测试和核实该量子态在实际实验中的非经典特性, 预示着新的量子态验证方法.

3) 用于普适量子计算的物质相研究. 从凝聚态物质的角度看, 量子计算的物质相是 1 个有趣的交叉研究方向^[103,104]. 如 3.3 节所述, 考虑 SPTO 的概念包含了多种不同类别的态结构和物质相, 进一步探索 SPTO 和 MBQC 及量子元胞自动机

(cellular automaton) 这几者之间的关系, 有助于构造新型计算普适的物质相 (如对称保护簇相^[105,150]), 及相应 SPT 态执行普适量子计算的具体例子. 在应用层面, 考虑将 MBQC 和拓扑纠错的思想结合起来, 能促进对噪声环境中顺利运行的可扩展量子计算设备的研制.

6 总 结

MBQC 计算模型及相关理论经过近二十年的发展其内涵已得到了极大丰富, 重要结果和相关文献资料繁多, 本文在选题上注重基础概念和典型案例, 希望能启发读者进一步学习和探索本文中未加详述但同样具有重要研究意义的相关课题, 如用于普适 MBQC 的 AKLT 态^[151], MBQC 与经典自旋模型的联系^[72] 等. 本文涵盖的主要内容如下.

首先, 简要介绍 MBQC 模型的基础概念和基本原理, 包括用作计算资源态的量子图态, 典型 1WQC 和 TQC 模型的执行过程, MBQC 模型用于普适量子计算的条件及其在量子信息处理领域的应用. 接着, 分析了 MBQC 的计算能力和多体物理系统之间的联系. 前人的研究从多角度揭示出多体系统的各种量子特性, 如量子纠缠、互文性、量子非局域性、对称保护的拓扑序等是 MBQC 模型能展现特定计算能力的物理根源. 这些发现既可以促进 MBQC 等相关新型量子计算模型的设计和原理分析, 也为复杂量子系统的性质研究提供了来自计算机科学领域的审视. 然后梳理了演示 MBQC 的不同技术路线, 包括光量子、离子阱、超导电路等多种方案的实验进展. 最后展望未来 MBQC 模型的潜在研究方向, 除了用于 MBQC 的资源态类型和物理性质可进一步丰富和扩展外, 还能与计算机领域关心的核心问题相联系, 从而应用到更广阔的信息处理场景.

总之, MBQC 以具有不同纠缠特性的量子多体系统为资源态, 将其特有的非局域性、互文性和拓扑保护等物理性质与进行信息处理的卓越能力 (如量子优势) 相联系, 为实现普适量子计算或特定算法提供了新的理论途径, 且相关实验演示促使人们不断提升对于量子物理系统的构建与操控水平. 因此, 围绕 MBQC 模型开展的研究将会给量子物理学、计算机科学、光学和材料学等多个学科领域带来新的启示, 并促进 NISQ 时代下量子计算机的发展.

参考文献

- [1] Nielsen M A, Chuang I L 2010 *Quantum Computation and Quantum Information* (New York: Cambridge University Press) pp1–12
- [2] Barenco A, Bennett C H, Cleve R, DiVincenzo D P, Margolus N, Shor P, Sleator T, Smolin J A, Weinfurter H 1995 *Phys. Rev. A* **52** 3457
- [3] Raussendorf R, Briegel H J 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5188
- [4] Raussendorf R, Browne D E, Briegel H J 2003 *Phys. Rev. A* **68** 022312
- [5] Prevedel R, Walther P, Tiefenbacher F, Böhi P, Kaltenbaek R, Jennewein T, Zeilinger A 2007 *Nature* **445** 65
- [6] Lanyon B, Jurcevic P, Zwerger M, Hempel C, Martinez E, Dür W, Briegel H, Blatt R, Roos C F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 210501
- [7] Tame M, Özdemir Ş, Koashi M, Imoto N, Kim M 2009 *Phys. Rev. A* **79** 020302
- [8] Tame M S, Prevedel R, Paternostro M, Böhi P, Kim M, Zeilinger A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 140501
- [9] Tame M, Kim M 2010 *Phys. Rev. A* **82** 030305
- [10] Tame M S, Bell B A, Di Franco C, Wadsworth W J, Rarity J G 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 200501
- [11] Bell B, Herrera-Martí D, Tame M, Markham D, Wadsworth W, Rarity J 2014 *Nat. Commun.* **5** 3658
- [12] Pathumsoot P, Matsuo T, Satoh T, Hajdušek M, Suwanna S, Van Meter R 2020 *Phys. Rev. A* **101** 052301
- [13] Hein M, Eisert J, Briegel H J 2004 *Phys. Rev. A* **69** 062311
- [14] Briegel H J, Browne D E, Dür W, Raussendorf R, Van den Nest M 2009 *Nat. Phys.* **5** 19
- [15] Preskill J 2018 *Quantum* **2** 79
- [16] Gühne O, Tóth G 2009 *Phys. Rep.* **474** 1
- [17] Bennett C H, Brassard G, Crépeau C, Jozsa R, Peres A, Wootters W K 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 1895
- [18] Bouwmeester D, Pan J W, Mattle K, Eibl M, Weinfurter H, Zeilinger A 1997 *Nature* **390** 575
- [19] Gottesman D, Chuang I L 1999 *Nature* **402** 390
- [20] Perdrix S 2005 *Int. J. Quantum Inf.* **3** 219
- [21] Jorrand P, Perdrix S 2005 *Proc. SPIE* **5833** 44
- [22] Gross D, Eisert J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 220503
- [23] Gross D, Eisert J, Schuch N, Perez-Garcia D 2007 *Phys. Rev. A* **76** 052315
- [24] Danos V, Kashefi E 2006 *Phys. Rev. A* **74** 052310
- [25] van den Nest M, Dür W, Miyake A, Briegel H 2007 *New J. Phys.* **9** 204
- [26] Danos V, Kashefi E, Panangaden P 2007 *J. ACM* **54** 8
- [27] Briegel H J, Raussendorf R 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 910
- [28] Hein M, Dür W, Eisert J, Raussendorf R, Nest M, Briegel H J 2006 arXiv: 0602096 [quant-ph]
- [29] Walther P, Resch K J, Rudolph T, et al. 2005 *Nature* **434** 169
- [30] Lu C Y, Zhou X Q, Gühne O, Gao W B, Zhang J, Yuan Z S, Goebel A, Yang T, Pan J W 2007 *Nat. Phys.* **3** 91
- [31] Van den Nest M, Miyake A, Dür W, Briegel H J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 150504
- [32] Nielsen M A 2006 *Rep. Math. Phys.* **57** 147
- [33] Browne D E, Rudolph T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 010501
- [34] Bell B, Tame M, Clark A, Nock R, Wadsworth W, Rarity J G 2013 *New J. Phys.* **15** 053030
- [35] Leung D W 2004 *Int. J. Quantum Inf.* **2** 33
- [36] Aliferis P, Leung D W 2004 *Phys. Rev. A* **70** 062314
- [37] Childs A M, Leung D W, Nielsen M A 2005 *Phys. Rev. A* **71** 032318
- [38] Verstraete F, Cirac J I 2004 *Phys. Rev. A* **70** 060302
- [39] Nielsen M A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 040503
- [40] Zwerger M, Briegel H, Dür W 2014 *Sci. Rep.* **4** 5364
- [41] Vidal G 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 147902
- [42] Markov I L, Shi Y 2008 *SIAM J. Comput.* **38** 963
- [43] Jozsa R 2006 arXiv: 0603163 [quant-ph]
- [44] Shi Y Y, Duan L M, Vidal G 2006 *Phys. Rev. A* **74** 022320
- [45] van den Nest M, Dür W, Vidal G, Briegel H J 2007 *Phys. Rev. A* **75** 012337
- [46] Yoran N, Short A J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 170503
- [47] Bravyi S, Raussendorf R 2007 *Phys. Rev. A* **76** 022304
- [48] Zhang S, Zhang Y, Sun Y, Sun H, Zhang X 2019 *Opt. Express* **27** 436
- [49] Chen M C, Li R, Gan L, Zhu X, Yang G, Lu C Y, Pan J W 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 080502
- [50] Chen K, Li C M, Zhang Q, Chen Y A, Goebel A, Chen S, Mair A, Pan J W 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 120503
- [51] Raussendorf R 2013 *Phys. Rev. A* **88** 022322
- [52] Oestereich A L, Galvão E F 2017 *Phys. Rev. A* **96** 062305
- [53] Raussendorf R, Briegel H J 2002 *Quantum Inf. Comput.* **2** 443
- [54] Broadbent A, Kashefi E 2009 *Theor. Comput. Sci.* **410** 2489
- [55] Browne D, Kashefi E, Perdrix S 2010 *Conference on Quantum Computation, Communication, and Cryptography* Leeds, UK, April 2010 pp35–46
- [56] Raussendorf R 2003 *Ph. D. Dissertation* (Munich: LMU)
- [57] Nielsen M A, Dawson C M 2005 *Phys. Rev. A* **71** 042323
- [58] Dawson C M, Haselgrove H L, Nielsen M A 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 020501
- [59] Raussendorf R, Harrington J, Goyal K 2006 *Ann. Phys.* **321** 2242
- [60] Raussendorf R, Harrington J, Goyal K 2007 *New J. Phys.* **9** 199
- [61] Raussendorf R, Harrington J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 190504
- [62] Devitt S J, Fowler A G, Stephens A M, Greentree A D, Hollenberg L C, Munro W J, Nemoto K 2009 *New J. Phys.* **11** 083032
- [63] Herrera-Martí D A, Fowler A G, Jennings D, Rudolph T 2010 *Phys. Rev. A* **82** 032332
- [64] Yao X C, Wang T X, Chen H Z, et al. 2012 *Nature* **482** 489
- [65] Fukui K, Asavanant W, Furusawa A 2020 *Phys. Rev. A* **102** 032614
- [66] Broadbent A, Fitzsimons J, Kashefi E 2009 *Proceedings of the 50th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science* pp517–526
- [67] Barz S, Kashefi E, Broadbent A, Fitzsimons J F, Zeilinger A, Walther P 2012 *Science* **335** 303
- [68] Tian Y L, Feng T F, Zhou X Q 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 110302 (in Chinese) [田宇玲, 冯田峰, 周晓祺 2019 物理学报 **68** 110302]
- [69] Prevedel R, Stefanov A, Walther P, Zeilinger A 2007 *New J. Phys.* **9** 205
- [70] Azuma K, Tamaki K, Lo H K 2015 *Nat. Commun.* **6** 6787
- [71] Matsuo T, Satoh T, Nagayama S, Van Meter R 2018 *Phys. Rev. A* **97** 062328
- [72] van den Nest M, Dür W, Briegel H J 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 110501
- [73] de las Cuevas G, Cubitt T S 2016 *Science* **351** 1180
- [74] Bernejo-Vega J, Hangleiter D, Schwarz M, Raussendorf R, Eisert J 2018 *Phys. Rev. X* **8** 021010
- [75] Miller J, Miyake A 2016 *npj Quantum Inform.* **2** 16036
- [76] Demirel B, Weng W, Thalacker C, Hoban M, Barz S 2021 *npj Quantum Inform.* **7** 29
- [77] Chen X, Zeng B, Gu Z C, Yoshida B, Chuang I L 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 220501
- [78] Cai J, Miyake A, Dür W, Briegel H J 2010 *Phys. Rev. A* **82**

- 052309
- [79] Chen J, Chen X, Duan R, Ji Z, Zeng B 2011 *Phys. Rev. A* **83** 050301
- [80] Cai J M, Dür W, van den Nest M, Miyake A, Briegel H 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 050503
- [81] Rossi M, Huber M, Bruß D, Macchiavello C 2013 *New J. Phys.* **15** 113022
- [82] Qu R, Wang J, Li Z S, Bao Y R 2013 *Phys. Rev. A* **87** 022311
- [83] Gachechiladze M, Budroni C, Gühne O 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 070401
- [84] Gross D, Flammia S T, Eisert J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 190501
- [85] Bremner M J, Mora C, Winter A 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 190502
- [86] Morimae T 2017 *Phys. Rev. A* **96** 052308
- [87] Brunner N, Cavalcanti D, Pironio S, Scarani V, Wehner S 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 419
- [88] Howard M, Wallman J, Veitch V, Emerson J 2014 *Nature* **510** 351
- [89] Anders J, Browne D E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 050502
- [90] Hoban M J, Wallman J J, Anwar H, Usher N, Raussendorf R, Browne D E 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 140505
- [91] Hoban M J, Campbell E T, Loukopoulos K, Browne D E 2011 *New J. Phys.* **13** 023014
- [92] Abramsky S, Barbosa R S, Mansfield S 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 050504
- [93] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. 2019 *Nature* **574** 505
- [94] Gu Z C, Wen X G 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155131
- [95] Pollmann F, Berg E, Turner A M, Oshikawa M 2012 *Phys. Rev. B* **85** 075125
- [96] Chen X, Gu Z C, Liu Z X, Wen X G 2012 *Science* **338** 1604
- [97] Chen X, Gu Z C, Liu Z X, Wen X G 2013 *Phys. Rev. B* **87** 155114
- [98] Else D V, Schwarz I, Bartlett S D, Doherty A C 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 240505
- [99] Miller J, Miyake A 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 120506
- [100] Raussendorf R, Wang D S, Prakash A, Wei T C, Stephen D T 2017 *Phys. Rev. A* **96** 012302
- [101] Nautrup H P, Wei T C 2015 *Phys. Rev. A* **92** 052309
- [102] Chen Y, Prakash A, Wei T C 2018 *Phys. Rev. A* **97** 022305
- [103] Raussendorf R, Okay C, Wang D S, Stephen D T, Nautrup H P 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 090501
- [104] Stephen D T, Nautrup H P, Bermejo-Vega J, Eisert J, Raussendorf R 2019 *Quantum* **3** 142
- [105] Daniel A K, Alexander R N, Miyake A 2020 *Quantum* **4** 228
- [106] Choo K, Von Keyserlingk C, Regnault N, Neupert T 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 086808
- [107] Azses D, Haenel R, Naveh Y, Raussendorf R, Sela E, Dalla Torre E G 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 120502
- [108] Tokunaga Y, Kuwashiro S, Yamamoto T, Koashi M, Imoto N 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 210501
- [109] Gao W B, Xu P, Yao X C, et al. 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 020501
- [110] Vallone G, Pomarico E, De Martini F, Mataloni P 2008 *Phys. Rev. A* **78** 042335
- [111] Barz S, Vasconcelos R, Greganti C, Zwerger M, Dür W, Briegel H J, Walther P 2014 *Phys. Rev. A* **90** 042302
- [112] Gao W B, Yao X C, Cai J M, Lu H, Xu P, Yang T, Lu C Y, Chen Y A, Chen Z B, Pan J W 2011 *Nat. Photonics* **5** 117
- [113] Reimer C, Sciara S, Roztock P, et al. 2019 *Nat. Phys.* **15** 148
- [114] Ciampini M A, Orioux A, Paesani S, et al. 2016 *Light Sci. Appl.* **5** e16064
- [115] Adcock J C, Vighar C, Santagati R, Silverstone J W, Thompson M G 2019 *Nat. Commun.* **10** 3528
- [116] Knill E, Laflamme R, Milburn G J 2001 *Nature* **409** 46
- [117] Huang Y F, Ren X F, Zhang Y S, Duan L M, Guo G C 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 240501
- [118] Xiang G Y, Li J, Guo G C 2005 *Phys. Rev. A* **71** 044304
- [119] Gao W B, Goebel A M, Lu C Y, et al. 2010 *P. Natl. Acad. Sci.* **107** 20869
- [120] Su X, Tan A, Jia X, Zhang J, Xie C, Peng K 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 070502
- [121] Su X, Hao S, Deng X, Ma L, Wang M, Jia X, Xie C, Peng K 2013 *Nat. Commun.* **4** 2828
- [122] Su X, Jia X, Xie C, Peng K 2014 *Sci. China Phys. Mech.* **57** 1210
- [123] Qin Z, Gessner M, Ren Z, Deng X, Han D, Li W, Su X, Smerzi A, Peng K 2019 *NPJ Quantum Inf.* **5** 3
- [124] Ukai R, Iwata N, Shimokawa Y, et al. 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 240504
- [125] Yokoyama S, Ukai R, Armstrong S C, et al. 2013 *Nat. Photonics* **7** 982
- [126] Yoshikawa J I, Yokoyama S, Kaji T, et al. 2016 *APL Photonics* **1** 060801
- [127] Cirac J I, Zoller P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4091
- [128] Wunderlich H, Wunderlich C, Singer K, Schmidt-Kaler F 2009 *Phys. Rev. A* **79** 052324
- [129] Stock R, James D F 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 170501
- [130] Lanyon B P, Zwerger M, Jurcevic P, Hempel C, Dür W, Briegel H J, Blatt R, Roos C 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 100403
- [131] You J, Wang X B, Tanamoto T, Nori F 2007 *Phys. Rev. A* **75** 052319
- [132] Zhang X, Gao K, Feng M 2006 *Phys. Rev. A* **74** 024303
- [133] Xue Z Y, Wang Z 2007 *Phys. Rev. A* **75** 064303
- [134] Xue Z Y, Zhang G, Dong P, Yi Y M, Cao Z L 2006 *Eur. Phys. J. B* **52** 333
- [135] Gong M, Chen M C, Zheng Y, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 110501
- [136] Mooney G J, Hill C D, Hollenberg L C 2019 *Sci. Rep.* **9** 13465
- [137] Albarrán-Arriagada F, Barrios G A, Sanz M, et al. 2018 *Phys. Rev. A* **97** 032320
- [138] Vaucher B, Nunnenkamp A, Jaksch D 2008 *New J. Phys.* **10** 023005
- [139] Mamaev M, Blatt R, Ye J, Rey A M 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 160402
- [140] Economou S E, Lindner N, Rudolph T 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 093601
- [141] Gimeno-Segovia M, Rudolph T, Economou S E 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 070501
- [142] Ju C, Zhu J, Peng X, Chong B, Zhou X, Du J 2010 *Phys. Rev. A* **81** 012322
- [143] Blythe P, Varcoe B 2006 *New J. Phys.* **8** 231
- [144] Takeuchi Y, Morimae T, Hayashi M 2019 *Sci. Rep.* **9** 13585
- [145] Gachechiladze M, Gühne O, Miyake A 2019 *Phys. Rev. A* **99** 052304
- [146] Mansfield S, Kashefi E 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 230401
- [147] Frembs M, Roberts S, Bartlett S D 2018 *New J. Phys.* **20** 103011
- [148] Hu F, Lamata L, Wang C, Chen X, Solano E, Sanz M 2020 *Phys. Rev. Appl.* **13** 054062
- [149] Yan S, Qi H, Cui W 2020 *Phys. Rev. A* **102** 052421
- [150] Devakul T, Williamson D J 2018 *Phys. Rev. A* **98** 022332
- [151] Wei T C, Affleck I, Raussendorf R 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 070501

SPECIAL TOPIC—Quantum computation and quantum information

Research progress of measurement-based quantum computation^{*}

Zhang Shi-Hao¹⁾ Zhang Xiang-Dong²⁾ Li Lü-Zhou^{1)†}

1) (*Institute of Quantum Computing and Computer Theory, School of Computer Science and Engineering, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Key Laboratory of Advanced Optoelectronic Quantum Architecture and Measurements of Ministry of Education, School of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

(Received 15 May 2021; revised manuscript received 15 June 2021)

Abstract

Compared with the quantum gate circuit model, the measurement-based quantum computing model provides an alternative way to realize universal quantum computation, and relevant contents have been greatly enriched after nearly two decades of research and exploration. In this article, we review the research history and status of the measurement-based quantum computing model. First, we briefly introduce the basic theories of this model, including the concept and working principles of quantum graph states as resource states, the model's computational universality and classical simulation methods, and relevant applications in the field of quantum information processing such as designing quantum algorithms and fault-tolerant error correction schemes. Then, from the perspective of quantum physical properties, which include the specific roles of quantum entanglement, contextuality, quantum correlations, symmetry-protected topological order, and quantum phases of matter as computing resources, the close relationship between measurement-based quantum computing model and quantum many-body system is presented. For example, a type of measurement-based computing model for exploiting quantum correlations can show a quantum advantage over the classical local hidden variable models, or certain symmetry-protected topological order states enable the universal quantum computation to be conducted by using only the measurements of single-qubit Pauli operators. Next, a variety of different technical routes and experimental progress of realizing the measurement-based quantum computing model are summarized, such as photonic systems, ion traps, superconducting circuits, etc. These achievements in various physical areas lay the foundation for future scalable and fault-tolerant quantum computers. Finally, we discuss and prospect the future research directions in this field thereby inspiring readers to further study and explore the relevant subjects.

Keywords: quantum computation, quantum entanglement, quantum correlations, symmetry-protected topological order

PACS: 03.67.-a, 03.65.Ud, 03.67.Lx, 03.67.Ac

DOI: 10.7498/aps.70.20210923

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61772565, 62102464), the Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation, China (Grant No. 2020B1515020050), the Key Research and Development project of Guangdong Province, China (Grant No. 2018B030325001), and the China Postdoctoral Science Foundation (Grant Nos. 2020M683049, 2021T140761).

[†] Corresponding author. E-mail: lilvzh@mail.sysu.edu.cn



混合量子-经典算法：基础、设计与应用

陈然一 赵桦池 宋旨欣 赵炫强 王琨 王鑫

Hybrid quantum-classical algorithms: Foundation, design and applications

Chen Ran-Yi-Liu Zhao Ben-Chi Song Zhi-Xin Zhao Xuan-Qiang Wang Kun Wang Xin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 210302 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210985

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210985>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

表面等离激元量子信息应用研究进展

Recent progress of the application of surface plasmon polariton in quantum information processing

物理学报. 2017, 66(14): 144202 <https://doi.org/10.7498/aps.66.144202>

量子相干

Quantum coherence

物理学报. 2019, 68(3): 030304 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181779>

量子存储研究进展

Research progress of quantum memory

物理学报. 2019, 68(3): 030307 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190039>

基于拉曼协议的量子存储

Raman protocol-based quantum memories

物理学报. 2019, 68(3): 034203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182215>

基于量子算法的量子态层析新方案

A novel scheme of quantum state tomography based on quantum algorithms

物理学报. 2019, 68(14): 140301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190157>

量子计算与量子模拟

Quantum computation and quantum simulation

物理学报. 2018, 67(12): 120301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180710>

专题: 量子计算与量子信息

混合量子-经典算法: 基础、设计与应用

陈然一 赵犇池 宋旨欣 赵炫强 王琨 王鑫[†]

(百度研究院量子计算研究所, 北京 100193)

(2021 年 5 月 25 日收到; 2021 年 6 月 25 日收到修改稿)

量子计算作为一种新兴的计算范式, 有望解决在组合优化、量子化学、信息安全、人工智能领域中经典计算机难以解决的技术难题. 目前量子计算硬件与软件都在持续高速发展, 不过未来几年预计仍无法达到通用量子计算的标准. 因此短期内如何利用量子硬件解决实际问题成为了当前量子计算领域的一个研究热点, 探索近期量子硬件的应用对理解量子硬件的能力与推进量子计算的实用化进程有着重要意义. 针对近期量子硬件, 混合量子-经典算法 (也称变分量子算法) 是一个较为合理的模型. 混合量子-经典算法借助经典计算机尽可能发挥量子设备的计算能力, 结合量子计算与机器学习技术, 有望实现量子计算的首批实际应用, 在近期量子计算设备的算法研究中具有重要地位. 本文综述了混合量子-经典算法的设计框架以及在量子信息、组合优化、量子机器学习、量子纠错等领域的研究进展, 并对混合量子-经典算法的挑战以及未来研究方向进行了展望.

关键词: 混合量子-经典算法, 量子信息, 量子计算**PACS:** 03.67.-a, 03.67.Ac, 03.67.Lx, 03.67.Pp**DOI:** 10.7498/aps.70.20210985

1 引言

量子计算是基于量子力学与计算机科学的一门新兴学科, 被认为在人工智能、信息安全、生物制药、量子化学等领域能带来极具潜力的应用. 特别地, 通用量子计算机理论上可以高效地解决经典计算机无法高效解决的大数分解^[1]、数据搜索^[2]、量子模拟^[3]等问题. 随着学术界与工业界对量子计算技术研发力度的逐步加大, 量子计算硬件的技术在不断地进步^[4-7]. 尽管如此, 目前的技术离通用量子计算机要求的保真度、相干时间等条件还有一段距离. 因此, 从目前已实现几十量子位到未来实现通用量子计算这段时间, 如何利用好当前不断增强的有噪中规模量子 (noisy intermediate-scale quantum, NISQ) 计算设备^[8], 是一个至关重要的问题, 也是当前量子计算领域的一个研究热点.

NISQ 计算设备有从几十到几百的量子位, 这

些量子位是没有纠错的物理量子比特 (而非逻辑量子比特), 只能进行相干时间有限的不完美的量子操作. 在追寻量子计算优势的过程中, 学者们基于 NISQ 计算设备进行了诸多应用的探索, 涵盖了组合优化^[9]、量子化学^[10]、量子物理^[8]、机器学习^[11,12]等诸多方向, 目标是尽可能利用 NISQ 设备的能力去完成特定的对于经典计算相对有挑战的任务.

基于 NISQ 设备, 最常见的算法模型为混合量子-经典算法, 旨在借助经典计算机的力量尽可能发挥 NISQ 计算设备的能力去解决具体的问题. 混合量子-经典算法的一部分任务由量子计算设备完成, 然后通过经典计算调整量子计算部分的可调参数, 反复迭代最后输出结果. 由于采用的电路拟设可以由 NISQ 设备高效实现, 混合量子-经典算法被认为可以基于近期设备发挥量子优势. 混合量子-经典算法在诸多领域有着广泛应用, 其中最具有代表性的包括求解组合优化问题的量子近似优化算法 (quantum approximate optimization algo-

[†] 通信作者. E-mail: wangxin73@baidu.com

rithm, QAOA)^[13]与求解基态能量问题的变分子本征求解器 (variational quantum eigensolver, VQE)^[10,14]. 囿于目前对外开放的量子设备有限, 同时又涉及经典与量子设备之间的交互, 目前此类混合算法通常在模拟平台^[15–17]上进行小规模开发, 然后通过硬件平台验证效果. 量桨^[15]是国内较为完善的混合算法开发平台, 借助技术领先的产业级深度学习框架飞桨^[18,19], 通过深度学习赋能量子计算领域的前沿研发.

本文综述就混合量子-经典算法的概念、原理、应用实例、挑战与瓶颈等方面进行详细的介绍. 具体的文章结构如下: 第2节介绍混合量子-经典算法中的基本概念与设计思想; 第3节列举混合量子-经典算法在不同领域中具有代表性的若干应用; 第4节讨论混合量子-经典算法目前面临的主要挑战; 第5节进行总结.

本文常用的符号如表1所列.

表1 主要符号表
Table 1. Notations.

定义	符号
厄米特算符	H
含参数酉算符	$U(\theta), V(\theta)$
不含参数酉算符	W
可调参数	θ
量子态	ρ, σ
量子比特数	n
电路层数	L
损失函数	$C, C(\theta)$
能量	E
泡利算符	P
迹	Tr

2 基本概念

混合量子-经典算法的核心在于将计算任务转化为优化问题. 以最具代表性的变分子本征求解器 (VQE)^[10]为例, VQE将求解哈密顿量 H 的基态能量 E_0 问题转化为整个密度算符 (量子态) 集合上的优化问题:

$$E_0 = \min_{\rho \in \mathcal{D}} \text{Tr}[H\rho], \quad (1)$$

其中 $\mathcal{D}$ 表示所有与 H 维数相同的密度算符的集合, 而 $\text{Tr}[H\rho]$ 可以通过对量子态的测量得到. 进一步地, 如果将量子态 ρ 视作从某个固定量子态 ρ_{in} 出

发, 经过一个参数化酉变 $U(\theta)$ 演化之后的量子态 $\rho = U(\theta)\rho_{\text{in}}U(\theta)^\dagger$, 则 VQE 可以表示为一个参数空间上的优化问题:

$$E_0 = \min_{\theta} \text{Tr}[HU(\theta)\rho_{\text{in}}U^\dagger(\theta)] = \min_{\theta} C(\theta). \quad (2)$$

通过调整参数 θ 以最小化 $C(\theta)$, VQE 最终得到目标基态能量 E_0 .

从 VQE 的例子中可以看出, 混合量子-经典算法通常包含一个精心设计的损失函数 C , 使得当 C 取最小 (或最大) 值时可以实现计算任务. 随后, 混合量子-经典算法通过调整一个参数化酉变 $U(\theta)$ 最小 (或最大) 化损失函数, 从而实现计算任务. 值得注意的是, 由于损失函数实现了从实数 (可调参数) 到实数 (测量结果) 的映射, 混合量子-经典算法可以使用经典优化方法来优化可调参数 θ . 可见, 算法结合了量子设备的计算能力与经典设备的优化方法, 故得名混合量子-经典算法. 典型的混合量子-经典算法流程如图1所示.

由图1可知, 实现一个混合量子-经典算法必须考虑如何设计损失函数将计算任务转化为优化问题, 以及如何构造一个参数化酉变 (如果算法处理的任务涉及到经典数据, 则需要额外的编码过程将数据转换成量子数据. 详见3.4.1节). 此外, 混合量子-经典算法中采用的经典优化方法往往会对算法的效率和准确度产生影响. 特别地, 相比于不基于梯度的优化方法, 解析梯度以及解析高阶导数因为需要运行更少的量子电路来决定优化方向成为混合量子-经典算法所关注的重点. 本节接下来将就这几个混合量子-经典算法中的基本概念展开讨论.

2.1 损失函数

损失函数是混合量子-经典算法设计的核心. 一般来说, 为保证函数值可以在量子设备上通过测量高效计算, 混合量子-经典算法中的损失函数具有如下形式:

$$\begin{aligned} C(\theta) &= \sum_j f_j (\text{Tr}[H_j U(\theta)\rho_j U^\dagger(\theta)]) \\ &= \sum_j f_j (\langle H_j \rangle), \end{aligned} \quad (3)$$

其中 ρ_j 是一组输入量子态, H_j 是一组厄米特算符, $\langle H_j \rangle = \text{Tr}[H_j U(\theta)\rho_j U^\dagger(\theta)]$ 表示在电路末端进行 H_j 测量的结果, f_j 是一组经典函数, 表示对测量结

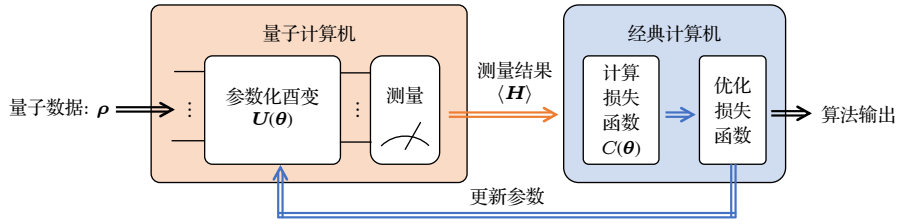


图 1 混合量子-经典算法流程
Fig. 1. Diagram for hybrid quantum-classical algorithms.

果的经典后处理. 由混合量子-经典算法的框架可知, 损失函数的设计必须满足: 当且仅当损失函数达到全局最小时, 计算任务求得解. 这被称为混合量子-经典算法的忠实性条件^[20]. 对于 VQE 算法, 由于其损失函数直接设为哈密顿量的测量值, 忠实性条件自然满足.

需要指出的是, 考虑到在近期设备上的适用性, 混合量子-经典算法的损失函数必须能够高效地计算. 根据厄米特算符 H_j 的种类, 计算损失函数的方法可大致分为以下几种:

1) H_j 是泡利算符. 此时损失函数可以直接通过对量子态的泡利测量得到. 特别地, 在许多常见的物理模型 (如伊辛模型) 中, H_j 写成局部泡利算符的线性组合:

$$H_j = \sum_k c_{j,k} P_{j,k}, \quad (4)$$

其中 $P_{j,k}$ 是泡利算符, 且只不平凡地作用在局部的量子比特上. 若每一个 $P_{j,k}$ 最多只作用于 m 个量子比特, 则称损失函数为 m -局部的. 局部损失函数相较于全局损失函数在梯度消失问题上被认为更具有优势^[21] (详见 4.3 节).

2) H_j 是密度算符 σ . 此时计算任务往往包含计算量子态之间的态重叠 ($\text{Tr}[\rho\sigma]$), 或量子态的纯度 ($\text{Tr}[\rho^2]$). 这类的损失函数可通过交换测试^[22] 或其变种破坏性交换测试^[23] 在量子设备上计算 (电路实现分别如图 2(a) 和图 2(b) 所示). 同时, 由于密度算符之间的 Frobenius 距离可以写成如下形式:

$$\begin{aligned} \|\rho - \sigma\|_F &= \text{Tr}[(\rho - \sigma)^2] \\ &= \text{Tr}[\rho^2] - 2\text{Tr}[\rho\sigma] + \text{Tr}[\sigma^2]. \end{aligned} \quad (5)$$

故密度算符的 Frobenius 距离也可以由交换测试得到, 其常见于量子态制备相关的任务.

3) H_j 中包含酉算符. 由于酉算符自身不是厄米特算符, 此时需要对酉算符进行变换, 常见的变

换包括哈达玛测试^[24], 用于计算

$$\text{Re}(\text{Tr}[U\rho]) = \frac{1}{2}\text{Tr}[(U + U^\dagger)\rho], \quad (6)$$

哈达玛测试的电路实现如图 2(c) 所示. 同时, 通过将哈达玛测试电路输入端的 $|0\rangle$ 替换为 $1/\sqrt{2}(|0\rangle - i|1\rangle)$ 即可计算 $\text{Im}(\text{Tr}[U\rho])$.

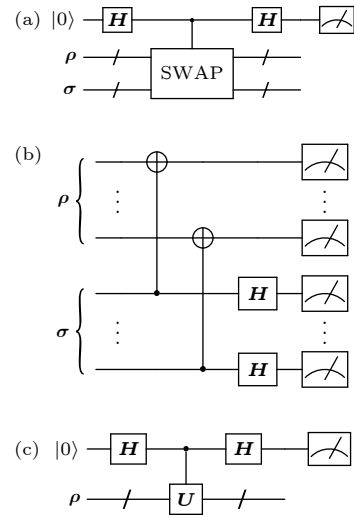


图 2 (a) 交换测试电路; (b) 破坏性交换测试电路; (c) 哈达玛测试电路

Fig. 2. (a) Swap test circuit; (b) destructive swap test circuit; (c) Hadamard test circuit.

2.2 参数化酉变

作为典型的 NISQ 算法, 混合量子-经典算法实现的关键在于采用近期设备可实现的参数化酉变. 参数化量子电路 (parameterized quantum circuit, PQC) 是一种通用的参数化酉变实现方式. 在 PQC 中, 电路一般采用分层结构:

$$\begin{aligned} U(\theta) &= U_L(\theta_L) \cdots U_2(\theta_2) U_1(\theta_1) \\ &= V_L(\theta_L) W_L \cdots V_2(\theta_2) W_2 V_1(\theta_1) W_1, \end{aligned} \quad (7)$$

式中 L 被称为电路的层数. 由于设备噪声的存在, 近期设备所能提供的有效的电路宽度 (量子比特数 n) 和深度 (层数 L) 将受到限制. 同时, 为使

电路能够在近期设备上高效实现, 在电路的每一层 $U_l(\theta_l) = V_l(\theta_l)W_l$ 中, 参数化的西门 $V_l(\theta_l) = \Pi_k e^{-i\theta_k A_k/2}$ 一般采用单比特旋转门或含参双比特门 (ZZ 门); 而不含参的西门 W_l 作为连接层, 一般由临近量子比特间的 CNOT 或 CZ 两比特门构成, 为电路提供纠缠能力. 参数化电路的结构也常被称为拟设. 由于参数化量子电路的逻辑结构与设计思想和机器学习中的神经网络相似, 参数化量子电路又被称为量子神经网络 (quantum neural network, QNN).

在针对特定问题的算法中, 可以通过问题的解的先验信息针对性地设计电路拟设 (如组合优化问题中的量子交替算符拟设 [9] 等). 而在针对一般问题的电路结构设计中, 或当问题的解不存在先验信息时, 电路结构的每一层 $U_l(\theta_l)$ 往往采用相同的结构, 即 $U_l(\theta_l) = U(\theta_l) = V(\theta_l)W$. 文献 [25] 列举了若干常见的硬件高效拟设. 此外, 文献 [21] 设计了一种交错分层拟设. 这样的拟设在宽度或深度增大时会面临电路可训练性变差等问题. 相对地, 一些每层结构各不相同的电路拟设在特定任务下拥有更好的表现. 下面介绍几种特殊的电路拟设.

1) 量子感知机 [26,27]. 类比于经典神经网络中的感知机模型, 在量子感知机模型中, 每个神经元对应一个量子比特, 神经元之间的连接对应作用在两端的量子比特上的酉变. 量子感知机模型及其对应的量子电路模型如图 3(a) 所示. 一种耗散量子感知机模型 [27] 在节省量子比特数方面具有一定优势.

2) 量子卷积神经网络 (quantum convolutional neural network, QCNN) [28]. 在 QCNN 中, 电路各

层被进一步分为卷积层和池化层. 卷积层电路由参数化的西门构成, 而在池化层中, 电路通过测量部分量子比特减小系统的维度. 此外, 一种树张量网络 [29] 也采用了类似的结构逐层减小系统的宽度. QCNN 和树张量网络的结构如图 3(b) 所示. 由于系统的有效宽度随层数快速减小, QCNN 等技术有望避免梯度消失问题 [30].

3) 影子电路 [31]. 受到经典影子学习 [32] 的启发, 影子电路模型通过对多次局部酉变和局部测量结果的后处理学习目标特征. 在每一次影子电路的运行中, 参数化的西门只作用在部分系统上, 然后对这部分系统进行测量, 这种部分系统的测量信息被称为“影子”; 最后, 将所有的“影子”进行经典后处理 (例如全连接的经典神经网络) 以提取特征. 影子电路模型如图 3(c) 所示. 由于采用了局部的电路和测量, 影子电路模型在节约计算资源 (需要训练的参数量) 和可训练性方面更有优势.

参数化量子电路的设计目前主要面临两个挑战: 其一是如何在有限的深度下保证拥有足够的表达能力和纠缠能力来完成任务, 其二是如何保证参数的可训练性. 第 4 节将就这两个问题作进一步讨论.

2.3 优化方法

由于混合量子-经典算法将损失函数的优化任务“外包”给了经典计算机, 绝大多数经典优化方法都可以用于混合量子-经典算法中的优化步骤. 常用的混合量子-经典算法的经典优化方法中, 基于梯度的方法有批量梯度下降、ADAM 优化、涉及多

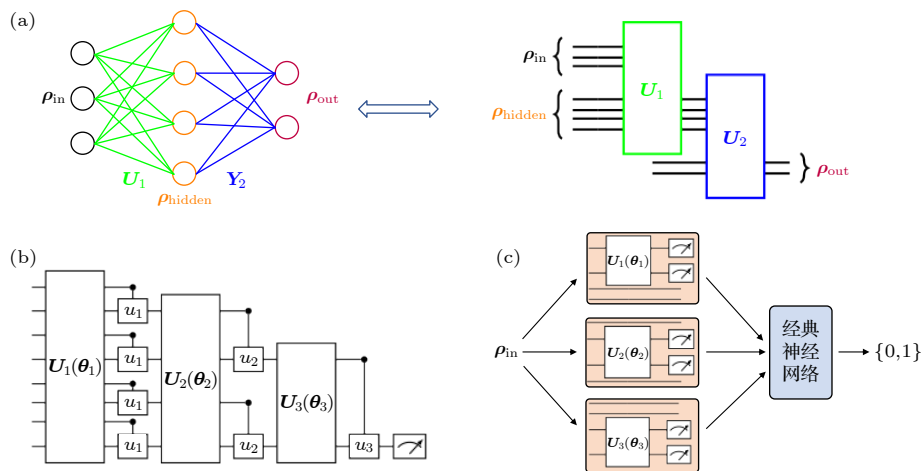


图 3 (a) 量子感知机; (b) 量子卷积神经网络; (c) 影子电路

Fig. 3. (a) Quantum perceptron; (b) quantum convolutional neural network; (c) shadow circuit.

样本的随机梯度下降 (stochastic gradient decent, SGD)、以及基于梯度估计的同步扰动随机逼近算法 (simultaneous perturbation stochastic approximation, SPSA) 等. 由于混合量子-经典算法中损失函数的解析梯度可以在量子设备上直接计算 (详见 2.4 节), SGD 和 ADAM 被广泛应用于各类混合量子-经典算法, 特别是算法的经典模拟^[33]中; 同时, 非梯度的优化方法包括下山单纯形法、粒子群算法、贝叶斯估计等, 这些优化算法的详细内容可参阅优化理论相关教材^[34].

值得一提的是, 基于参数化量子电路特有的属性, 专门针对混合量子-经典算法的优化方法也相继被提出. 一种基于梯度的优化方法被称为量子自然梯度^[35]优化. 相比于传统的梯度下降法, 量子自然梯度优化在每轮迭代中参数更新时需额外计算因子 g^+ :

$$\theta_t = \theta_{t-1} - \eta g^+ \nabla C(\theta_{t-1}), \quad (8)$$

其中 g 为 Fubini-Study 度量张量, g^+ 表示 g 的伪逆. 更进一步地, 由于 Fubini-Study 度量张量 g 的分块对角矩阵近似也可以在量子设备上直接计算 (详见 2.4 节), 结合解析梯度 ∇C , 整个量子自然梯度优化的参数更新便可以在混合量子-经典算法的框架下实现. 相比于传统的梯度下降法, 量子自然梯度在一些 VQE 问题中具有更快的收敛速度.

另一类针对混合量子-经典算法的非梯度优化方法被称为量子序列最小优化^[36–38]. 此类优化方法的关键在于利用了损失函数的如下性质: 当损失函数 (3) 式中的后处理函数 f_j 均为一次函数, 且参数化酉门 $V_l(\theta_l) = \Pi_k e^{-i\theta_k A_k/2}$ 中的生成元 A_k 满足 $A_k^2 = I$ 时, 固定其他参数, 损失函数 C 是任一参数的周期为 2π 的正弦函数. 基于此, 量子序列最小优化方法在优化参数时, 可以选取一个或一组参数并固定其他参数, 直接将选取的参数调至当前最优, 随后对所有参数重复这一过程直至收敛. 相比于传统的梯度下降法, 量子序列最小优化在一些 VQE 问题中具有更快的收敛速度.

2.4 解析梯度

混合量子-经典算法的一大优势在于其损失函数的梯度可以在量子设备上直接计算. 不失一般性, 假设损失函数不包含对测量结果的经典后处理:

$$C(\theta) = \text{Tr} [H U(\theta) \rho U^\dagger(\theta)]. \quad (9)$$

显然, 包含经典后处理的损失函数可以利用链式求导法则得到.

参数平移规则^[39,40]是计算混合量子-经典算法中解析梯度的基本工具. 该规则表明, 当参数化酉门 $V_l(\theta_l) = \Pi_k e^{-i\theta_k A_k/2}$ 中的生成元 A_k 满足 $A_k^2 = I$ 时, 形如 (9) 式的损失函数对参数 θ_k 的偏导为

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_k} = \frac{C\left(\theta_k + \frac{\pi}{2}\right) - C\left(\theta_k - \frac{\pi}{2}\right)}{2}, \quad (10)$$

式中 $C(\theta_k \pm \pi/2)$ 表示 C 中参数 $\theta_k \pm \pi/2$ 而其他参数保持不变. 因此, 通过改变目标参数后计算两次电路的输出, 可以得到损失函数关于目标参数的梯度值. 进一步地, 在一些基于梯度的优化算法中需要用到高阶导数信息 (如黑塞矩阵等), 此时反复利用参数平移规则即可求解相应的高阶导数.

除参数平移规则之外, 另一种计算参数的方法^[41]将偏导式 (10) 表示为

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_k} = \text{Im} \left(\text{Tr} [U_+^\dagger H U_+ P U_- \rho U_-^\dagger] \right), \quad (11)$$

式中 $U_- (U_+)$ 表示参数 θ_k 对应的参数化酉门之前 (之后) 的电路, 即 $U_- = U_l(\theta_l) \cdots U_1(\theta_1)$, $U_+ = U_L(\theta_L) \cdots U_{l+1}(\theta_{l+1})$. 因此, 当 P 也是酉算符时 (P 通常为局部泡利算符), 梯度值也可以通过引入一个辅助比特经由哈达玛测试 (见 2.1 节) 计算得到.

最后简单介绍量子自然梯度中的 Fubini-Study 度量张量的近似计算^[35]. 文献^[35]表明, Fubini-Study 度量张量有分块对角矩阵近似 $g = \text{diag}(g^{(1)}, g^{(2)}, \dots, g^{(L)})$, 且对角子矩阵 $g^{(l)}$ 的矩阵元满足

$$g_{jk}^{(l)} = \text{Tr} [P_j P_k U_- \rho U_-^\dagger] - \text{Tr} [P_j U_- \rho U_-^\dagger] \text{Tr} [P_k U_- \rho U_-^\dagger], \quad (12)$$

可见, 通过对电路运行结果进行测量可以直接得到度量张量的分块对角矩阵近似.

2.5 计算精度

本节的最后简单讨论混合量子-经典算法中计算损失函数时达到的精度与所需的测量次数. 不失一般性, 设待计算的损失函数为 $C = \text{Tr} [H \rho_{\text{out}}]$, 其中 ρ_{out} 表示电路输出量子态. 由于量子力学的内禀随机性, 损失函数 C 实际上通过测量结果估计得到. 为此, 首先将 H 分解到泡利测量算符上:

$\mathbf{H} = \sum_{j=1}^m \mu_j \mathbf{P}_j$. 随后, 损失函数 C 可按如下方式估计:

1) 在泡利算符 $\mathbf{P}_j$ 上对 ρ_{out} 进行 T 次测量. 由于泡利测量只有两种测量结果, 记+1 结果出现的次数为 M_0 , -1 结果出现的次数为 M_1 , 记 $X_j^{(1)} = (M_0 - M_1)/T$.

2) 重复 S 次步骤 1, 得到 $X_j^{(1)}, X_j^{(2)}, \dots, X_j^{(S)}$.

3) 取 $X_j^{(1)}, X_j^{(2)}, \dots, X_j^{(S)}$ 的中位数 X_j^{median} .

4) 对所有 $j \in [1, m]$ 执行步骤 1—3, 损失函数估计值为 $\hat{C} = \sum_{j=1}^m \mu_j X_j^{\text{median}}$.

不难证明 $\hat{C}$ 是损失函数 C 的无偏估计: $\mathbb{E}[\hat{C}] = C$. 进一步地, 根据文献 [42] 可知, 当估计测量总次数 mTS 满足

$$mTS = O \left[\frac{1}{\epsilon^2} m \left(\sum_{j=1}^m |\mu_j| \right)^2 \log \left(\frac{m}{\delta} \right) \right] \quad (13)$$

时, 估计误差有 $1 - \delta$ 的概率小于 ϵ , 即 $\Pr[|\hat{C} - C| \leq \epsilon] \geq 1 - \delta$. 因此, 当 $m = O(\text{poly}(n))$ 时, 损失函数可以通过测量在量子设备上以任意精度高效地估计.

3 应用实例

3.1 谱信息估计

由于物理粒子的密度算符、哈密顿量等物理量的矩阵描述都是厄米特矩阵, 粒子的各种特性往往能被对应物理量的谱信息 (本征值) 很好地描述; 另一方面, 量子电路模型也能直接处理密度矩阵 (量子态) 和哈密顿量 (可观测量). 因此, 对厄米特矩阵的谱信息估计是混合量子-经典算法的一个重要也是直接的应用.

VQE 是谱信息估计中最典型的一个例子. 在 VQE 中, 基态能量直接对应厄米特矩阵的最小本征值; 同时, VQE 基于“对任意量子态的测量值的期望都不小于最小本征值”这一性质设计损失函数, 从而成功求解基态能量. 受 VQE 启发, 提取更多谱信息的混合量子-经典算法被相继提出.

3.1.1 子空间搜索-量子变分本征求解器

子空间搜索-量子变分本征求解器 (subspace search VQE, SSVQE)^[43] 是 VQE 算法的一个直接拓展. SSVQE 求解目标哈密顿量的基态以及前 $K - 1$ 个激发态能量, 亦即求解厄米特矩阵最小的

K 个本征值. 在 SSVQE 中, 损失函数对 K 个正交单位向量 (通常选取计算基向量) 经过参数化电路后的测量值加权求和:

$$C(\theta) = \sum_{k=1}^K \omega_k \times \text{Tr} [\mathbf{H} \mathbf{U}(\theta) \rho_k \mathbf{U}^\dagger(\theta)], \quad (14)$$

其中 $\{\rho_k\}_{k=1}^K$ 是互相正交的纯态, 通常取 $\rho_k = |k-1\rangle\langle k-1|$, ω_k 是严格单调减小的正实数序列. 通过排序不等式可以证明, 上述损失函数取到最小当且仅当

$$\mathbf{U}(\theta) \rho_k \mathbf{U}^\dagger(\theta) = |e_k\rangle\langle e_k|, \quad (15)$$

其中 $|e_k\rangle$ 为 $\mathbf{H}$ 第 k 小个本征值对应的本征向量, 即 $\mathbf{H}$ 的第 k 激发态. 因此, 当损失函数优化到最小时, 测量得到 $\text{Tr} [\mathbf{H} \mathbf{U}(\theta) \rho_k \mathbf{U}^\dagger(\theta)]$ 即为厄米特矩阵第 k 小个本征值, 亦即待求的基态或激发态能量.

3.1.2 变分量子态对角化

对混态的谱分解 (对角化) 有助于我们理解量子态的纠缠性质. 变分量子态对角化 (variational quantum state diagonalization, VQSD)^[44] 算法求解酉变 $\mathbf{U}$ 使得目标态 ρ 经过酉变后在计算基上对角化, 即 $\mathbf{U} \rho \mathbf{U}^\dagger = \sum_j c_j |j\rangle\langle j|$. 在 VQSD 中, 记 $\tilde{\rho} = \mathbf{U}(\theta) \rho \mathbf{U}^\dagger(\theta)$, 损失函数提供了两种设计:

$$C_1(\theta) = \|\tilde{\rho} - \mathcal{D}(\tilde{\rho})\|_F, \quad (16)$$

$$C_2(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \|\tilde{\rho} - \mathcal{D}_j(\tilde{\rho})\|_F, \quad (17)$$

其中 $\mathcal{D}$ 表示整个输入量子态上的 (完全) 去极化信道, $\mathcal{D}_j$ 表示仅对第 j 个量子比特作用的 (完全) 去极化信道. 显然 C_1 和 C_2 等于 0 当且仅当 $\tilde{\rho}$ 实现了对角化. 因此, 通过优化损失函数至 0 即可完成量子态的对角化. 同时, 文献 [44] 分别设计了两种电路用于计算两个损失函数. 文献 [44] 指出, 由于 C_1 拥有更简单的计算电路, 而 C_2 拥有更好的可训练性, 在实际训练中可以根据量子比特数对两种损失函数进行加权求和作为最终的损失函数.

值得一提的是, 由于哈密顿量和输入量子态在损失函数中具有对偶性, 3.1.1 节 SSVQE 中对正交量子态加权求和的技巧也可用于量子态对角化, 如文献 [20] 就基于该技巧实现了量子态的本征值求解.

3.1.3 变分量子奇异值分解

奇异值分解作为谱分解的扩展, 在数据压缩、

推荐系统等领域具有重要应用. 变分量子奇异值分解 (variational quantum singular value decomposition, VQSVD)^[45] 实现任意方阵 $\mathbf{M}$ 的奇异值分解. VQSVD 中, 损失函数定义为

$$C(\theta_1, \theta_2) = \sum_{k=1}^K \omega_k \times \text{Re} \langle k | \mathbf{U}^\dagger(\theta_1) \mathbf{M} \mathbf{V}(\theta_2) | k \rangle, \quad (18)$$

其中 $\{|k\rangle\}_{k=1}^K$ 是一组互相正交的纯态, ω_k 是严格单调减小的正实数序列. 文献 [45] 证明上述损失函数取到最大值当且仅当

$$\langle k | \mathbf{U}(\theta_1)^\dagger \mathbf{M} \mathbf{V}(\theta_2) | k \rangle = d_k, \quad \forall 1 \leq k \leq K, \quad (19)$$

其中 d_k 是 $\mathbf{M}$ 的第 k 大的奇异值. 因此, 通过最大化损失函数即可完成方阵的奇异值分解. 由于 $\mathbf{M}$ 可以分解为酉矩阵 (如泡利门) 的线性组合 $\mathbf{M} = \sum_j c_j \mathbf{P}_j$, 损失函数 $C = \sum_{k,j} \omega_k c_j \text{Re} \langle k | \mathbf{U}(\theta_1)^\dagger \times \mathbf{P}_j \mathbf{V}(\theta_2) | k \rangle$ 中求和各项均可经哈达玛测试得到, 因此 VQSVD 可在混合量子-经典算法框架下实现.

此外, 由于对两方纠缠态的施密特分解等价于纠缠态向量重排矩阵的奇异值分解, 文献 [46] 通过对优化两个局部参数化电路实现施密特分解. 本质上, 文献 [46] 和 VQSVD 相当于对待分解的矩阵采用了不同的编码方式: VQSVD 将矩阵分解为酉算符的线性组合, 而文献 [46] 相当于将矩阵重排为两方量子态对应的向量.

3.1.4 迹范数估计

厄米特矩阵 $\mathbf{H}$ 的迹范数 $\|\mathbf{H}\|_1$ 定义为矩阵的奇异值之和, 即 $\mathbf{H}$ 的本征值的绝对值之和. 迹范数被广泛应用于量子信息中, 如迹距离^[47]、纠缠负性^[48]等. 文献 [49] 通过在单比特辅助系统 R 上的测量估计厄米特矩阵的迹范数. 设 $\widetilde{\mathbf{H}}_{AR} = \mathbf{U}(\theta)_{AR} \mathbf{H}_A \otimes |0\rangle\langle 0|_R \mathbf{U}_{AR}^\dagger(\theta)$, 其中 $\mathbf{H}_A$ 是 A 系统上的厄米特矩阵, $|0\rangle\langle 0|_R$ 是 R 系统上的基向量, $\mathbf{U}(\theta)_{AR}$ 是作用在联合系统上的参数化电路. 文献 [49] 指出, $\widetilde{\mathbf{H}}_{AR}$ 满足:

$$\max_{\theta} \text{Tr}[\widetilde{\mathbf{H}}_R |0\rangle\langle 0|_R] - \min_{\theta} \text{Tr}[\widetilde{\mathbf{H}}_R |0\rangle\langle 0|_R] = \|\mathbf{H}\|_1, \quad (20)$$

此处 $\widetilde{\mathbf{H}}_R = \text{Tr}_A[\widetilde{\mathbf{H}}_{AR}]$. 进一步地, 由于 $\mathbf{H}$ 往往可以写成量子态的线性组合, (20) 式等号左边可以通过量子设备在辅助系统上测量得到. 因此, 可以通过两次优化迭代得到厄米特矩阵 $\mathbf{H}$ 的迹范数 $\|\mathbf{H}\|_1$.

3.2 距离估计

在量子设备上制备特定的量子态是一项重要的基本能力, 例如在变分量子本征求解器中任务的目标即可认为是制备一个量子系统的能量基态. 在制备量子态后, 离不开验证和刻画的过程. 在这之中就会涉及到量子态之间距离估计的函数. 这里主要讨论常用的两种距离估计函数^[47], 即迹距离 D

$$D(\rho, \sigma) = \frac{1}{2} \|\rho - \sigma\|_1, \quad (21)$$

以及态保真度 F

$$F(\rho, \sigma) = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho} \sigma \sqrt{\rho}}. \quad (22)$$

3.2.1 迹距离估计

由于对一般量子态间的迹距离的大小判断属于 QSZK-complete 复杂度类^[50], 而 QSZK (quantum statistic zero knowledge) 包括了 BQP (bounded-error quantum polynomial time) 复杂度类, 因此即使在量子计算机上迹距离的估计目前也不存在高效算法. 由于迹距离具有如下性质:

$$D(\rho, \sigma) = \max_{\mathbf{P}} \text{Tr}[\mathbf{P}(\rho - \sigma)], \quad (23)$$

其中 $\mathbf{P}$ 的优化范围是所有 POVM 元 (满足 $0 \leq \mathbf{P} \leq \mathbf{I}$ 的半正定矩阵), 文献 [49] 基于该性质, 并通过奈马克扩张定理引入一个辅助比特, 将 POVM 元的优化转化为酉矩阵上的优化, 证明迹距离满足

$$D(\rho, \sigma) = \max_{\mathbf{U}} \text{Tr}[|0\rangle\langle 0|_R \mathcal{U}_{A \rightarrow R}(\rho - \sigma)], \quad (24)$$

其中 $\mathcal{U}_{A \rightarrow R}(\mathbf{X}_A) = \text{Tr}_A[\mathbf{U}(\mathbf{X}_A \otimes |0\rangle\langle 0|_R) \mathbf{U}^\dagger]$. 因此, 通过最大化损失函数 $C = \text{Tr}[|0\rangle\langle 0|_R \mathcal{U}_{A \rightarrow R}(\rho - \sigma)]$ 即可得到 ρ, σ 间的迹距离估计. 值得一提的是, 在文献 [49] 中, (24) 式由 (20) 式令 $\mathbf{H} = 1/2(\rho - \sigma)$ 直接得到.

3.2.2 保真度估计

用经典方法计算保真度 F 需要先对量子态 ρ 和 σ 进行量子态层析来获取密度算符的矩阵表示, 然后在经典计算机上按照 (22) 式进行计算. 由于希尔伯特空间维度随着量子比特数呈指数增长, 这种方法通常认为是困难的. 随之而来的问题就是, 在量子设备上直接估算态保真度是否可行, 是否更高效. 这种思路下的主要问题在于保真度计算公式中涉及到对量子态的非整数幂的操作 $\sqrt{\rho}$, 没有已知的量子算法可以精确完成这一任务. 针对

这一问题, 文献 [20] 提出了一种混合量子-经典算法用于近似任意混合态 σ 和低秩态 ρ 之间保真度的方案 (variational quantum fidelity estimation, VQFE), 并给出对保真度估计的上下界. 其主要原理是通过对 ρ 对角化获取其在本征子空间上的谱信息然后计算 σ 在该基组表示下的矩阵元素从而得到对保真度的估计. 进一步地, 文献 [49] 基于乌尔曼定理 (Uhlmann's theorem) 给出了计算任意混合态之间保真度的方式. 通过纯化子程序, 先分别获得需要测量保真度的两个量子态 ρ_A 和 σ_A 的纯化态 $|\psi\rangle_{AR}$ 和 $|\phi\rangle_{AR}$. 然后通过纯化中辅助量子比特的自由度以及经典优化算法去最大化两个纯化态之间的态重叠, 即可获得对保真度的估计:

$$F(\rho_A, \sigma_A) = \max_{U_R} |\langle \psi|_{AR} (I_A \otimes U_R) |\phi\rangle_{AR}|, \quad (25)$$

其中 A 表示原始问题的空间, R 表示纯化子程序中引入的辅助量子比特的空间.

3.3 组合优化问题

组合优化问题是指从离散的可行解集合中找出最优的一个解, 如旅行商问题、最大割问题等著名的 NP 困难问题都属于组合优化问题. 这些问题都可以抽象为最小化 (或最大化) 一个目标函数 $D(x)$, 其中 x 为一组离散的二进制变量.

要在量子计算机上解决经典组合优化问题, 需要先把它转化成量子优化问题. 最直接的做法是将原问题的目标函数 $D(x)$ 编码为哈密顿量 H_D , 使得该哈密顿量的基态对应原优化问题的解 [51]. 这样, 组合优化问题就变成了求解哈密顿量基态的问题, 即找到一个量子态 $|\psi\rangle$ 使得

$$C(|\psi\rangle) = \text{Tr}[H_D |\psi\rangle\langle\psi|] \quad (26)$$

最小, 而这正是混合量子-经典算法擅长的. 根据 VQE 的思想, 可以利用参数化量子电路寻找态 $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)|s\rangle$, 其中量子态 $|s\rangle$ 为量子电路运行前的初始态, θ 为量子电路中可优化的参数.

量子近似优化算法 (quantum approximate optimization algorithm, QAOA) [13] 提供了一种设计参数化量子电路的思路, 该算法最初由 Farhi 等 [52] 提出, 专门用于解决组合优化问题. 与量子绝热算法 (quantum adiabatic algorithm, QAA) [52,53] 类似, QAOA 受到绝热定理的启发, 构造类似绝热演化的参数化量子电路来求解哈密顿量 H_D 的基态. 根据绝热定理, 如果一个系统的哈密顿量随

时间的演化由 $H(t) = (1 - t/T)H_B + tH_D/T$ 给出, 且初始时该系统处于哈密顿量 H_B 的基态, 那么通常经过足够长的演化时间 T , 系统最终会处于哈密顿量 H_D 的基态. 因此, 只需要准备一个基态易于制备的辅助哈密顿量 H_B , 将其基态作为初始量子态借助 Trotter 乘积式来近似演化哈密顿量 $H(t)$, 最终便能得到哈密顿量 H_D 的基态, 也即原组合优化问题的最优解. 这个演化过程可以近似为如下的参数化酉变:

$$|\psi(\gamma, \beta)\rangle = U_B(\beta_p)U_D(\gamma_p) \cdots U_B(\beta_1)U_D(\gamma_1)|s\rangle, \quad (27)$$

其中, $U_D(\gamma_j) = e^{-i\gamma_j H_D}$ 和 $U_B(\beta_j) = e^{-i\beta_j H_B}$ 分别是哈密顿量 H_D 与哈密顿量 H_B 对应的参数化酉变; γ, β 是可以优化的参数; p 则是参数化酉变的层数.

事实上, QAOA 的思想不仅可以解决组合优化问题, 由其推广得到的一类参数化量子电路, 即量子交替算符拟设电路, 可广泛应用于其他问题 [9].

3.4 量子机器学习

量子机器学习就是量子算法和机器学习的有机结合. 经典的神经网络分为两部分: 神经网络和优化器. 而量子机器学习, 就是把经典的神经网络换成量子的神经网络并由量子计算设备执行, 并且在经典设备上对量子神经网络的参数优化, 即使使用经典的优化器去优化量子神经网络. 通常情况下, 量子神经网络是由参数化量子电路表达的. 量子机器学习有望利用量子的并行运算的特性对经典的机器学习算法进行加速. 下面讨论几种较为常见的量子机器学习问题: 量子分类器 [31,39,41,54]、量子生成对抗网络 [55,56] 和量子自编码器 [57,58].

3.4.1 量子分类器

在机器学习中, 分类问题是极其重要的监督学习问题. 分类过程实质上是一个给数据贴标签的过程, 当输入数据满足某个条件的时候, 就给该数据贴上相应的标签, 从而完成分类. 分类问题通常会给定一个训练包含 N 个样本的数据集 $\{(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^N$, 其中 $x^{(k)}$ 是数据点, $y^{(k)}$ 是数据的标签. 该任务的目的是通过训练数据集训练神经网络, 使得该神经网络在遇到没有处理过的数据时能够做出正确的分类. 在量子分类器的框架下, 量子神经网络主要表达形式为参数化量子电路, Mitarai 等 [39] 以及 Farhi 和 Neven [41] 采用参数化量子电路的结

构分别完成了二分类任务和手写数字的分类任务.

通常情况下, 给定的数据集是经典的数据, 所以分类器第一步需要做的便是把经典数据编码成可在量子设备上可以执行的量子数据 (量子态), 即 $x^{(k)} \rightarrow |\psi\rangle^{(k)}$. 下一步需要把参数化量子电路 $U(\theta)$ 作用在编码后的量子态上, 由此得到 $U(\theta)|\psi\rangle^{(k)}$. 随后, 把损失函数定义为真实标签和某个可观测量 O 的期望值的距离, 即

$$C(\theta) = \sum_k \left(y^{(k)} - \langle \psi |^{(k)} U^\dagger(\theta) O U(\theta) | \psi \rangle^{(k)} \right)^2. \quad (28)$$

使用经典优化器对损失函数进行优化, 通过不断调整参数化量子电路中的参数, 使得损失函数收敛至最小值. 值得注意的是, 编码方法以及量子神经网络结构并不唯一. 合理的编码方式和神经网络能够提高分类器的运行速度和预测准确性, 因此, 针对不同的问题, 应比较并选用更优的编码方式. 目前常用的编码方式^[59,60]包括基态编码、振幅编码、角度编码和 IQP 编码. 关于神经网络表达能力将在 4.2 节详细讨论.

值得一提的是, 文献^[31]提出了影子量子学习方法, 利用作用在局部量子比特上的影子电路实现多分类任务. 数值实验结果表明, 相比于已有的量子分类算法, 该算法具有更强大的分类能力, 同时大幅减少了网络参数, 降低了训练代价. 此外, 量子核方法^[59,61–63]也是实现量子分类器的可行方案. 和经典核方法一样, 量子核方法也是先通过特征映射把原始数据映射到特征空间里, 然后寻找超平面把数据分类. 从理论上来说, 相较于经典的核方法, 量子核方法在处理分类问题时有平方级的加速效果^[64].

MNIST 作为常用的数据集, 常常在分类任务中作为基础测试的数据集. Wang 等^[65]在光量子平台上实现了对 MNIST 数据集中的手写“0”和“1”进行分类, 三层结构的分辨准确率达 98.58%, 五层结构的分辨准确率达 99.10%. 在影子量子学习方法中, 本课题组使用 35 个参数使得 MNIST 的二分类任务准确率达到 99.52%. 而在 MNIST 十分类任务中, 在使用 928 个参数的情况下, 准确率达到 87.39%^[31].

3.4.2 量子生成对抗网络

生成对抗网络 (generative adversarial network, GAN)^[66]在经典学习中扮演着重要的角色. GAN 通常由生成器和判别器两部分组成, 其中生

成器接受随机的噪声信号, 以此为输入来生成期望得到的数据; 判别器判断接收到的数据是不是来自真实数据, 通常输出一个 $P(x)$, 表示输入数据 x 是真实数据的概率.

量子生成对抗网络^[55,56,67](quantum generative adversarial network, QGAN) 的目的是利用量子计算设备加速经典生成对抗网络的训练. 相比于 GAN, QGAN 生成的是量子态, 而不再是经典数据. 在 QGAN 的框架下, 生成器 G 和判别器 D 分别对应着两个参数化量子电路 U_G 和 U_D . 生成器的目标是 최소화损失函数, 从而达到生成的数据以假乱真的效果; 判别器的目标是最大化损失函数, 要尽可能地分辨出哪些是真实数据, 哪些是生成器生成的数据. 可以把训练过程视为博弈的过程, 训练的结果会使得生成器和判别器达到纳什均衡点, 即生成器具备了生成真实数据的能力, 而判别器也无法再区分生成数据和真实数据. 一般情况下, 量子对抗生成网络的优化函数都可以写成以下形式:

$$\min_G \max_D C(G, D), \quad (29)$$

其中 C 根据任务的不同而相应变化. 值得注意的是, 实际过程中, 通常采用交替训练的方式, 即先固定 G , 训练 D , 然后再固定 D , 训练 G , 不断往复. 当两者的性能足够时, 模型会收敛, 两者达到纳什均衡.

QGAN 由经典的 GAN 发展而来, 所以 QGAN 也继承了经典 GAN 的不足, 比如训练不稳定、训练效果局限于网络框架等. 在经典领域, WGAN (Wasserstein GAN)^[68]解决了 GAN 的缺陷. 相应地, 在量子领域, QWGAN (quantum Wasserstein GAN)^[69]的提出也提升了 QGAN 效果. 如今, 量子对抗生成网络的方法已经被应用到各种任务上, 比如概率分布的学习^[70–72]、量子态的学习^[56,73]、量子电路的学习^[69]以及纠缠的探测^[74].

3.4.3 量子自编码器

量子自编码器和经典自编码器一样, 都是由编码器和解码器组成, 是用于压缩数据, 进行特征降维的一种算法. 在量子自编码器中, 输入的数据为复合量子系统 AB 的量子态 ρ_{AB} . 将编码器 $E = U(\theta)$ (即参数化量子电路) 作用在量子态上, 得到 $U(\theta)\rho_{AB}U^\dagger(\theta)$. 该步骤将量子系统 AB 的信息编码到量子系统 A 上. 对于量子系统 B , 只需要对他们进行测量并丢弃即可, 即 $\tilde{\rho}_A = \text{Tr}_B(U(\theta)\rho_{AB})$.

$U^\dagger(\theta)$). 至此, 已经完成了信息的压缩. 在进行解码时, 需要引入与系统 B 维度相同的系统 C , 并且固定其量子态 ρ_C . 随后将解码器 $D = U^\dagger(\theta)$ 作用在整个量子系统 $A + C$ 上, 得到还原后的量子态 $\tilde{\rho}_{AC} = U^\dagger(\theta)[\rho_C \otimes \text{Tr}_B(U(\theta) \rho_{AB} U^\dagger(\theta))]U(\theta)$ [57].

在量子自编码器中, 损失函数一般有两种定义方法:

1) 由于量子自编码的任务是对数据进行编码并解码, 希望输出的量子态 ρ_{out} 和输入的量子态 ρ_{in} 尽可能地相似, 所以损失函数定义为两个量子态之间的保真度 F , 即

$$C = F(\rho_{AB}, \tilde{\rho}_{AC}) = \text{Tr} \left(\sqrt{\sqrt{\rho_{\text{in}}} \rho_{\text{out}} \sqrt{\rho_{\text{in}}}} \right)^2. \quad (30)$$

2) 在还原被压缩信息的时候, 需要引入另一个固定的纯态量子系统 C , 与系统 A 进行耦合. 相对应地, 压缩过程可以理解量子系统 A 和量子系统 B 解耦的过程, 由此可以定义损失函数为压缩后的量子系统 $\tilde{\rho}_B$ 和引入的量子系统 ρ_C 之间的保真度, 即

$$C = F(\tilde{\rho}_B, \rho_C). \quad (31)$$

值得注意的是, 待编码的量子态所包含的纠缠资源量在一定程度上决定了量子自编码器的效果. 简单地说, 如果量子态 ρ_{AB} 含有的量子资源超过了量子系统 A 所能容纳的上限, 那么量子自编码器必然会导致信息的损失. 文献 [58] 设计了一种可以在量子退火机上运行的绝热算法进行量子信息的压缩. 和其他的量子自编码器相比, 该算法充分利用了测量所得到的信息, 在一定程度上解决了信息损失的问题.

3.5 量子纠错

量子纠错 [75–77] 可表示为如下过程: 1) 编码信道 $\mathcal{U}$ 将 k 个逻辑量子比特的量子态 $|\psi\rangle$ 编码到 n 个物理量子比特, 得到逻辑量子态 $|\psi\rangle_L$; 2) 逻辑量子态 $|\psi\rangle_L$ 经过噪声信道 $\mathcal{N}$, 该噪声信道由具体硬件设备决定; 3) 纠错信道 $\mathcal{W}$ 尝试纠正噪声对逻辑量子态的影响, 该信道使用辅助量子比特探测并纠正错误; 4) 解码信道 $\mathcal{U}^\dagger$ (编码信道 $\mathcal{U}$ 的逆) 从物理比特解码还原量子态. 整个过程如图 4 所示. 编码信道 $\mathcal{U}$ 和纠错信道 $\mathcal{W}$ 决定该纠错方案的性能: 复合信道 $\mathcal{U}^\dagger \circ \mathcal{W} \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{U}$ 和理想无噪信道越接近, 纠错效果越好. 然而设计高效的纠错方案是极具挑战性的任

务. 近年来, 研究人员尝试利用经典机器学习技术提高量子纠错效率 [78–88], 这类工作属于典型的混合量子-经典算法. 使用混合量子-经典算法实现量子纠错的优势在于构造参数化电路时可以综合考虑硬件设备的特点, 比如所支持的量子门类型以及拓扑结构等, 设计出更高效的硬件相关的纠错方案. 下面介绍两个具有代表性的探索工作.

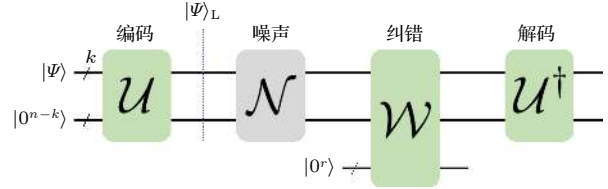


图 4 量子纠错基本框架: 量子态 $|\psi\rangle$ 使用编码信道 $\mathcal{U}$ 编码, 经过噪声信道 $\mathcal{N}$ 后使用纠错信道 $\mathcal{W}$ 纠正错误, 最后使用解码信道 $\mathcal{U}^\dagger$ 解码, 还原输入量子态

Fig. 4. Framework of quantum error correction. The quantum state $|\psi\rangle$ first is encoded by the encoding channel $\mathcal{U}$, then passes the noise channel $\mathcal{N}$, and then is corrected by the correction channel $\mathcal{W}$, finally is recovered by the decoding channel $\mathcal{U}^\dagger$.

文献 [78] 提出量子变分纠错算法 QVECTOR (variational quantum error corrector). 该方法的基本思路是将如图 4 所示的编码信道 $\mathcal{U}$ 和纠错信道 $\mathcal{W}$ 表示为参数化量子电路 $\mathcal{U}(\cdot) = \mathcal{U}(\theta_1)(\cdot)$ $\mathcal{U}^\dagger(\theta_1)$ 和 $\mathcal{W}(\cdot) = \mathcal{W}(\theta_2)(\cdot) \mathcal{W}^\dagger(\theta_2)$. 我们期望复合信道 $\mathcal{U}^\dagger(\theta_1) \mathcal{W}(\theta_2) \mathcal{N} \mathcal{U}(\theta_1)$ 等效或者逼近理想无噪信道, 因此定义如下形式的平均保真度作为损失函数:

$$F(\theta_1, \theta_2) := \int_{\psi} d\mu(\psi) \langle \psi | \mathcal{U}^\dagger(\theta_1) \cdot \mathcal{W}(\theta_2) \cdot \mathcal{N} \cdot \mathcal{U}(\theta_1) (|\psi\rangle\langle\psi|) |\psi\rangle, \quad (32)$$

其中 $\mu(\psi)$ 表示哈尔测度. 直观上而言, 该损失函数刻画了上述纠错方案在输入量子态上的平均表现行为. 当 $F(\theta_1, \theta_2) = 1$ 时, 对应的参数化量子电路 $\mathcal{U}(\theta_1)$ 和 $\mathcal{W}(\theta_2)$ 实现了对噪声信道 $\mathcal{N}$ 的完全纠错. 可采用更高效的酉 2-设计 [89] 或近似酉 2-设计 [90] 进行随机采样量子态来估计损失函数 (32) 式. 实验数据表明, 相对五比特量子纠错码 [91,92], QVECTOR 算法在处理特定噪声时有更好的效果.

由图 4 可知, 设计合适的编码信道 $\mathcal{U}$ 精确地制备逻辑量子态 $|\psi\rangle_L$ 是量子纠错中的关键任务. 文献 [79] 提出使用混合量子-经典算法制备 $|\psi\rangle_L$, 其核心思想是分析 $|\psi\rangle_L$ 的数学性质将之编码为某个

哈密顿量 H 的基态本征向量, 调用变分量子本征求解器求解 H 的基态能量和本征向量, 对应的参数化量子电路即为编码信道. 该方法的关键步骤是构造哈密顿量 H . 下面以稳定子码^[93]为例给出 H 的构造方法. 假设 S 为某单量子比特纠错码的稳定子码且其稳定子为 $S = \langle g_1, \dots, g_K \rangle$. 著名的例子包括五比特量子纠错码^[91,92]、Steane 纠错码^[94]和 Shor 纠错码^[95]. 由稳定子码定义可知, 对任意 $k = 1, \dots, K$ 均有 $g_k |\psi\rangle_L = |\psi\rangle_L$. 令 $|\psi^\perp\rangle_L$ 表示 $|\psi\rangle_L$ 的正交态, 定义算符 $O_L := |\psi\rangle_L \langle \psi|_L - |\psi^\perp\rangle_L \langle \psi^\perp|_L$, 易见 $O_L |\psi\rangle_L = |\psi\rangle_L$. 算符 O_L 编码逻辑量子态 $|\psi\rangle_L$ 的系数信息. 定义哈密顿量

$$H := -\sum_{k=1}^K c_k g_k - c_o O_L, \quad (33)$$

其中 $c_k, c_o > 0$. 由定义可验证 $|\psi\rangle_L$ 是 H 的基态本征向量, 对应基态能量 $E_0 = -\left(c_o + \sum_{k=1}^K c_k\right)$. 以五比特量子纠错码和 Steane 纠错码为例, 针对不同硬件设备上述方法均能给出量子门数量更少的逻辑量子态制备电路.

3.6 其他应用

本节介绍 3 种不直接属于上述分类但具有代表性的混合量子-经典算法. 选择这些算法的原因在于它们使用的技巧具有一定代表性和启发性.

3.6.1 量子线性求解器

变分量子线性求解器 (variational quantum linear solver, VQLS)^[96–98] 实现线性方程组 $Ax = b$ 的求解. 不失一般性, 假设 b 是归一化的. VQLS 首先将矩阵 A 分解为酉矩阵的线性组合 $A = \sum_j c_j A_j$, 随后根据归一化向量 b 制备对应的量子态 $|b\rangle$, 并将 $|0\rangle$ 态输入参数化电路得到 $|x\rangle = U(\theta) |0\rangle$, 然后最小化损失函数:

$$\begin{aligned} C(\theta) &= 1 - \frac{\text{Tr} [|b\rangle \langle b| A |x\rangle \langle x| A^\dagger]}{\text{Tr} [A |x\rangle \langle x| A^\dagger]} \\ &= 1 - \frac{\langle b | A |x\rangle \langle x | A^\dagger | b \rangle}{\langle x | A^\dagger A | x \rangle} \\ &= 1 - \frac{\sum_{j,k} c_j c_k^* \langle b | A_j | x \rangle \langle x | A_k^\dagger | b \rangle}{\sum_{j,k} c_j c_k^* \langle x | A_j^\dagger A_k | x \rangle}, \quad (34) \end{aligned}$$

可见, 将 $A = \sum_j c_j A_j$ 代入损失函数后, 损失函数中求和各项可通过哈达玛测试计算. 显然, 当损失

函数优化至 $C = 0$ 时, 有 $A |x^{\text{opt}}\rangle \propto |b\rangle$, 此时计算 $|x^{\text{opt}}\rangle / |A |x^{\text{opt}}\rangle|$ 即完成线性方程组的求解.

3.6.2 纠缠检测

变分纠缠检测 (variational entanglement detection, VED)^[99] 利用了转置映射的准概率分解^[100]. 对于密度矩阵 $\rho = \sum \rho_{jk} |j\rangle \langle k|$, 转置映射 T 将其映射为 $T(\rho) = \sum \rho_{jk} |k\rangle \langle j|$. 对于两方量子态 ρ_{AB} , 量子纠缠存在的一个充分条件是 ρ_{AB} 在 B 系统上部分转置后的最小本征值小于 0, 这种方法被称为 PPT 准则 (positive partial transpose criterion)^[101]. 据此, VED 通过估计 ρ_{AB} 部分转置后的最小本征值检测两方纠缠. 由于转置映射不是完全正的, 不能在物理设备上直接实现, 文献^[99] 将转置映射分解为泡利门的线性组合, 随后基于准概率分解对电路进行随机采样得到相应损失函数的无偏估计. 文献^[99] 同样给出了其他纠缠判定条件对应映射的泡利门分解.

3.6.3 吉布斯态制备

吉布斯态是量子模拟、多体物理研究等诸多领域的关键步骤. 给定哈密顿量 H , 其对应的吉布斯态表示为

$$\rho_G = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}, \quad (35)$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$. 由于吉布斯态使得系统自由能最小:

$$\rho_G = \text{argmin}_\rho F(\rho) = \text{argmin}_\rho \{\text{Tr}[H\rho] - \beta^{-1} S(\rho)\}, \quad (36)$$

其中 S 为量子态 ρ 的冯诺依曼熵 $S(\rho) = -\text{Tr}[\rho \log \rho]$, 基于该性质可以设计混合量子-经典算法, 通过最小化自由能制备吉布斯态. 对于量子态的自由能在量子设备上的估计, 文献^[102, 45] 分别提供两种方法: 文献^[102] 将冯诺依曼熵中的对数运算展开成三角级数并截断, 随后设计电路估计自由能; 而文献^[45] 直接将冯诺依曼熵展开成泰勒级数并截断, 随后利用交换测试计算态重叠和高阶态重叠 (即 $\text{Tr}[\rho^2]$ 和 $\text{Tr}[\rho^3]$), 从而估计自由能.

3.6.4 虚时演化

虚时演化^[103] 是研究量子系统的工具, 被广泛应用在许多物理领域, 包括量子力学、统计力学和宇宙学. 在实时演化中, 一个哈密顿量为 H 的量子

系统的传播函数为 e^{-iHt} . 在虚时演化中, 由于时间 $\tau = it$ 为虚数, 该系统的传播函数为 $e^{-H\tau}$. 显然, 演化的时间越长, 系统的能量也就越低, 最终会稳定在系统的基态能量 E_0 , 即 $\tau \rightarrow \infty$, $E_{\text{sys}} \rightarrow E_0$. 因此, 虚时演化算法可用于求解子系统的基态. 由于虚时演化过程是数学的而非物理的, 如何模拟演化过程是虚时演化算法的关键.

基于虚时演化的特殊性质, 文献 [104, 105] 提出了使用变分量子电路对虚时演化进行模拟, 并计算化学系统的基态能量. 首先, 需要制备一个追踪态 $|\psi(\theta(\tau))\rangle = V(\theta(\tau))|0\rangle$, 其中, $V(\theta(\tau)) = U_N(\theta_N) \cdots U_k(\theta_k) \cdots U_1(\theta_1)$ 代表着一系列酉门, 这里可以把 $V(\theta(\tau))$ 当作参数化量子电路. 当 $\tau = 0$ 时, 代表着量子系统的初始态. 随后, 对 $V(\theta(\tau))$ 的各个参数进行更新

$$\theta(\tau + \delta\tau) \approx \theta(\tau) + \dot{\theta}(\tau)\delta\tau, \quad (37)$$

其中 $\dot{\theta}(\tau)$ 是量子电路的自然梯度. 随后通过迭代 $N_T = \tau_{\text{total}}/\delta\tau$ 次, 来模拟虚时从 $\tau = 0 \rightarrow \tau = \tau_{\text{total}}$ 的演化过程. 当模拟的时间足够长时, 便能够得到系统哈密顿量 H 的期望值的最小值, 即

$$E_0 = \min_{\theta} \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle. \quad (38)$$

4 挑 战

尽管混合量子-经典算法已经在理论和实践上被证明在求解特定问题时具有高效的表现, 该领域仍然存在若干开放性问题与挑战. 本节主要介绍 3 种对混合量子-经典算法效果的制约因素和潜在的解决思路, 分别为噪声影响、电路表达能力以及可训练性.

4.1 噪声影响

作为一类 NISQ 算法, 噪声对混合量子-经典算法的影响值得深入研究. 大体上, 量子噪声可以分为相干噪声和非相干噪声. 相干噪声的产生可能是由于硬件校准的精度, 导致在执行一个量子门 $U(\theta)$ 时实际执行的是 $U(\theta + \delta)$. 通常来说, 相干噪声对于经典优化方法来说并不构成很大的影响, 特别是 SPSA 这种本身就会对参数产生随机扰动的优化方法. 量子设备的非相干噪声往往会对损失函数的整体景观产生影响, 使其变得平坦或改变最优的位置, 如图 5 所示. 文献 [106] 和文献 [107] 分别

从数值和理论上研究了泡利噪声对 QAOA 算法的影响, 并指出 QAOA 算法对低强度泡利噪声具有一定抗性; 文献 [108] 进一步探究了 QAOA 算法的误差上界与噪声和量子 Fisher 信息相关; 文献 [109] 指出泡利噪声直接导致混合量子-经典算法的梯度消失问题; 文献 [110] 表明, 在一部分计算任务中 (如变分量子编译), 尽管噪声使得损失函数整体变得平坦, 但不会影响最优参数的取值, 因此不影响算法最终结果的正确性; 文献 [111] 表明噪声会破坏参数空间的对称性, 导致部分全局最优解变为局部最优, 从而增加优化难度; 文献 [112] 对比了有噪声条件下混合量子-经典算法和经典算法的复杂度, 证明了在大噪声条件下混合量子-经典算法相比于经典算法不再具有优势.

4.2 电路表达能力

2.2 节曾提到, 在参数化量子电路的模型设计中, 为使参数空间能够对应尽可能多的酉变, 从而使优化过程覆盖尽可能大的解空间. 参数化量子电路的表达能力可直观地理解为电路取遍所有参数时能表达的酉变范围的大小. 一般来说, 更深的电路具有更强的表达能力, 但电路深度同时会带来更严重的噪声和可训练性问题. 因此, 如何权衡电路深度与表达能力, 以及如何设计表达能力更强的电路模型是混合量子-经典算法面临的一项重要挑战.

目前, 一种电路表达能力定义基于电路输出量子态的平均高阶张量积和对应哈尔积分之间的 Frobenius 距离. 由于该距离与电路输出量子态对间的保真度分布直接相关, 最终采用参数化电路与哈尔分布输出的保真度分布之间的 K-L 散度对电路 $U(\theta)$ 表达能力进行量化:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(U) &= D_{\text{KL}}(P(U, F) \| P_{\text{Haar}}(F)) \\ &= \int_0^1 P(U, F) \log \frac{P(U, F)}{P_{\text{Haar}}(F)} dF, \end{aligned} \quad (39)$$

其中 $D_{\text{KL}}(A \| B)$ 表示概率分布 A, B 之间的 K-L 散度; $P(U, F)$ 表示电路 U 在输入 $|0\rangle$ 且参数 θ 成随机均匀分布时, 随机输出的一对量子态间的保真度的概率分布; $P_{\text{Haar}}(F)$ 表示一对满足哈尔分布的随机量子态间的保真度的概率分布且有解析表示: $P_{\text{Haar}}(F) = (d-1)(1-F)^{d-2}$; d 是系统希尔伯特空间的维度. 由于 $P(U, F)$ 可以通过对电路参数采样后测量估计, 表达能力因此可以在近期设备上有效

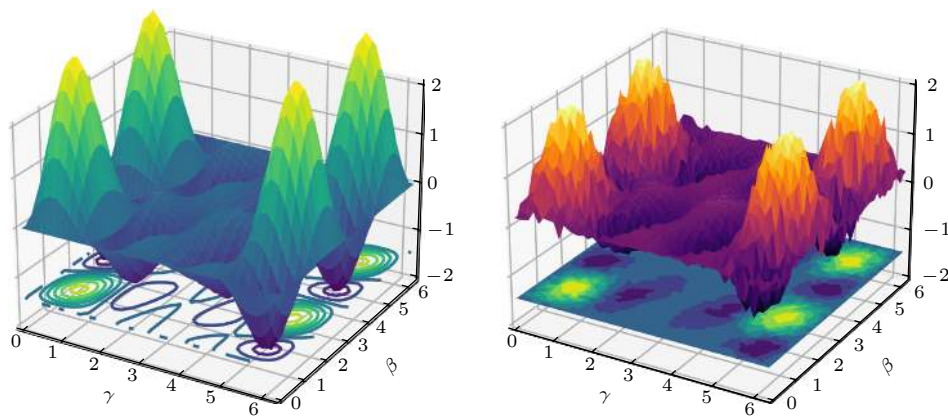


图 5 无噪(左)与有噪(右)条件下损失函数景观对比

Fig. 5. Comparison between noise-free (left) and noisy (right) cost function landscape.

计算. 文献 [25] 首先定义并计算了若干常用参数化电路模型的表达能力; 文献 [113] 进一步比较了常见的硬件高效拟设与交错分层拟设的表达能力, 指出后者相较于前者, 在提供更强的可训练性的同时保留了几乎相当的表达能力. 文献 [114] 从理论角度证明了损失函数的梯度方差的上界与电路表达能力有关.

值得一提的是, 文献 [25] 基于梅尔-沃勒克度量定义了电路的纠缠能力, 即电路平均能提供多少纠缠. 电路纠缠能力在一些量子态制备任务中起到关键作用.

4.3 可训练性

目前混合量子-经典算法的可训练性主要指的是由贫瘠高原现象对优化过程造成的困难. 贫瘠高原 (barren plateau) 现象 [115] 最早于 2018 年被提出, 当混合量子-经典算法所选取的非结构化的拟设电路 $U(\theta)$ 进行随机参数初始化时, 算法对应损失函数 $C(\theta)$ 的梯度方差在采样的平均意义下 $\text{Var}\left[\frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_k}\right]$ 会随着问题规模 n 的扩大呈现指数递减. 直观来看, 这种现象会使得问题的优化曲面变得非常平坦 (故称贫瘠), 从而使得为了达到确定优化方向的计算精度所需的测量数变得非常巨大 (如果无法达到测量精度要求, 电路的优化过程可能会接近于随机游走), 最终导致基于梯度或者非梯度的优化方法 [116] 都很难找到全局最小值. 产生这种现象背后的数学原因在于非结构化的电路在随机初始化参数时满足酉 2-设计的性质 [117]. 相关证明和避免贫瘠高原现象的理论研究也是围绕这个核心性质展开的. 值得注意的是, 文献 [115] 中的结

果部分表明了 4.2 节中提到的电路表达能力和可训练性之间的权衡关系. 当电路的深度增加时相应的表达能力增强, 但同时梯度的方差 (可训练性) 也会逐渐减小.

近些年, 随着对混合量子-经典算法的深入研究, 相应的可训练性解决方案也在陆续提出. 针对贫瘠高原现象, 文献 [118] 提出了一种初始化参数 θ 的方案. 其核心思想在于通过先选取部分参数随机初始化, 然后特定剩下的参数使得整个电路由一系列的单位阵构成. 这样可以减少电路中的随机性从而破坏酉设计的性质获取可训练性. 文献 [119] 进一步提出了分层训练的方案, 即使用若干初始层训练然后依次添加电路结构和层数. 除了上述通过设计初始化训练方案, 基于特定问题启发设计的电路结构 [9,120] 通常认为对于大规模的问题依然是可以训练的. 此外, 3.1.2 节提到的通过重新设计损失函数将其表达为局部损失函数的形式 (只同时测量部分量子比特) [21] 也被证明可以有效应对可训练性问题. 然而很多算法的损失函数是否存在这样的表达形式依然未定. 最后, 有研究表明噪声 [109] 和过度的纠缠能力 [121] 也会造成类似现象并阻碍训练过程. 可以说, 可训练性问题至今依然是混合量子-经典算法长远发展的一大挑战.

5 总结与展望

本综述介绍了混合量子-经典算法的基本概念, 此类算法在量子化学、机器学习、组合优化、量子信息等领域的研究进展以及算法目前面临的主要挑战. 一方面, 可以看到混合量子-经典算法已为许

多领域问题提供了有效且具备潜在优势的解决方案,同时可以结合优化理论和机器学习中的现有技术,尽可能在近期量子设备上发挥量子计算的能力,推动量子计算与机器学习的融合创新.另一方面,我们也认识到混合量子-经典算法作为一个相对“年轻”的研究方向存在若干瓶颈,包括对电路表达能力的理论分析工具不够完善,对算法规模的可扩展性有限,大部分算法的量子优势缺乏严格的理论和实验证明等.如何克服这些混合量子-经典算法的瓶颈以及探索其在更多领域的应用,将是混合量子-经典算法未来重要的发展方向.此外,张量网络作为连接经典与量子计算的数学模型,已经从理论^[122,123]和应用^[124,125]层面启发了机器学习领域的许多研究方向.因此,这一工具在近期量子设备上的探索同样值得关注.随着量子硬件能力的不断提升与混合量子-经典算法技术的不断发展,相信具有量子优势的近期量子设备实用化应用将有望实现.

参考文献

- [1] Shor P W 1994 *FOCS: 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* Santa Fe, New Mexico, USA, November 20–22, 1994 pp124–134
- [2] Grover L K 1996 *STOC: 28th Annual ACM Symposium on Theory of Computing* Philadelphia, Pennsylvania, USA, May 22–24, 1996 pp212–219
- [3] Lloyd S 1996 *Science* **273** 1073
- [4] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. 2019 *Nature* **574** 505
- [5] Allen S, Kim J, Moehring D L, Monroe C R 2017 *ICRC: IEEE International Conference on Rebooting Computing* Washington DC, USA, November 8–9, 2017 pp1–3
- [6] Zhong H S, Wang H, Deng Y H, et al. 2020 *Science* **370** 1460
- [7] Gong M, Wang S, Zha C, et al. 2021 arXiv: 2102.02573 [quant-ph]
- [8] Preskill J 2018 *Quantum* **2** 79
- [9] Hadfield S, Wang Z, O’Gorman B, Rieffel E G, Venturelli D, Biswas R 2019 *Algorithms* **12** 34
- [10] Peruzzo A, McClean J, Shadbolt P, Yung M H, Zhou X Q, Love P J, Aspuru-Guzik A, O’Brien J L 2014 *Nat. Commun.* **5** 1
- [11] Benedetti M, Lloyd E, Sack S, Fiorentini M 2019 *Quantum Sci. Technol.* **4** 043001
- [12] Zeng J, Wu Y, Liu J G, Wang L, Hu J 2019 *Phys. Rev. A* **99** 052306
- [13] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S 2014 arXiv: 1411.4028 [quant-ph]
- [14] Liu J G, Zhang Y H, Wan Y, Wang L 2019 *Phys. Rev. Res.* **1** 023025
- [15] 2020 Paddle Quantum URL <https://github.com/PaddlePaddle/Quantum>
- [16] Bergholm V, Izaac J, Schuld M, et al. 2018 arXiv: 1811.04968 [quant-ph]
- [17] Broughton M, Verdon G, McCourt T, et al. 2020 arXiv: 2003.02989 [quant-ph]
- [18] <https://github.com/paddlepaddle/paddle>
- [19] Ma Y, Yu D, Wu T, Wang H 2019 *Front. Data Comput.* **1** 105
- [20] Cerezo M, Sharma K, Arrasmith A, Coles P J 2020 arXiv: 2004.01372 [quant-ph]
- [21] Cerezo M, Sone A, Volkoff T, Cincio L, Coles P J 2021 *Nat. Commun.* **12** 1791
- [22] Buhrman H, Cleve R, Watrous J, de Wolf R 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 167902
- [23] Garcia-Escartin J C, Chamorro-Posada P 2013 *Phys. Rev. A* **87** 052330
- [24] Aharonov D, Jones V, Landau Z 2009 *Algorithmica* **55** 395
- [25] Sim S, Johnson P D, Aspuru-Guzik A 2019 *Adv. Quantum Technol.* **2** 1900070
- [26] Beer K, Bondarenko D, Farrelly T, Osborne T J, Salzmann R, Scheiermann D, Wolf R 2020 *Nat. Commun.* **11** 1
- [27] Sharma K, Cerezo M, Cincio L, Coles P J 2020 arXiv: 2005.12458 [quant-ph]
- [28] Oh S, Choi J, Kim J 2020 *ICTC: International Conference on Information and Communication Technology Convergence Jeju Island, Korea, October 18–20, 2017* pp236–239
- [29] Zhang K, Hsieh M H, Liu L, Tao D 2020 arXiv: 2011.06258 [quant-ph]
- [30] Pesah A, Cerezo M, Wang S, Volkoff T, Sornborger A T, Coles P J 2020 arXiv: 2011.02966 [quant-ph]
- [31] Li G, Song Z, Wang X 2020 arXiv: 2012.08288 [quant-ph]
- [32] Huang H Y, Kueng R, Preskill J 2020 *Nat. Phys.* **16** 1050
- [33] Pan F, Zhang P 2021 arXiv: 2103.03074 [quant-ph]
- [34] Nocedal J, Wright S 2006 *Numerical Optimization* (New York: Springer Science & Business Media)
- [35] Stokes J, Izaac J, Killoran N, Carleo G 2020 *Quantum* **4** 269
- [36] Nakanishi K M, Fujii K, Todo S 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 043158
- [37] Ostaszewski M, Grant E, Benedetti M 2021 *Quantum* **5** 391
- [38] Parrish R M, Iosue J T, Ozaeta A, McMahon P L 2019 arXiv: 1904.03206 [quant-ph]
- [39] Mitarai K, Negoro M, Kitagawa M, Fujii K S 2018 *Phys. Rev. A* **98** 032309
- [40] Schuld M, Bergholm V, Gogolin C, Izaac J, Killoran N 2019 *Phys. Rev. A* **99** 032331
- [41] Farhi E, Neven H 2018 arXiv: 1802.06002 [quant-ph]
- [42] Wang Y, Li G, Wang X 2021 arXiv: 2103.01061 [quant-ph]
- [43] Nakanishi K M, Mitarai K, Fujii K 2019 *Phys. Rev. Res.* **1** 033062
- [44] LaRose R, Tikku A, O’Neel-Judy É, Cincio L, Coles P J 2019 *npj Quantum Inf.* **5** 8
- [45] Wang Y, Li G, Wang X 2020 arXiv: 2005.08797 [quant-ph]
- [46] Bravo-Prieto C, García-Martín D, Latorre J I 2020 *Phys. Rev. A* **101** 062310
- [47] Nielsen M A, Chuang I L 2010 *Quantum Computation and Quantum Information* (10th Anniversary Edition) (Cambridge: Cambridge University Press)
- [48] Życzkowski K, Horodecki P, Sanpera A, Lewenstein M 1998 *Phys. Rev. A* **58** 883
- [49] Chen R, Song Z, Zhao X, Wang X 2020 arXiv: 2012.05768 [quant-ph]
- [50] Watrous J 2008 arXiv: 0804.3401 [quant-ph]
- [51] Lucas A 2014 *Front. Phys.* **2** 5
- [52] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S, Sipser M 2000 arXiv: quant-ph/0001106
- [53] Bauer B, Wang L, Pižorn I, Troyer M 2015 arXiv:

- 1501.06914 [cond-mat.dis-nn]
- [54] Schuld M, Bocharov A, Svore K M, Wiebe N 2020 *Phys. Rev. A* **101** 032308
- [55] Lloyd S, Weedbrook C 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 040502
- [56] Benedetti M, Grant E, Wossnig L, Severini S 2019 *New J. Phys.* **21** 043023
- [57] Romero J, Olson J P, Aspuru-Guzik A 2017 *Quantum Sci. Technol.* **2** 045001
- [58] Cao C, Wang X 2021 arXiv: 2012.08331 [quant-ph]
- [59] Schuld M 2021 arXiv: 2101.11020 [quant-ph]
- [60] Havlíček V, Córcoles A D, Temme K, Harrow A W, Kandala A, Chow J M, Gambetta J M 2019 *Nature* **567** 209
- [61] Schuld M, Killoran N 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 040504
- [62] Blank C, Park D K, Rhee J K K, Petruccione F 2020 *npj Quantum Inf.* **6** 1
- [63] Schuld M, Fingerhuth M, Petruccione F 2017 *EPL* **119** 60002
- [64] Li T, Chakrabarti S, Wu X 2019 *ICML: International Conference on Machine Learning* Long Beach, USA, June 9–15, 2019 pp3815–3824
- [65] Wang K, Xiao L, Yi W, Ran S J, Xue P 2020 arXiv: 2003.08551 [quant-ph]
- [66] Goodfellow I J, Pouget-Abadie J, Mirza M, et al. 2014 arXiv: 1406.2661 [stat.ML]
- [67] Situ H, He Z, Wang Y, Li L, Zheng S 2020 *Inf. Sci.* **538** 193
- [68] Arjovsky M, Chintala S, Bottou L 2017 *ICML: International Conference on Machine Learning* Sydney, Australia, August 6–11, 2017 pp214–223
- [69] Chakrabarti S, Huang Y, Li T, Feizi S, Wu X 2019 arXiv: 1911.00111 [quant-ph]
- [70] Romero J, Aspuru-Guzik A 2021 *Adv. Quantum Technol.* **4** 2000003
- [71] Zeng J, Wu Y, Liu J G, Wang L, Hu J 2019 *Phys. Rev. A* **99** 052306
- [72] Zoufal C, Lucchi A, Woerner S 2019 *npj Quantum Inf.* **5** 103
- [73] Hu L, Wu S H, Cai W, et al. 2019 *Sci. Adv.* **5** eaav2761
- [74] Du Y, Hsieh M H, Tao D 2019 arXiv: 1904.09602 [quant-ph]
- [75] Devitt S J, Munro W J, Nemoto K 2013 *Rep. Prog. Phys.* **76** 076001
- [76] Lidar D A, Brun T A 2013 *Quantum Error Correction* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [77] Terhal B M 2015 *Rev. Mod. Phys.* **87** 307
- [78] Johnson P D, Romero J, Olson J, Cao Y, Aspuru-Guzik A 2017 arXiv: 1711.02249 [quant-ph]
- [79] Xu X, Benjamin S C, Yuan X 2021 *Phys. Rev. Appl.* **15** 034068
- [80] Breuckmann N P, Ni X 2018 *Quantum* **2** 68
- [81] Torlai G, Melko R G 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 030501
- [82] Bausch J, Leditzky F 2020 *New J. Phys.* **22** 023005
- [83] Chen H, Vasmer M, Breuckmann N P, Grant E 2019 arXiv: 1912.10063 [quant-ph]
- [84] Nautrup H P, Delfosse N, Dunjko V, Briegel H J, Friis N 2019 *Quantum* **3** 215
- [85] Strikis A, Qin D, Chen Y, Benjamin S C, Li Y 2020 arXiv: 2005.07601 [quant-ph]
- [86] Montanaro A, Stanisic S 2021 arXiv: 2102.02120 [quant-ph]
- [87] Zlokapa A, Gheorghiu A 2020 arXiv: 2005.10811 [quant-ph]
- [88] Andreasson P, Johansson J, Liljestrand S, Granath M 2019 *Quantum* **3** 183
- [89] Dankert C, Cleve R, Emerson J, Livine E 2009 *Phys. Rev. A* **80** 012304
- [90] Nakata Y, Hirche C, Morgan C, Winter A 2017 *J. Math. Phys.* **58** 052203
- [91] Laflamme R, Miquel C, Paz J P, Zurek W H 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 198
- [92] Bennett C H, DiVincenzo D P, Smolin J A, Wootters W K 1996 *Phys. Rev. A* **54** 3824
- [93] Gottesman D 1997 *Ph. D. Dissertation* (California: Caltech)
- [94] Steane A M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 793
- [95] Shor P W 1995 *Phys. Rev. A* **52** R2493
- [96] Xu X, Sun J, Endo S, Li Y, Benjamin S C, Yuan X 2019 arXiv: 1909.03898 [quant-ph]
- [97] Huang H Y, Bharti K, Rebertost P 2019 arXiv: 1909.07344 [quant-ph]
- [98] Bravo-Prieto C, LaRose R, Cerezo M, Subasi Y, Cincio L, Coles P J 2020 arXiv: 1909.05820 [quant-ph]
- [99] Wang K, Song Z, Zhao X, Wang Z, Wang X 2020 arXiv: 2012.14311 [quant-ph]
- [100] Pashayan H, Wallman J J, Bartlett S D 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 070501
- [101] Horodecki M, Horodecki P, Horodecki R 1996 *Phys. Lett. A* **223** 1
- [102] Chowdhury A N, Low G H, Wiebe N 2020 arXiv: 2002.00055 [quant-ph]
- [103] Lehtovaara L, Toivanen J, Eloranta J 2007 *J. Comput. Phys.* **221** 148
- [104] McArdle S, Jones T, Endo S, Li Y, Benjamin S C, Yuan X 2019 *npj Quantum Inf.* **5** 75
- [105] Motta M, Sun C, Tan A T, O'Rourke M J, Ye E, Minnich A J, Brandao F G, Chan G K L 2020 *Nat. Phys.* **16** 205
- [106] Xue C, Chen Z Y, Wu Y C, Guo G P 2019 arXiv: 1909.02196 [quant-ph]
- [107] Marshall J, Wudarski F, Hadfield S, Hogg T 2020 *IOP SciNotes* **1** 025208
- [108] Gentini L, Cuccoli A, Pirandola S, Verrucchi P, Banchi L 2020 *Phys. Rev. A* **102** 052414
- [109] Wang S, Fontana E, Cerezo M, Sharma K, Sone A, Cincio L, Coles P J 2021 arXiv: 2007.14384 [quant-ph]
- [110] Sharma K, Khatir S, Cerezo M, Coles P J 2020 *New J. Phys.* **22** 043006
- [111] Fontana E, Cerezo M, Arrasmith A, Rungger I, Coles P J 2020 arXiv: 2011.08763 [quant-ph]
- [112] Franca D S, Garcia-Patron R 2020 arXiv: 2009.05532 [quant-ph]
- [113] Nakaji K, Yamamoto N 2021 *Quantum* **5** 434
- [114] Holmes Z, Sharma K, Cerezo M, Coles P J 2021 arXiv: 2101.02138 [quant-ph]
- [115] McClean J R, Boixo S, Smelyanskiy V N, Babbush R, Neven H 2018 *Nat. Commun.* **9** 1
- [116] Arrasmith A, Cerezo M, Czarnik P, Cincio L, Coles P J 2020 arXiv: 2011.12245 [quant-ph]
- [117] Harrow A W, Low R A 2009 *Commun. Math. Phys.* **291** 257
- [118] Grant E, Wossnig L, Ostaszewski M, Benedetti M 2019 *Quantum* **3** 214
- [119] Skolik A, McClean J R, Mohseni M, van der Smagt P, Leib M 2021 *Quantum Mach. Intell.* **3** 5
- [120] Romero J, Babbush R, McClean J R, Hempel C, Love P J, Aspuru-Guzik A 2018 *Quantum Sci. Technol.* **4** 014008
- [121] Marrero C O, Kieferová M, Wiebe N 2020 arXiv: 2010.15968 [quant-ph]
- [122] You Y Z, Yang Z, Qi X L 2018 *Phys. Rev. B* **97** 045153
- [123] Gan W C, Shu F W 2017 *Int. J. Mod. Phys. D* **26** 1743020
- [124] Liu D, Ran S J, Wittek P, Peng C, García R B, Su G, Lewenstein M 2019 *New J. Phys.* **21** 073059
- [125] Han Z Y, Wang J, Fan H, Wang L, Zhang P 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031012

SPECIAL TOPIC—Quantum computation and quantum information

Hybrid quantum-classical algorithms: Foundation, design and applications

Chen Ran-Yi-Liu Zhao Ben-Chi Song Zhi-Xin

Zhao Xuan-Qiang Wang Kun Wang Xin[†]

(*Institute for Quantum Computing, Baidu Research, Beijing 100193, China*)

(Received 25 May 2021; revised manuscript received 25 June 2021)

Abstract

Quantum computing, as an emerging computing paradigm, is expected to tackle problems such as quantum chemistry, optimization, quantum chemistry, information security, and artificial intelligence, which are intractable with using classical computing. Quantum computing hardware and software continue to develop rapidly, but they are not expected to realize universal quantum computation in the next few years. Therefore, the use of quantum hardware to solve practical problems in the near term has become a hot topic in the field of quantum computing. Exploration of the applications of near-term quantum hardware is of great significance in understanding the capability of quantum hardware and promoting the practical process of quantum computing. Hybrid quantum-classical algorithm (also known as variational quantum algorithm) is an appropriate model for near-term quantum hardware. In the hybrid quantum-classical algorithm, classical computers are used to maximize the power of quantum devices. By combining quantum computing with machine learning, the hybrid quantum-classical algorithm is expected to achieve the first practical application of quantum computation and play an important role in the studying of quantum computing. In this review, we introduce the framework of hybrid quantum-classical algorithm and its applications in quantum chemistry, quantum information, combinatorial optimization, quantum machine learning, and other fields. We further discuss the challenges and future research directions of the hybrid quantum-classical algorithm.

Keywords: hybrid quantum-classical algorithms, quantum information, quantum algorithms

PACS: 03.67.-a, 03.67.Ac, 03.67.Lx, 03.67.Pp

DOI: 10.7498/aps.70.20210985

[†] Corresponding author. E-mail: wangxin73@baidu.com



基于金刚石固态单自旋的纳米尺度零场探测

赵鹏举 孔飞 李瑞 石发展 杜江峰

Nanoscale zero-field detection based on single solid-state spins in diamond

Zhao Peng-Ju Kong Fei Li Rui Shi Fa-Zhan Du Jiang-Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 213301 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211363

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211363>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

金刚石氮-空位色心的原子自旋声子耦合机理

Atomic spin and phonon coupling mechanism of nitrogen-vacancy center

物理学报. 2021, 70(6): 068501 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201848>

基于金刚石NV色心的纳米尺度磁场测量和成像技术

Nanoscale magnetic field sensing and imaging based on nitrogen-vacancy center in diamond

物理学报. 2018, 67(13): 130701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180243>

基于金刚石体系中氮-空位色心的固态量子传感

Solid quantum sensor based on nitrogen-vacancy center in diamond

物理学报. 2018, 67(16): 160301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180788>

基于金刚石氮-空位色心的精密磁测量

High-resolution magnetometry based on nitrogen-vacancy centers in diamond

物理学报. 2018, 67(16): 167601 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181084>

利用金刚石氮-空位色心精确测量弱磁场的探索

Measurement of weak static magnetic field with nitrogen-vacancy color center

物理学报. 2017, 66(23): 230601 <https://doi.org/10.7498/aps.66.230601>

基于金刚石氮-空位色心自旋系综与超导量子电路混合系统的量子节点纠缠

Entanglement of quantum node based on hybrid system of diamond nitrogen-vacancy center spin ensembles and superconducting quantum circuits

物理学报. 2018, 67(7): 070302 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172634>

专题: 量子计算与量子信息

基于金刚石固态单自旋的纳米尺度零场探测*

赵鹏举¹⁾²⁾³⁾ 孔飞¹⁾²⁾³⁾ 李瑞¹⁾²⁾³⁾ 石发展^{1)2)3)†} 杜江峰¹⁾²⁾³⁾

1) (中国科学技术大学近代物理系, 中国科学院微观磁共振重点实验室, 合肥 230026)

2) (中国科学技术大学, 合肥微尺度物质科学国家研究中心, 合肥 230026)

3) (中国科学技术大学, 量子信息与量子科技前沿协同创新中心, 合肥 230026)

(2021 年 7 月 23 日收到; 2021 年 9 月 6 日收到修改稿)

在单分子层面对物质的特性进行表征在当今科学发展中有着重要意义, 例如生物、化学、材料科学等. 通用纳米尺度传感器的到来有望实现物质科学的一个长远目标——室温大气环境下的单分子结构解析. 近些年来, 金刚石中氮-空位 (NV) 色心作为一种固态单自旋逐渐发展成兼具高空间分辨率和高探测灵敏度的纳米尺度传感器. 由于其无损、非侵入的特性, 在单分子测量方面具有非常出色的表现. 到目前为止, NV 传感器已经实现了对磁场、电场、温度等诸多物理量的高灵敏度探测, 是一种潜在的多元化量子传感器. 结合多角度的交叉测量, 有助于提升对新物质、新材料、新现象的认识与理解. 本文从 NV 传感器的微观结构出发, 简要介绍了在零场这一特殊磁场条件下的几篇探测工作, 包括零场的顺磁共振探测和电场探测.

关键词: 氮-空位色心, 单自旋, 零场顺磁共振, 电场探测**PACS:** 33.35.+r, 07.55.Ge, 07.50.Ls, 03.65.-w**DOI:** 10.7498/aps.70.20211363

1 引言

随着物质科学的发展, 人们愈发重视微观结构和宏观物性的联系, 相应的各种纳米尺度的检测手段层出不穷, 如 X 射线晶体衍射^[1]、扫描探针显微镜^[2]以及能够突破光学衍射极限的超分辨光学方法^[3,4]等. 金刚石中氮-空位 (NV) 色心是最近十几年新兴的纳米尺度量子传感器^[5], 在量子信息^[6-8]和量子度量学^[9-11]中有着重要的应用. NV 色心是金刚石中的顺磁点缺陷, 电子密度高度局域化, 在室温下能达到毫秒级别的相干时间. NV 色心本身的原子尺寸大小使其具有纳米空间分辨率的潜力. 另外, NV 色心具有自旋依赖的荧光性质, 利用光探测磁共振技术能够对其初始化和读出. 这些优异

的性质都促使 NV 在室温下成为高灵敏度的量子传感器. 在 2008 年, 德国和美国的两个研究小组分别验证了 NV 具有测量纳米尺度弱磁信号的能力^[12,13]. 之后基于 NV 色心的量子传感技术迅猛发展, 分别在 2015 年和 2016 年实现了对单个蛋白分子的顺磁共振探测^[14]和核磁共振探测^[15]. 当然不仅是磁信号, 根据 NV 色心的哈密顿量形式, 对其他物理参数, 例如电场^[16]、应力^[17]、温度^[18]等, NV 也表现出高灵敏度的特性. 研究表明, NV 具有探测单个电荷的能力^[19]. 而且金刚石本身没有生物毒性以及非侵入的探测方式, NV 能够实现神经电位探测^[20]和活体细胞内温度检测^[18,21,22]. 综上, NV 是一个非常优异并且少数能够实现多元化检测的量子传感器, 由于其具有生物兼容性, 在生命科学领域具有重要的潜在应用.

* 国家重点研发计划 (批准号: 2018YFA0306600, 2016YFA0502400)、国家自然科学基金 (批准号: 81788101, T2125011, 31971156)、中国科学院 (批准号: GJJSTD20170001, QYZDY-SSW-SLH004, YIPA2015370)、安徽量子信息技术引导专项 (批准号: AHY050000) 和统筹推进世界一流大学和一流学科建设专项资金 (批准号: YD2340002004) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fzshi@ustc.edu.cn

利用 NV 的探测实验中, 通常需要施加偏置磁场, 使微波能够独立地操控 NV 的子能级 [23]. 外磁场的加入会将目标样品的能级重新排布, 使探测变得复杂甚至不可探测, 例如自旋系统的各向异性超精细耦合 [24]、磁滞回线、亦或是屏蔽室内测量等. 另外, 这样的测量方式只对磁场敏感, 对于电场探测将很难适用, 因此有必要发展零场的探测方法 [25]. 同时零场有助于仪器小型化, 能够进一步提升 NV 的应用价值. 本文第 2 节会简单介绍 NV 的基本结构和哈密顿量. 第 3 节和第 4 节主要介绍 NV 在零场下的应用, 主要包括作者最近的几项工作, 零场顺磁共振 [26,27] 和纳米尺度的电场探测 [28]. 最后对全文进行总结和展望.

2 NV 色心简介

金刚石晶格中一个氮原子取代了碳原子同时捕获一个碳空位, 就形成了氮-空位色心, 简称 NV 色心, 结构如图 1(a) 所示. NV 色心有 6 个电子, 其中 2 个来源于氮原子, 3 个来源于碳空位上的悬空键, 最后 1 个电子来自周围环境的施主杂质. 根据群理论和第一性原理计算, 能够确定 NV 的基态 3A_2 和第一激发态 3E 的能级结构 [5,29], 如图 1(b) 所示. 第一激发态位于基态上方 1.945 eV 的位置, 两个都是自旋为 1 的三重态. 基态和激发态由于电偶极相互作用能够发生辐射跃迁. 由于 NV 基态的电子云主要是垂直于 NV 轴 (氮-空位主轴) 分布, 因此平行于 NV 轴的激光激发效率最高. 当 NV 吸收一个 637 nm (能量为 1.945 eV) 的光子, 电子从基态跃迁到激发态. 反之, 从激发态回落到基态, 会放出一个 637 nm 的光子. 室温下, 由于存在很强的声子边带 [30], 会观测到比较宽的吸收谱和荧光发射谱. 因此实验中常用 532 nm 激光进行非共振激发.

NV 能够被激光初始化和读出, 主要是存在具有自旋选择性的非辐射过程. 该过程会经历两个自旋单态 (1A_1 和 1E), 被称为 ISC (inter-system crossing) 过程. 图 1(b) 给出了 NV 电子受到激发后的动态过程. 绿光将 NV 从基态泵浦到激发态后, 自旋 $|m_s = 0\rangle$ 的激发态主要通过辐射跃迁直接回落到基态, 释放出光子. 相应的 ISC 过程被强烈抑制. 而自旋 $|m_s = \pm 1\rangle$ 的激发态, 会以较大概率经历 ISC 过程, 再回到 $|m_s = 0\rangle$ 的基态. 这个过程并

没有光子释放, 因此 $|m_s = 1\rangle$ 的自旋态相对 $|m_s = 0\rangle$ 的自旋态更暗. 实验中可以通过荧光的亮暗来区分 NV 的自旋态. 需要注意的是, 读出过程中, $|m_s = \pm 1\rangle$ 的布居会向 $|m_s = 0\rangle$ 转移, 即 NV 被极化. 激发态的寿命通常为 10 ns [31], 暂稳态 $1E$ 的寿命大约 300 ns [32]. 用 200 μ W 的激光功率, NV 的读出窗口一般只有 300 ns 左右. 为了保证 NV 被充分极化, 通常的极化时间为 1 μ s 左右.

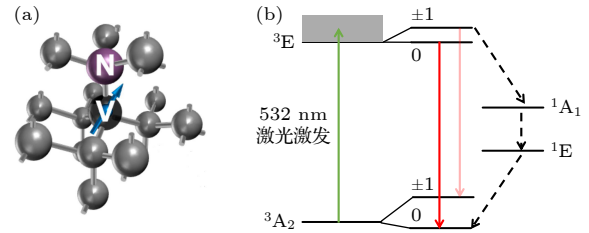


图 1 (a) 金刚石的晶格结构; (b) NV 色心的能级结构和光跃迁过程

Fig. 1. (a) Crystal lattice structure of diamond; (b) energy level structure and optical transition processes of NV color centers.

基于 NV 的探测实验本质上是待测物理量和 NV 的相互作用过程. 大多数探测实验中, 只有基态参与了演化过程. 因此这里不考虑激发态的过程, 只写出 NV 基态的哈密顿量 [33,34], 主要有 3 部分构成:

$$\begin{aligned} H_{\text{NV}} &= H_{\text{ZS}} + H_{\text{Zeeman}} + H_{\text{E}} \\ &= DS_z^2 + \gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} + [d_{\parallel} E_z S_z^2 - d_{\perp} E_x (S_x^2 - S_y^2) \\ &\quad + d_{\perp} E_y (S_x S_y + S_y S_x)], \end{aligned} \quad (1)$$

右边第一项 $H_{\text{ZS}} = DS_z^2$ 是 NV 的零场劈裂, $D = 2870$ MHz 是 NV 的零场劈裂常数, $\mathbf{S}$ 是 NV 的自旋算符. 第二项 $H_{\text{Zeeman}} = \gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$ 是外磁场 $\mathbf{B}$ 导致的塞曼劈裂, 其中 $\gamma = 2.803$ MHz·G⁻¹ 为 NV 的旋磁比. 第三项 $H_{\text{E}} = d_{\parallel} E_z S_z^2 - d_{\perp} E_x (S_x^2 - S_y^2) + d_{\perp} E_y (S_x S_y + S_y S_x)$ 是电场 $\mathbf{E}$ 和 NV 的相互作用项, 其中, $d_{\parallel} = (0.35 \pm 0.02)$ Hz·cm·V⁻¹ 和 $d_{\perp} = (17 \pm 3)$ Hz·cm·V⁻¹ 分别是 NV 色心轴向和垂直轴向的电偶极矩常数. NV 和应力的相互作用形式和电场情况相同 [35,36], 而温度对 NV 的影响则类似于电场的轴向相互作用 [18,37], 这里就不过多叙述. 从哈密顿量形式上可以看出, 当磁场和电场均为零时, NV 自旋态 $|m_s = \pm 1\rangle$ 是简并的. 当存在一个较大磁场时 (通常平行于 NV 轴方向), $|m_s = \pm 1\rangle$ 去

简并, 此时 $m_s = 0, \pm 1$ 是好量子数. 这也是大多数测磁的常用条件. 但是横向电场作用在 NV 自旋态 $|m_s = \pm 1\rangle$ 的非对角项, 将会被磁场强烈压制. 注意到 NV 的横向电偶极矩常数是纵向的大约 50 倍, 想要高效率地探测电场, 就需要最大限度地保留横向电场的相互作用. 综合来看, 零磁场可以满足同时探测磁场和电场. 不仅如此, 零场条件下对于 NV 通过磁偶相互作用测量自旋系统, 解析其能级结构具有天然优势. 当然 NV 会受到本身氮核自旋的作用 (没有在 (1) 式中写出) 和剩磁的影响, 很难将磁场真正调零. 测量电场仍会受到一定影响 (尤其是弱电场情况), 因此需要一定的辅助手段或者特殊序列来抑制磁场作用. 这在下文会详细说明.

3 纳米尺度零场顺磁共振

目前 NV 量子传感器应用最为广泛的是磁信号测量, 其中一个重要的方向就是自旋信号的探测 [38], 即磁共振检测. 磁共振根据有无电子自旋的参与分为顺磁共振和核磁共振. 传统的核磁共振已经是结构生物学的重要方法之一 [39], 而顺磁共振相对于核磁共振的特点是能够解析生物大分子的长程结构和快动力学信息 [40]. 这些信息能够从电子的精细和超精细相互作用中提取出来, 但谱线的展宽则影响了最终得到超精细相互作用的精度. 对样品本身而言, 决定谱线展宽的因素有两种: 一种是外磁场作用下引起的非均匀展宽, 另外一种则是电子本身自旋态退相干时间限制.

第一个问题的主要原因是分子内部存在各向异性的超精细相互作用. 外磁场大小以及和分子主轴的夹角共同决定了谱峰的位置, 如图 2(a) 所示. 通常情况, 分子主轴的方向是随机无法确定的. 对于传统顺磁共振, 解决非均匀展宽的策略是尽可能地加高磁场, 利用 g 因子的各向异性, 将不同方向的分子信号在谱线上拉开, 达到类似准晶的效果, 从而降低非均匀展宽. 但是高场设备往往昂贵而复杂, 具有很高的技术壁垒. 相对而言, 零场是一个解决问题的好方法. 当塞曼劈裂项消失, 分子的能级结构可以在主轴坐标系下完全定义, 不再受主轴方向的影响, 达到类似晶体的效果 (图 2(b)). 因此零场对于解析分子内部相互作用有着先天优势.

当解决了非均匀展宽或者是对于某些单分子情况, 第二个因素变得尤为重要 [41]. 它源于和周围环境自旋的相互耦合, 并且缺乏有效手段主动提升目标自旋的退相位时间. 此时, 一种简单而有效的策略就是利用一些特殊自旋态天然的对外界噪声不敏感的特性, 这是由分子本身能级结构决定的. 这些现象称为 clock transitions, 广泛地存在于许多物理体系中, 例如离子阱体系 [42]、磷硅体系 [43] 以及核磁共振 [44] 等体系当中. 这种跃迁一般发生在特殊磁场条件下, 例如零场环境. 简而言之, 零场是提升谱线分辨率的有效方法之一.

传统的零场顺磁共振很早就有记录 [45], 同时也能够观测到这种谱线窄化的现象 [46,47], 但是其探测灵敏度依赖自旋的热极化率, 实验测量中往往需要大量的样品 (厘米量级). 这也限制了零场顺磁共振的实际应用, 是几十年来零场顺磁鲜有耳闻的

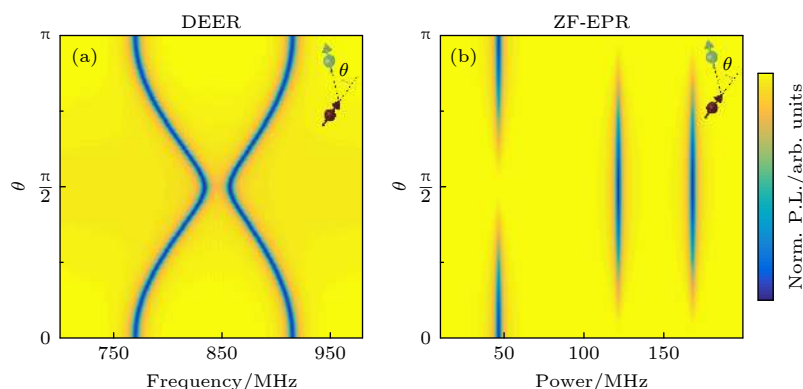


图 2 非零场 (a) 和零场 (b) 方法对比. θ 是分子主轴和外磁场的夹角. 非零场下, 谱峰位置随角度变化, 但是零场谱位置始终保持不变

Fig. 2. Comparison of non-zero-field (a) and zero-field (b) methods. θ is the angle between the principle axis of the molecule and the external magnetic field. The position of the spectral peak varies with the angle in the non-zero field, but is always constant in the zero field.

重要原因. 而 NV 量子传感器由于探测原理不同, 测量灵敏度并不受磁场的影响. 如今, 基于 NV 的顺磁共振技术已经能够实现单个自旋^[48]乃至体外单分子^[14]的探测. 因此理论上 NV 同样适用零场顺磁共振探测, 同时保持纳米尺度的分辨率.

3.1 目标自旋系统

本节将从目标自旋哈密顿量出发, 介绍如何从零场谱中直接得到超精细相互作用以及如何抑制噪声. 3.2 节和 3.3 节将用实验说明零场条件下 NV 具有测量电子, 并获得高分辨顺磁共振谱的能力.

考虑到目标自旋需要满足 clock transition 的特性, 这样的自旋体系可以是一个电子自旋 ($S = 1/2$) 和任意半整数核自旋 ($I = n/2$) 的耦合体系. 简单起见, 这里以 $S = 1/2$, $I = 1/2$ 为例. 这样的耦合系统, 零场下的哈密顿量完全由电子和核的超精细耦合相互作用决定^[45]:

$$H_0 = A_{\perp}(S_{x,T}I_x + S_{y,T}I_y) + A_{\parallel}S_{z,T}I_z, \quad (2)$$

其中, $A_{\perp}$ 和 $A_{\parallel}$ 是超精细耦合常数, S_T 和 I 分别是电子和核自旋操作算符. 本征态分别是总量子数 $F = 0$ 的自旋单态 $|S_0\rangle$

$$|S_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (3)$$

以及量子数 $F = 1$ 的自旋三重态 $|T_0\rangle$ 和 $|T_{\pm 1}\rangle$

$$\begin{aligned} |T_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \\ |T_{+1}\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\ |T_{-1}\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

相应的本征能量分别是 $\omega_{S_0} = -\frac{A_{\perp}}{2} - \frac{A_{\parallel}}{4}$, $\omega_{T_0} = \frac{A_{\perp}}{2} - \frac{A_{\parallel}}{4}$, $\omega_{T_{\pm 1}} = \frac{A_{\perp}}{4}$, 其中 $|T_{\pm 1}\rangle$ 简并. 因此在零场下, 可以得到 3 个跃迁, 位置是由超精细耦合决定的. 反之, 可以通过零场谱来计算相应的耦合常数. 需要注意的是, 这里的哈密顿量采用的是分子主轴坐标系, 变换到实验室坐标系时, 只需整体做一个旋转, 并不影响最终的能级结构.

当存在一个磁噪声 $\delta\mathbf{b}$ 时, 目标自旋的能量会发生扰动 (图 3), 导致谱线变宽. 这里忽略了对核自旋的影响. 其微扰的哈密顿量为

$$\delta H = \sum_{j=x,y,z} \delta_j S_{j,T}, \quad (5)$$

其中 $\delta_j = \gamma_e \cdot \delta b_j$, γ_e 是电子自旋的旋磁比. 根据微扰理论, 系统能级的偏移可以简化成

$$\begin{aligned} \delta\omega_{S_0} &\approx -\frac{\delta_x^2 + \delta_y^2}{2(A_{\parallel} + A_{\perp})} - \frac{\delta_z^2}{4A_{\parallel}}, \\ \delta\omega_{T_0} &\approx -\frac{\delta_x^2 + \delta_y^2}{2(A_{\parallel} - A_{\perp})} + \frac{\delta_z^2}{4A_{\parallel}}, \\ \delta\omega_{T_{\pm 1}} &\approx \frac{\delta_z^2}{2}. \end{aligned} \quad (6)$$

可以看到, 能级 $|S_0\rangle$, $|T_0\rangle$ 关于磁场的一阶项消失, 磁场对跃迁频率的扰动降至 δ^2/A . 因此, 零场下将会出现谱线窄化的现象.

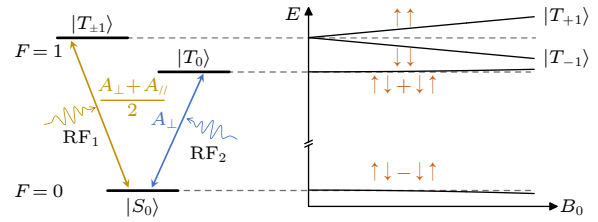


图 3 1/2 核自旋和电子自旋耦合系统能级示意图

Fig. 3. Energy levels of 1/2 nuclear spin and 1/2 electron spin coupled system.

3.2 纳米尺度零场顺磁共振谱

利用 NV 测量自旋信号, 本质上仍是测量自旋在 NV 位置产生的局域磁场. 通过设计特定的序列, 让 NV 的能级在目标自旋的作用下产生偏移, 然后将其转化到布居数上, 通过 NV 的荧光读取出来. 目前有两种常用的测量电子的方法, 一种是双电子共振序列 (DEER)^[14], 另外一种交叉极化的方式^[49]. DEER 是一种经典的测量双电子耦合的序列, 通过微波和射频分别精准地操控 NV 和目标电子, 使电子能够持续地在 NV 上积累相位. 而交叉极化则是通过调控 NV 或者目标电子的能级, 使两者达到 Hartmann-Hahn 的共振条件^[50], 从而发生能量交换的过程. 这种能量交换可以发生在实验室坐标系下, 也可发生在旋转坐标系下. 原则上两种方式都能直接应用于零场条件, 不过极化转移相对 DEER 方式一个明显的好处就是可以减少微波或者射频的操控, 从而降低了实验的复杂度. 因此, 为了首次演示纳米尺度的零场顺磁共振谱, 本文采用极化转移的方式.

零场下只能通过微波在缀饰态下调控能级结构. 当一束共振的微波连续驱动 NV, NV 会在 $|m_s=0\rangle$ 和 $|m_s=\pm 1\rangle$ 之间做 Rabi 振荡. 此时如图 4

所示, 在缀饰态下, NV 的 3 个能级完全去简并. 当 NV 缀饰态能级和目标自旋能级发生匹配时, 在偶极耦合作用下, 就会发生自旋翻转的现象. 共振条件是

$$\Omega = 2\omega_{ij}, \quad (7)$$

Ω 为 NV 的 Rabi 频率, ω_{ij} 为目标自旋的能级差.

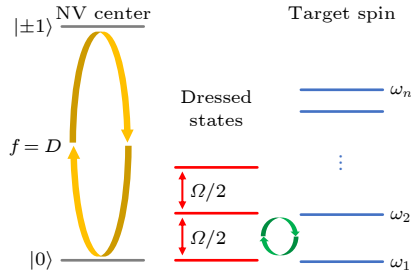


图 4 微波驱动下, NV 缀饰态能级和目标电子发生共振. 当目标自旋能级差 $\Delta\omega = \Omega/2$ 时, 就会和 NV 之间发生极化转移

Fig. 4. NV is driven by microwaves, and the dressed state energy levels resonate with the target spin. When the target spin energy level difference $\Delta\omega = \Omega/2$, then polarization transfer between NV and target spin occurs.

选用金刚石中的 ^{15}N -P1 中心作为目标自旋. P1 中心是金刚石中的氮缺陷, 是一个电子和氮核的耦合体系, 哈密顿量形式和常见的氮氧自由基非常类似. 采用序列是 spin-locking, 通过锁定 NV 的自旋态, 从而稳定地发生极化转移. 零场顺磁共振谱可以通过扫描驱动 NV 的微波功率得到. 图 5 所示为最终的测试结果, 给出了 3 组明显的共振峰位置, 分别对应 3 种不同跃迁 (图 3). 值得注意的是, 除了 ^{15}N -P1 的 3 个共振峰外, 似乎还有其他的共

振峰, 分别在大约 75 和 125 MHz 的位置 (图 5). 尚不清楚这些多余信号的来源, 可能是金刚石中其他未知的缺陷. 另外, 可以发现零场谱的展宽在 5—10 MHz, 主要是由 NV 的电场噪声、微波功率波动以及目标自旋的退相位时间引起的, 想要进一步提升谱线分辨率, 就必须破除这些限制因素.

3.3 高分辨顺磁共振谱

首先需要消除 NV 传感器本身对谱宽的限制. 假设目标电子的退相位时间为 $10^0 \mu\text{s}$, 超精细耦合常数为 100 MHz, 因此预计 $|S_0\rangle$ 和 $|T_0\rangle$ 的退相位时间在 $10^2 \mu\text{s}$, 大致和 NV 的 $T_{1\rho}$ 在同一量级, 对应跃迁的谱线展宽大约为 10 kHz. 想要测到如此窄的磁共振谱, 正如前面所说, 是不能用微波驱动的方式. 同时 DEER 的探测方法也不适用, 因为近表面 NV 的 T_2 一般为 $10 \mu\text{s}$. 为了解决这些问题, 仿照核磁关联谱序列, 发展出一套适用于零场顺磁的关联谱探测序列, 将探针的自旋态寿命限制提升到 spin-locking 弛豫时间 $T_{1\rho}$. 对浅 NV 来说, $T_{1\rho}$ 要远大于 NV 的 T_2 .

图 6 给出了测量序列, 由两个 DEER 探测窗口和中间一段 spin-locking 序列组成. 在第一个 DEER 序列的演化过程中, 目标自旋和 NV 相互作用会产生一个相位 ϕ_1 . 此后在微波的驱动下 NV 的自旋态会被锁定, 积累的相位信息 ϕ_1 被存储在 NV 的自旋态上, 持续存储的特征时间为 NV 的 $T_{1\rho}$. 在此期间可以对目标自旋施加任意操控, 这会导致在第二个 DEER 测量中积累一个 ϕ_2 的相位. 因此最终会得到两个相位信息的关联:

$$S_{\text{corr}} = \frac{1}{2}(1 + \langle \cos 2\phi_1 \cos 2\phi_2 \rangle), \quad (8)$$

其中尖括号代表统计平均.

为了将 NV 的自旋态锁定, 这里采用了相位调制的微波序列. 这个序列在电场探测中也会用到, 之后会再次说明. 同样使用 ^{15}N -P1 中心作为待测目标, 并通过亥姆霍兹线圈将剩磁补偿到大约 0.01 G ($1\text{G} = 10^{-4} \text{T}$). 利用关联谱序列, 可以实现对 P1 中心任意自旋态的操控. 为了得到顺磁共振谱, 对其采用 Ramsey 测量. 对于自旋态 $|S_0\rangle$ 和 $|T_{\pm 1}\rangle$ 的跃迁 (简称 $\text{ST}_{\pm 1}$), 相应的操控是扫描两个共振 $\pi/2$ 脉冲的时间间隔 t . 为了避免射频产生的虚假信号, 在整个过程中保持射频的波形不变. 对于自旋态 $|S_0\rangle$ 和 $|T_0\rangle$ 的跃迁 (简称 ST_0), 由于这两个

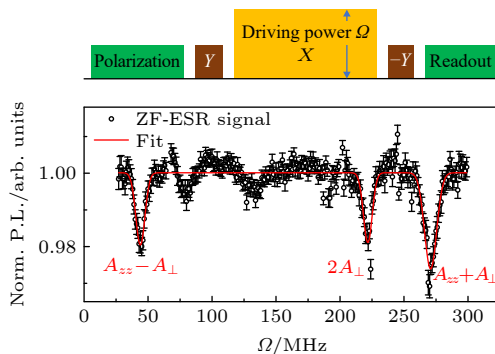


图 5 ^{15}N -P1 中心零场顺磁共振谱 [26]. 上面是 spin-locking 序列, 通过改变驱动功率 Ω 来扫描频率. 下面是实验结果

Fig. 5. Zero-field paramagnetic resonance spectrum of ^{15}N -P1 center. Top, spin-locking sequence, by changing the driving power Ω to scan the frequency. Bottom, the experimental results.

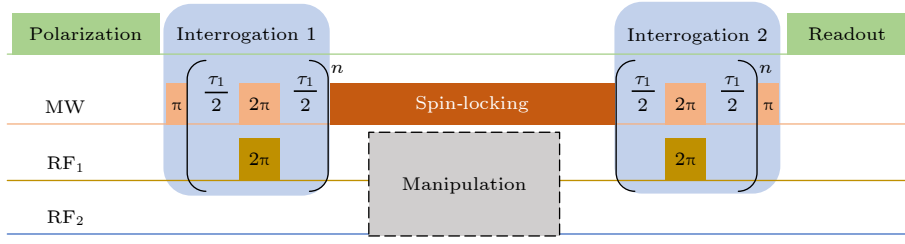


图 6 零场顺磁共振关联谱序列. 虚线方框内表示射频对目标自旋的操控, 决定了最终的关联信号

Fig. 6. Correlation protocol for zero-field paramagnetic resonance measurements. The correlation signal depends on the manipulations on the target spin, which is denoted by the black dashed box.

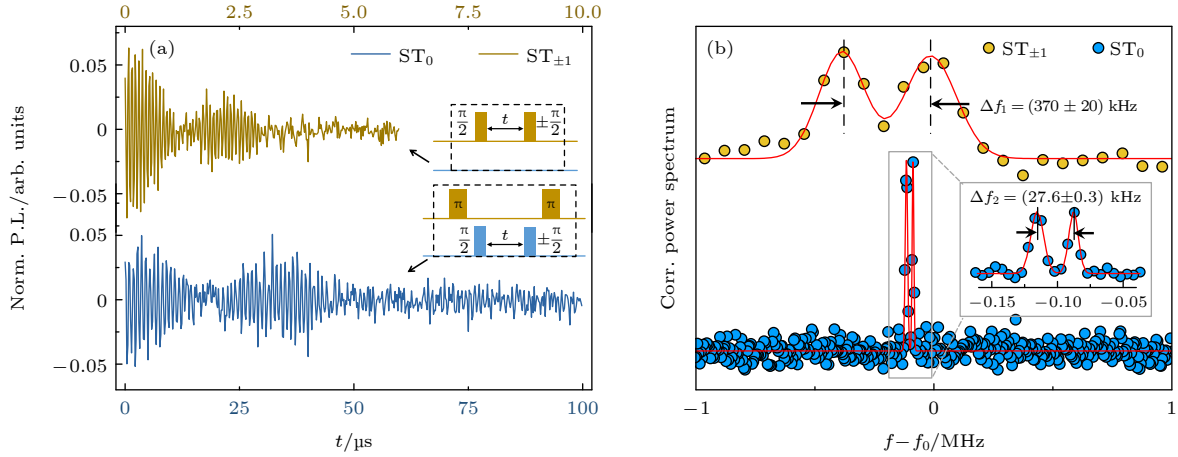


图 7 单个 P1 中心的高分辨顺磁共振谱^[27] (a) 两种跃迁的 Ramsey 实验的关联谱信号; (b) 对图 (a) 中时域信号的傅里叶变换
Fig. 7. High-resolution electron paramagnetic resonance spectroscopy of single P1 centers^[27]: (a) Correlation signals of Ramsey experiments for the two kinds of transitions; (b) Fourier transformations of the time-domain data in panel (a).

自旋态是磁不敏感的, 因此和 NV 的耦合也近似为零. 此时需借助 $ST_{\pm 1}$ 跃迁来辅助测量, 通过前后两个 $ST_{\pm 1}$ 的 π 脉冲将 $|S_0\rangle$ 上的布居变化转移到 $|T_{\pm 1}\rangle$ 上 (图 7(a)). 由此可以得到时域上振荡的信号, 通过傅里叶变换可以得到频谱信息 (图 7(b)). 时域上振荡幅度的衰减反映了自旋退相干过程, 导致了最终频谱信号的展宽. 图 7 给出了两种跃迁的测量结果, 傅里叶变换结果显示了谱线分辨率有 27 倍的提升, 达到了 10 kHz 以下.

一个有意思的现象是两组峰都表现出了劈裂, 劈裂大小的关系远不能满足 (6) 式, 说明产生原因是不一样的. 对于 $ST_{\pm 1}$ 跃迁, 劈裂来源于 P1 和附近 ^{13}C 核自旋的耦合. 对于 ST_0 跃迁, 劈裂则是金刚石内部电场或者应力导致的. 对一块 ^{12}C 核自旋纯化的样品做了对比, 发现 $ST_{\pm 1}$ 的劈裂消失了, 而 ST_0 跃迁的劈裂仍然存在, 这说明金刚石内部的电场或者应力是广泛存在的, 第 4 节的电场测量会再次证明这一点. 而且不同 P1 的劈裂大小不同 (这里并没有展示结果), 反映了局域环境的差异.

如此微弱的非磁相互作用, 用之前的非零场测试是无法解析出来的.

4 纳米尺度电场探测

NV 色心也是一种纳米尺度的电场量子传感器. 利用 NV 表征电场性质的研究, 主要是利用电场作用引起 NV 能级的斯塔克偏移. 相对来说, NV 激发态和电场的相互作用要远大于基态 (激发态的电偶极矩是基态的大约 80 倍)^[51], 利用激发态更易实现电场的高灵敏度探测. 但是观测激发态的直流电场斯塔克效应往往需要低温环境^[51], 而且由于光电离过程的参与导致机制复杂^[52], 很难进行真正的电场探测. 基态虽然具有较弱的电感应系数, 仍在 2011 年实现了纳米尺度下的电场矢量测量^[16], 直流电场探测灵敏度达 $891 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{Hz}^{-1/2}$. 利用这样的测量方式能够进行孤立电荷的探测^[19]以及纳米尺度的电场成像^[53], 空间分辨率达到了大约 10 nm. 在第 2 节中提到, 测量电场的关键是

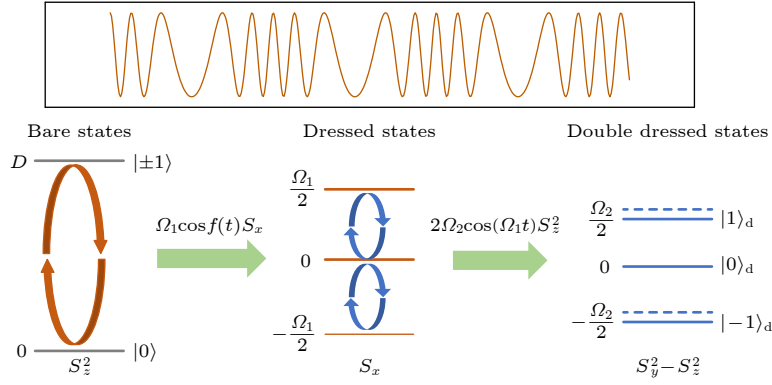


图 8 上方是相位调制微波的波形示意图. 下面是 NV 自旋态在不同表象下的能级结构. 蓝色虚线表示电场作用产生的能量偏移
Fig. 8. Top is a schematic of the waveform of the phase-modulated microwave. Below is the energy structures of the NV center in the different frames by continuous phase-modulated microwave driving. The blue dashed line indicates the energy shift resulting from the electric field effect.

尽量消除 NV 塞曼劈裂的影响, 同时令横向电场的斯塔克效应保留下来. 文献 [16] 的做法是施加一个横向的磁场, 将 NV 的本征态转化为 $|0\rangle$, $|\pm\rangle = (|1\rangle \pm |-1\rangle)/\sqrt{2}$ 来抑制纵向磁场的作用. 由于施加横向磁场有限, 对磁场条件要求较高, 难以应用在 ^{15}NV 色心以及探测本身具有微弱磁场的样品材料. 而且, 即使 ^{14}NV 色心, 也只能应用核自旋为零的跃迁, 一定程度上削弱了测量灵敏度. 针对这个问题, 我们发展了一种利用连续波驱动的电场测量方法.

连续波驱动是一种常见的动力学解耦的方法, 通过抑制磁噪声来达到提升相干时间的目的 [54]. 对于 $S = 1$ 的 NV 体系来说, 零场下同时对三能级进行驱动, 在演化过程中, 电场相互作用保留了下来. 为了消除驱动场波动的影响, 采用相位调制的微波序列, 哈密顿量形式如下:

$$H_1 = (\Omega_1 + \delta\Omega_1) \cos \left[Dt + \frac{2\Omega_2}{\Omega_1} \sin(\Omega_1 t) \right] S_x, \quad (9)$$

其中 $\delta\Omega_1$ 表示驱动场 Ω_1 的波动程度. 结合 (1) 式和 (9) 式, 可以分析微波驱动下的能级结构. 在近似条件 $D \gg \Omega_1$; $\Omega_1 \gg |\gamma B|$, $d_{\perp} E_{\perp}$, Ω_2 ; $\Omega_2 \gg \delta\Omega_1$ 下, 总的哈密顿量经过两次旋转变换之后 (见图 8) 简化为

$$H_{\Pi} = \left(\frac{\Omega_2}{2} + \frac{\Delta^2}{\Omega_2} \right) (S_z^2 - S_y^2) + \left(\frac{1}{2} d_{\parallel} E_z + \frac{3}{2} d_{\perp} E_x \right) S_x^2, \quad (10)$$

其中 $\Delta = \delta\Omega_1/2$, 而磁场以及某些电场分量则被压制到四阶小量, 可以完全被忽略. 此时系统的本征

态为

$$\begin{aligned} | + 1 \rangle_d &= \frac{1}{2} (| + 1 \rangle + | - 1 \rangle), \\ | 0 \rangle_d &= \frac{1}{2} (| + 1 \rangle - | - 1 \rangle), \\ | - 1 \rangle_d &= | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

而电场会引起缀饰态 $|\pm 1\rangle_d$ 的能级发生偏移 $\delta = \pm \frac{1}{2} (d_{\parallel} E_z + 3d_{\perp} E_x)$. 微波功率的波动被调制频率 Ω_2 压制, 而 Ω_2 的精度取决于任意波发生器的时钟精度, 可以到赫兹级别.

实验中制备缀饰态 $|0\rangle_d$ 和 $|-1\rangle_d$ 的叠加态, 通过测量 Ramsey 振荡来表征电场引起能级移动. 振荡的相对频率大小反映了电场强度, 而振动幅度的衰减速率则说明了电场噪声的强度. 图 9(a) 给出了不同磁场和电场下信号的频率偏移, 可以看到随着磁场增大, 信号频率几乎不变, 但是对于电场, 信号是线性依赖的.

我们也检测了不同介电常数的电介质对金刚石表面电场噪声的抑制作用. 假设电场噪声是准静态的, NV 的退相干速率可以近似写成

$$\frac{1}{T_2^*} \propto \sqrt{\langle E_i^2 \rangle + \left(\frac{\kappa_d + \kappa_{\text{air}}}{\kappa_d + \kappa_{\text{ext}}} \right)^2 \langle E_{s,\text{air}}^2 \rangle}, \quad (12)$$

其中 $\kappa_{d,\text{air},\text{ext}}$ 分别表示金刚石、空气和滴加电介质的介电常数. 电场噪声分为两部分: 金刚石内部电场噪声 $\langle E_i^2 \rangle$ 和表面电场噪声, $\langle E_{s,\text{air}}^2 \rangle$ 表示空气界面时金刚石表面电场噪声. (12) 式能够很好地拟合实验数据 (图 9(c)), 说明了金刚石内部本底电场的存在, 也和上一个工作 [27] 以及其他研究组 [34,55] 得出的结论一致.

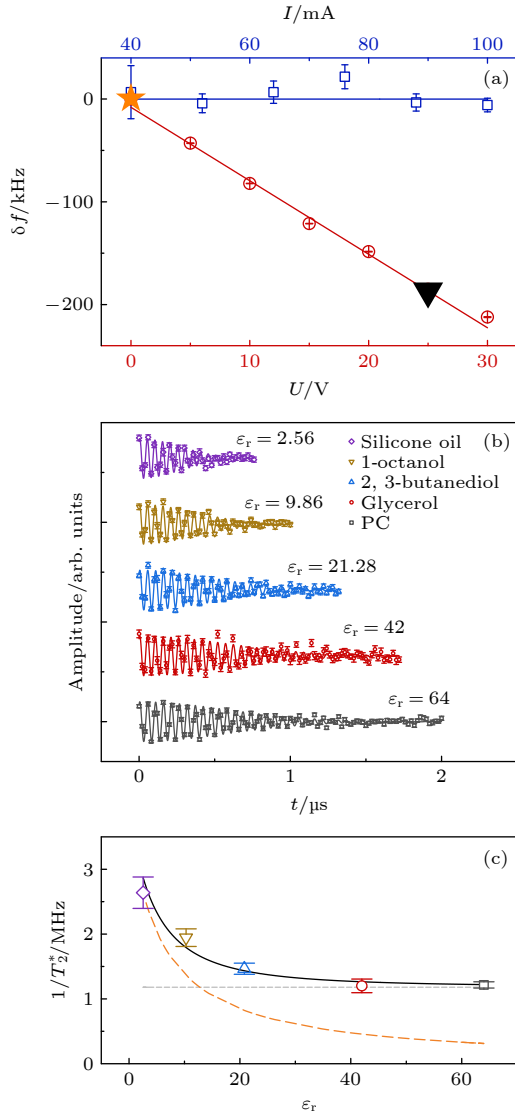


图9 (a) 频率偏移量随着亥姆霍兹线圈电流和电极电压的变化^[28]; (b) 不同电介质覆盖下, NV 缀饰态的 Ramsey 振荡衰减^[28]; (c) 图 (b) 中曲线的拟合的衰减速率, 黑色实线表示 (12) 式的拟合曲线, 橙色虚线示意反比的关系^[28]

Fig. 9. (a) Variation of frequency shift with Helmholtz coil current and electrode voltage^[28]. (b) Decay of Ramsey oscillations in the NV dressed states with different dielectric coverings^[28]. (c) Decay rate of the fitted curve in panel (b). The solid black line indicates the fitted curve of Eq. (12), and the dashed orange line shows the inverse relationship^[28].

5 总结和展望

本文主要介绍了 NV 量子传感器在零场下的几个应用, 包括自旋磁共振探测和电场探测等. 零场是磁共振技术的一个重要研究方向, 具有廉价、便携以及谱线分辨率更高的特点. 但相对来说, 只有零场核磁共振发展比较成熟, 但也需要自旋预极化和输送样品等复杂技术^[56]. 而 NV 色心则提供

了一种另外可能, 尤其是零场顺磁共振, 这将对解析分子结构有着重要的意义^[45]. 而且, 零场下高谱线分辨率允许测到更远距离电子对的耦合. 而对于电场探测, NV 是一个能够室温下实现单电荷探测的高灵敏度传感器^[19]. 连续波驱动的探测方式, 能够有效抑制磁场对 NV 的塞曼作用, 特别适用于探测磁场非均匀的弱磁环境, 例如多铁材料^[57,58]等. 当然, 这些都只是对 NV 测量方法上的验证, 实际应用仍会遇到一些技术上的阻力. 例如如何分散生物大分子令其与 NV 靠得更近^[24], 活体细胞兼容性问题^[21,22], 及金刚石表面电屏蔽问题^[59], 甚至还有近表面色心不稳定的问题^[60,61]等. 但这些都不是原理上的限制, 而且都已经有了相应的解决方案. 相信随着技术的提升, 这些问题都会被解决. NV 作为一种优质的量子传感器, 真正应用在各行各业.

参考文献

- [1] Mino L, Borfecchia E, Segura-Ruiz J, Giannini C, Martinez-Criado G, Lamberti C 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 025007
- [2] Bian K, Gerber C, Heinrich A J, Müller D J, Scheuring S, Jiang Y 2021 *Nat. Rev. Methods Primers* **1** 36
- [3] Xu K, Babcock H P, Zhuang X 2012 *Nat. Methods* **9** 185
- [4] Göttfert F, Wurm C A, Mueller V, Berning S, Cordes V C, Honigsmann A, Hell S W 2013 *Biophys. J.* **105** L01
- [5] Doherty M W, Manson N B, Delaney P, Jelezko F, Wrachtrup J, Hollenberg L C 2013 *Phys. Rep.* **528** 1
- [6] Dutt M G, Childress L, Jiang L, Togan E, Maze J, Jelezko F, Zibrov A, Hemmer P, Lukin M 2007 *Science* **316** 1312
- [7] Waldherr G, Wang Y, Zaiser S, et al. 2014 *Nature* **506** 204
- [8] Ruf M, Wan N H, Choi H, Englund D, Hanson R 2021 *J. Appl. Phys.* **130** 070901
- [9] Degen C L, Reinhard F, Cappellaro P 2017 *Rev. Mod. Phys.* **89** 035002
- [10] Barry J F, Schloss J M, Bauch E, Turner M J, Hart C A, Pham L M, Walsworth R L 2020 *Rev. Mod. Phys.* **92** 015004
- [11] Mitchell M W, Alvarez S P 2020 *Rev. Mod. Phys.* **92** 021001
- [12] Balasubramanian G, Chan I, Kolesov R, et al. 2008 *Nature* **455** 648
- [13] Maze J R, Stanwix P L, Hodges J S, et al. 2008 *Nature* **455** 644
- [14] Shi F, Zhang Q, Wang P, et al. 2015 *Science* **347** 1135
- [15] Lovchinsky I, Sushkov A, Urbach E, et al. 2016 *Science* **351** 836
- [16] Dolde F, Fedder H, Doherty M W, et al. 2011 *Nat. Phys.* **7** 459
- [17] Barson M S, Peddibhotla P, Ovartchaiyapong P, et al. 2017 *Nano Lett.* **17** 1496
- [18] Kucsko G, Maurer P C, Yao N Y, Kubo M, Noh H J, Lo P K, Park H, Lukin M D 2013 *Nature* **500** 54
- [19] Dolde F, Doherty M W, Michl J, et al. 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 097603
- [20] Barry J F, Turner M J, Schloss J M, Glenn D R, Song Y,

- Lukin M D, Park H, Walsworth R L 2016 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **113** 14133
- [21] Choi J, Zhou H, Landig R, et al. 2020 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **117** 14636
- [22] Fujiwara M, Sun S, Dohms A, et al. 2020 *Sci. Adv.* **6** eaba9636
- [23] Rondin L, Tetienne J P, Hingant T, Roch J F, Maletinsky P, Jacques V 2014 *Rep. Prog. Phys.* **77** 056503
- [24] Shi F, Kong F, Zhao P, et al. 2018 *Nat. Methods* **15** 697
- [25] Zheng H, Xu J, Iwata G Z, et al. 2019 *Phys. Rev. Appl.* **11** 064068
- [26] Kong F, Zhao P, Ye X, Wang Z, Qin Z, Yu P, Su J, Shi F, Du J 2018 *Nat. Commun.* **9** 1563
- [27] Kong F, Zhao P, Yu P, Qin Z, Huang Z, Wang Z, Wang M, Shi F, Du J 2020 *Sci. Adv.* **6** eaaz8244
- [28] Li R, Kong F, Zhao P, et al. 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 247701
- [29] Doherty M W, Manson N B, Delaney P, Hollenberg L C 2011 *New J. Phys.* **13** 025019
- [30] Gali A, Simon T, Lowther J 2011 *New J. Phys.* **13** 025016
- [31] Batalov A, Zierl C, Gaebel T, Neumann P, Chan I Y, Balasubramanian G, Hemmer P, Jelezko F, Wrachtrup J 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 077401
- [32] Manson N, Harrison J, Sellars M 2006 *Phys. Rev. B* **74** 104303
- [33] Van Oort E, Glasbeek M 1990 *Chem. Phys. Lett.* **168** 529
- [34] Mittiga T, Hsieh S, Zu C, et al. 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 246402
- [35] Broadway D A, Johnson B, Barson M, et al. 2019 *Nano Lett.* **19** 4543
- [36] Hsieh S, Bhattacharyya P, Zu C, et al. 2019 *Science* **366** 1349
- [37] Toyli D M, Charles F, Christle D J, Dobrovitski V V, Awschalom D D 2013 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **110** 8417
- [38] Wrachtrup J, Finkler A 2016 *J. Magn. Reson.* **269** 225
- [39] Clore G M, Gronenborn A M 1991 *Science* **252** 1390
- [40] Borbat P, Costa-Filho A, Earle K, Moscicki J, Freed J 2001 *Science* **291** 266
- [41] Sarkar R, Ahuja P, Vasos P R, Bodenhausen G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 053001
- [42] Harty T, Allcock D, Ballance C J, Guidoni L, Janacek H, Linke N, Stacey D, Lucas D 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 220501
- [43] Wolfowicz G, Tyryshkin A M, George R E, Riemann H, Abrosimov N V, Becker P, Pohl H J, Thewalt M L, Lyon S A, Morton J J 2013 *Nat. Nanotechnol.* **8** 561
- [44] Emondts M, Ledbetter M P, Pustelny S, Theis T, Patton B, Blanchard J W, Butler M C, Budker D, Pines A 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 077601
- [45] McConnell H, Thompson D, Fessenden R W 1959 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **45** 1600
- [46] Cole T, Kushida T, Heller H C 1963 *J. Chem. Phys.* **38** 2915
- [47] Erickson L E 1966 *Phys. Rev.* **143** 295
- [48] Neumann P, Kolesov R, Naydenov B, et al. 2010 *Nat. Phys.* **6** 249
- [49] Belthangady C, Bar-Gill N, Pham L M, Arai K, Le Sage D, Cappellaro P, Walsworth R L 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 157601
- [50] Hartmann S, Hahn E 1962 *Phys. Rev.* **128** 2042
- [51] Tamarat P, Gaebel T, Rabeau J, et al. 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 083002
- [52] Acosta V, Santori C, Faraon A, et al. 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 206401
- [53] Bian K, Zheng W, Zeng X, Chen X, Stöhr R, Denisenko A, Yang S, Wrachtrup J, Jiang Y 2021 *Nat. Commun.* **12** 2457
- [54] Xu X, Wang Z, Duan C, et al. 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 070502
- [55] Broadway D A, Dotschuk N, Tsai A, et al. 2018 *Nat. Electron.* **1** 502
- [56] Jiang M, Wu T, Blanchard J W, Feng G, Peng X, Budker D 2018 *Sci. Adv.* **4** eaar6327
- [57] Gross I, Akhtar W, Garcia V, et al. 2017 *Nature* **549** 252
- [58] Cheong S W, Mostovoy M 2007 *Nat. Mater.* **6** 13
- [59] Oberg L M, de Vries M O, Hanlon L, Strazdins K, Barson M S, Doherty M, Wrachtrup J 2020 *Phys. Rev. Appl.* **14** 014085
- [60] Ofori-Okai B, Pezzagna S, Chang K, Loretz M, Schirhagl R, Tao Y, Moores B, Groot-Berning K, Meijer J, Degen C 2012 *Phys. Rev. B* **86** 081406
- [61] Sangtawesin S, Dwyer B L, Srinivasan S, et al. 2019 *Phys. Rev. X* **9** 031052

SPECIAL TOPIC—Quantum computation and quantum information

Nanoscale zero-field detection based on single solid-state spins in diamond*

Zhao Peng-Ju¹⁾²⁾³⁾ Kong Fei¹⁾²⁾³⁾ Li Rui¹⁾²⁾³⁾Shi Fa-Zhan¹⁾²⁾³⁾† Du Jiang-Feng¹⁾²⁾³⁾

1) (CAS Key Laboratory of Microscale Magnetic Resonance, Department of Modern Physics,
University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

2) (Hefei National Laboratory for Physical Sciences at the Microscale, University of
Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

3) (Synergetic Innovation Center of Quantum Information and Quantum Physics,
University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

(Received 23 July 2021; revised manuscript received 6 September 2021)

Abstract

Characterizing the properties of matter at a single-molecule level is highly significant in today's science, such as biology, chemistry, and materials science. The advent of generalized nanoscale sensors promises to achieve a long-term goal of material science, which is the analysis of single-molecule structures in ambient environments. In recent years, the nitrogen-vacancy (NV) color centers in diamond as solid-state spins have gradually developed as nanoscale sensors with both high spatial resolution and high detection sensitivity. Owing to the nondestructive and non-invasive properties, the NV color centers have excellent performance in single-molecule measurements. So far, the NV centers have achieved high sensitivity in the detection of many physical quantities such as magnetic field, electric field, and temperature, showing their potential applications in versatile quantum sensors. The combination with the cross measurements from multiple perspectives is conducive to deepening the knowledge and understanding the new substances, materials, and phenomena. Starting from the microstructure of NV sensors, several detections under the special magnetic field condition of zero field, including zero-field paramagnetic resonance detection and electric field detection, are introduced in this work.

Keywords: nitrogen-vacancy color center, single spin, zero-field paramagnetic resonance, electric field detection

PACS: 33.35.+r, 07.55.Ge, 07.50.Ls, 03.65.-w

DOI: 10.7498/aps.70.20211363

* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant Nos. 2018YFA0306600, 2016YFA0502400), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 81788101, T2125011, 31971156), the Chinese Academy of Sciences (Grant Nos. GJJSTD20170001, QYZDY-SSW-SLH004, YIPA2015370), the Initiative in Quantum Information Technologies of Anhui Province, China (Grant No. AHY050000), and the USTC Research Funds of the Double First-Class Initiative, China (Grant No. YD2340002004).

† Corresponding author. E-mail: fzshi@ustc.edu.cn

硅和锗量子计算材料研究进展

张结印 高飞 张建军

Research progress of silicon and germanium quantum computing materials

Zhang Jie-Yin Gao Fei Zhang Jian-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 217802 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211492

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211492>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

CdS/CdS_{0.48}Se_{0.52}轴向异质结纳米线的非对称光波导及双波长激射

Asymmetric waveguide and the dual-wavelength stimulated emission for CdS/CdS_{0.48}Se_{0.52} axial nanowire heterostructures

物理学报. 2017, 66(6): 064204 <https://doi.org/10.7498/aps.66.064204>

直拉硅单晶的机械强度: 锗和氮共掺杂的效应

Mechanical strength of Czochralski silicon crystal: Effects of co-doping germanium and nitrogen

物理学报. 2021, 70(9): 098101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201803>

核磁共振量子信息处理研究的新进展

New research progress of nuclear magnetic resonance quantum information processing

物理学报. 2018, 67(22): 220301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180754>

磷、铋掺杂半导体锗光学性质的第一性原理研究

First-principles study of optical properties of germanium doped with phosphorus and bismuth

物理学报. 2018, 67(13): 136101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172680>

金刚石氮空位中心自旋量子调控

Quantum control of nitrogen-vacancy center in diamond

物理学报. 2018, 67(12): 120302 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180755>

基于奇异值分解的矩阵低秩近似量子算法

Matrix low-rank approximate quantum algorithm based on singular value decomposition

物理学报. 2021, 70(15): 150201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210411>

专题: 量子计算与量子信息

硅和锗量子计算材料研究进展*

张结印 高飞 张建军†

(中国科学院物理研究所, 纳米物理与器件重点实验室, 北京 100190)

(2021 年 8 月 12 日收到; 2021 年 9 月 23 日收到修改稿)

半导体量子点量子计算是实现固态量子计算的重要途径之一, 高质量量子计算材料制备是其中的关键. 硅和锗材料能够实现无核自旋的同位素纯化, 满足量子比特对长退相干时间的要求, 同时与当前的硅工艺兼容, 是实现半导体量子计算的重要材料平台. 本文首先概述了近年来半导体量子点量子计算领域取得的重要进展, 然后详细介绍了硅基硅/硅锗异质结、锗/硅锗异质结以及锗/硅一维线的制备方法、材料性质以及相应量子器件的研究进展, 最后对需要解决的关键技术问题以及未来的发展方向进行了展望.

关键词: 硅, 锗, 异质结, 纳米线, 量子计算**PACS:** 78.40.Fy, 81.07.St, 81.07.Vb, 73.43.-f**DOI:** 10.7498/aps.70.20211492

1 引言

1982 年, 物理学家理查德·费曼首次提出了量子计算的概念, 经过近 40 年的发展, 科学家们已经提出了多种可能实现量子计算的物理体系, 包括半导体量子点^[1]、超导约瑟夫森结^[2]、拓扑超导^[3]、离子阱^[4]以及核磁共振^[5]等. 其中基于半导体量子点的量子计算因为具有与硅半导体集成电路工艺兼容的优势而备受关注. 一方面, 与硅工艺兼容使得它易于大规模集成, 在产业化阶段具有易移植和可扩展的优势; 另一方面, 在可大规模生产的全固态、芯片化的量子计算方案中, 半导体量子点量子计算的各个方面均可满足 Loss 和 DiVincenzo^[6]提出的实现量子计算的物理系统需要满足的 5 个重要条件, 且能在相对较高的温度下工作. 因此, 半导体量子点被认为是最有希望实现固态量子计算机的物理体系之一.

早期半导体量子点量子计算研究主要集中在 III/V 族材料体系, 包括 GaAs 量子点^[7-9]、InAs

纳米线^[10]以及 InSb 纳米线^[11]. 该体系主要利用电子自旋进行比特编码, 目前已经实现了电子自旋的操控^[7]和读出^[12]. 实现量子计算机的一个重要前提是要求量子比特具有长的量子退相干时间, 但是 III/V 族材料存在核自旋引起的超精细相互作用, 例如 GaAs/AlGaAs 异质结栅控量子点中每个电子会受到约 10^6 个核自旋的影响^[7], 导致退相干时间较短. 目前 GaAs/AlGaAs 异质结栅控量子点的退相干时间约为 60 ns, InAs 和 InSb 纳米线量子点的退相干时间仅为 10 ns, 这就极大地限制了 III/V 族材料在半导体量子点量子计算领域的应用.

得益于 IV 族 Si, Ge 材料与成熟硅工艺兼容且可以通过同位素纯化获得无核自旋的 ^{28}Si 和 ^{72}Ge , 近年来 IV 族材料量子点量子计算的研究得到了迅速发展. IV 族材料体系主要包括 Si 金属氧化物半导体 (MOS)^[13]、Si/SiGe 异质结^[14]、Si 纳米线^[15,16]、单原子掺杂的 Si 材料^[17]、Ge/SiGe 异质结^[18]以及 Ge 量子线^[19,20]等. 在 Si 材料中主要利用电子的自旋进行比特的编码, 目前已经实现了单比特^[21,22]、

* 国家重点研发计划 (批准号: 2016YFA0301701) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jjzhang@iphy.ac.cn

两比特^[23]和三比特 Greenberger-Horne-Zeilinger 态^[24]的操控以及两比特之间的远距离通信^[25]. 基于 Si/SiGe 异质结^[26]和天然 Si MOS 量子点^[27]的电子自旋量子比特退相干时间达到了约 2 μs . 使用了同位素纯化 ^{28}Si 材料 (^{29}Si 含量小于 800×10^{-6}) 的量子比特, 由于大幅降低了核自旋的影响, 其退相干时间可达到 120 μs ^[28]. 此外, 2020 年, 来自新南威尔士大学的 Dzurak 小组^[29]和代尔夫特理工大学的 Veldhorst 小组^[30]几乎同时在 ^{28}Si 中实现了能在大于 1 K 温度下运行的“高温”量子比特, 克服了实现通用量子计算机最困难的障碍之一. 基于单原子掺杂的 Si 材料制备的量子比特主要利用核自旋进行比特编码, 由于其在退相干时间以及可扩展性等方面存在巨大优势而被广泛关注^[31–33], 例如在 P 掺杂的同位素 ^{28}Si 材料中, P 原子核自旋的退相干时间可超过 30 s^[34], 其单比特门操控保真度可达到 99.99%^[35], 也在 P 掺杂的自然 Si 材料中实现了两比特交换门, 其单电子自旋读出保真度可达到 94%^[36]. 在 Ge 材料中主要利用空穴自旋进行比特的编码, 目前在 Ge 量子线中实现了空穴量子比特^[20], 其退相干时间约为 130 ns; 也实现了拉比频率高达 540 MHz 的超快操控速度量子比特^[37]. 在 Ge/SiGe 异质结空穴气中实现了两比特逻辑门^[38]和四比特量子处理器^[18].

半导体量子点量子计算的快速发展得益于材料制备技术的不断发展. 近年的重要进展包括二维 Ge/SiGe 平面异质结迁移率达到 $10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[39,40], 一维 Ge/Si 量子线新生长模式的发现^[41]以及晶圆级可控生长^[42]等. 本文将分别详细介绍 Si 和 Ge 量子计算材料的研究进展. 其中, Si 材料主要介绍 Si 纳米线、Si/SiGe 异质结, Ge 材料主要介绍 Ge/SiGe 异质结、Si/Ge 核/壳纳米线以及 Ge 棚屋型量子线.

2 硅量子计算材料研究进展

2.1 Si 纳米线

一维 Si 纳米线主要通过自上而下的纳米加工技术和自下而上的化学气相沉积 (CVD) 方法生长. 纳米加工技术一般是通过刻蚀绝缘体上硅 (SOI) 衬底上的 Si 薄膜 (薄膜厚度小于 50 nm) 得到一维 Si 纳米线^[43], 可以利用多晶硅作为栅电极在纳米线方向形成势垒, 可在 Si 纳米线中形成单量子

点, 观测到库仑振荡现象^[16,44,45], 也可以在 Si 纳米线中形成双量子点结构, 观察到泡利自旋阻塞现象^[46]. CVD 法主要利用气-液-固生长机制 (其原理在后文有详细描述), 可制备直径为 6–20 nm 且长度为 1–30 μm 的 Si 纳米线^[47], 也可对纳米线进行 n 型和 p 型掺杂, 例如 Lieber 研究小组^[15]就制备出了轴向调制掺杂的 Si 纳米线, 在 1.5 K 下观察到了单电子隧穿效应.

2.2 Si/SiGe 异质结

二维电子气的实现主要有 Si MOS 和 Si/SiGe 两种结构. 通常实验上通过测量低温霍尔迁移率来判断二维电子气质量的优劣. 影响迁移率高低材料界面质量、均匀性, 以及内部背景杂质和缺陷等因素对量子点器件的性能会造成影响. 一般而言, 相同结构情况下更高的迁移率表明载流子受到的散射少, 二维电子气系统更“纯净”, 量子点受到的背景噪音少; 均匀性高更有助于后续的量子点器件集成. 对于 Si MOS 结构, 通过高温热氧化的方式在 Si (001) 表面形成高质量的 SiO_2 层, 在界面区域限制电子形成二维电子气. 目前该结构的电子迁移率可达到 1×10^4 – $4 \times 10^4 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[48,49].

Si/SiGe 异质结材料研究方面, 根据掺杂与否, 分为掺杂型 Si/SiGe 异质结和非掺杂型 Si/SiGe 异质结. 随着对 Si/SiGe 异质结材料研究的深入, 考虑载流子散射因素, 研究工作经历了多个阶段 (图 1(a)), 早期的设计从固定 SiGe 薄膜中 Ge 含量的方式到组分缓渐变的生长方法来优化 SiGe 缓冲层的质量, Fitzgerald 研究小组和 Schaffler 等同一时期通过分子束外延技术获得的薄膜峰值迁移率达到 $1.7 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[50,51]; 通过优化应变硅层厚度和 Si/SiGe 界面来降低位错和界面粗糙度对电子的散射, 峰值迁移率达到 $8 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[52]; 此后, 通过移除掺杂层、优化间隔层厚度和采用 SiO 取代 Al_2O_3 降低远端电荷散射, 二维电子气低温迁移率达到了 $2.4 \times 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[53]. 下面详细介绍基于 Si/SiGe 异质结的二维电子气的研究进展.

1985 年 Abstreiter 等^[54]首先利用分子束外延技术基于掺杂型 Si/SiGe 异质结实现了 II 型能带配置, Si 处于张应变, 在此硅量子阱中限制电子形成二维电子气. 基于 Shubnikov-de Hass 振荡和回旋共振实验证明应变硅中六重简并的导带底分裂

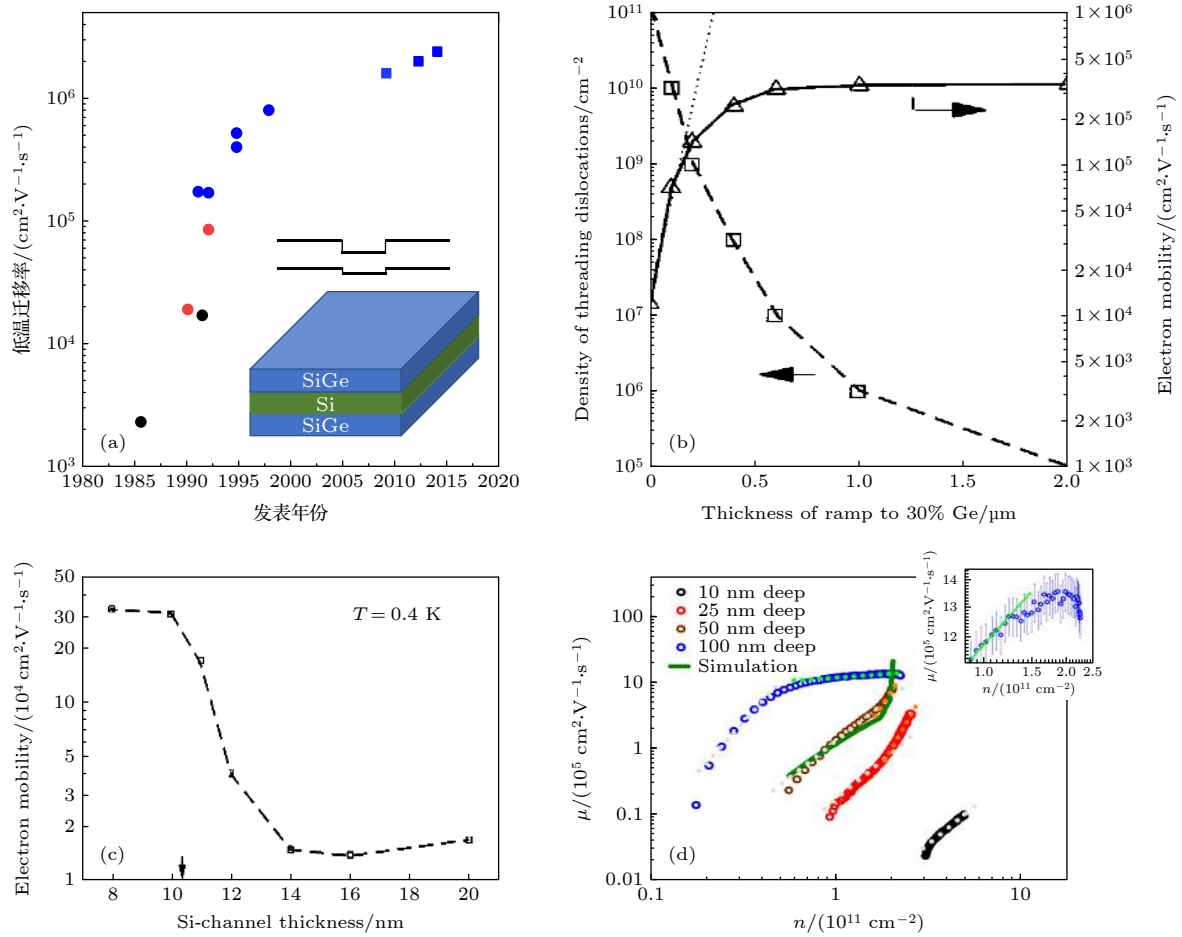


图 1 (a) Si/SiGe 异质结二维电子气低温霍尔峰值迁移率的发展, 其中实心圆圈和实心方块分别代表掺杂型结构和非掺杂型结构; 黑色、红色和蓝色分别代表 SiGe 缓冲层固定锗含量、Si/SiGe 超晶格和组分渐变等 3 种不同生长方法; 插图是 SiGe/Si/SiGe 异质结结构和能带结构对准示意图; (b) 穿透位错密度对电子迁移率的影响^[64]; (c) 应变硅层厚度对电子低温峰值迁移率的影响^[64]; (d) SiGe 间隔层厚度对电子迁移率的影响^[68]

Fig. 1. (a) Mobility of Si two-dimensional electron gas with time. Solid squares and circles refer to undoped structure and doped structure, respectively. The black, red and blue color refer to three different growth methods (constant Ge composition, Si/SiGe superlattice and the graded Ge composition). Inset images show the SiGe/Si/SiGe heterostructures and the schematic band-edge profile. (b) Effect of threading dislocations on electron mobility^[64]. (c) Effect of Si-channel thickness on electron mobility^[64]. (d) Effect of the spacer layer thickness on electron mobility^[68].

成垂直表面的两重简并态 Δ_2 和平行表面的四重简并态 Δ_4 , 增大应变会增强 Δ_2 和 Δ_4 的分裂. Δ_2 能谷平行于表面方向, 电子有效质量为 $m_t^* = 0.19m_0$ (m_0 为真空中电子质量), 增强了硅中二维电子气迁移率. 然而该应变硅在 2 K 时, 迁移率只有 $2300 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$, 增强的效应不大. 主要原因在于早期的 Si/SiGe 异质结是基于硅衬底上固定 Ge 组分的生长方式获得的, SiGe 缓冲层薄膜质量不高. 对于典型的 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 缓冲层, 同 Si 之间存在 1.2% 的晶格失配, 会造成密度在 10^8 — 10^{10} cm^{-2} 量级的穿透位错^[55]. 穿透位错贯穿到应变硅层, 形成散射中心, 大幅降低载流子迁移率. 基于固定 Ge 组分的 SiGe 缓冲层生长方式, 文献报道迁移率最高值

仅 $1.69 \times 10^4 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ ^[56].

为了提高 SiGe 缓冲层质量, 后续不同研究组提出了两种方法. IBM 实验室利用超高真空化学气相沉积 (UHV-CVD) 生长技术外延生长 Si/SiGe 超晶格的方案^[57,58], 将穿透位错密度降低到 10^7 cm^{-2} , 二维电子气低温迁移率提高到 $8.5 \times 10^4 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ ^[58]. 另一种方法是锗组分渐变的方法. AT&T 贝尔实验室采用分子束外延生长厚的锗组分渐变层^[59,60], 逐渐增加 Ge 的含量到 0.3, 电子束感应电流表征结果显示 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 缓冲层穿透位错密度降低到 10^6 cm^{-2} , 4.2 K 时二维电子气迁移率提升到 0.96×10^5 — $1.26 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$. 经过生长条件的进一步优化, Ge 组分渐变速率不大于每

微米 10%, Fitzgerald 研究小组和 Schaffler 等同时通过分子束外延技术将二维电子气迁移率的记录提升到约 $1.7 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ [50,51]. 采用 Ge 组分渐变方法得到的二维电子气迁移率之所以更高, 主要得益于高质量的 SiGe 缓冲层可以有效降低穿透位错密度. 此外, 实验显示生长过程中采用高温且组分缓渐变的方法, 能增大已经产生的失配位错滑移速率以释放晶体内部积累的应变能, 同时可以避免因渐变过快而产生新的失配位错 [61].

1994 年, Ismail 等 [62] 优化应变硅量子阱的厚度, 避免在量子阱层产生新的失配位错, 同时减少缓冲层穿透位错在量子阱层的滑移, 防止在 Si/SiGe 缓冲层的界面形成失配位错的排列, 将掺杂型 Si/SiGe 异质结二维电子气的迁移率记录提高到 $4 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 背栅结构器件在 0.4 K 时的迁移率达到 $5.3 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. 同年, Ismail 等 [63] 将顶栅结构器件记录提高至 $5.2 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. 1996 年, Ismail [64] 总结了穿透位错和量子阱厚度对迁移率的影响, 见图 1(b) 和图 1(c), 表明了厚的渐变层对于获得低穿透位错密度的缓冲层和合适量子阱厚度的重要性. 1998 年, 日本的 Sugii 等 [52] 采用固相外延的方式实现了二维电子气峰值迁移率在 15 K 时达到 $8 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 高分辨透射电子显微镜表征显示样品具有非常陡峭的 Si/SiGe 界面.

2005 年 Lai 等 [65] 的研究结果显示原子层沉积生长的 Al_2O_3 作为二维电子气材料的介电层, 可有效减少器件中的低频电荷噪声 [43], 通过变化栅偏压可有效调控二维电子气浓度. 2009 年, Lu 等 [66] 对非掺杂型结构进行优化, 利用超高真空化学气相沉积, 通过 Ge 组分缓渐变的方式生长 $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 的渐变层后生长 1 μm 的固定 Ge 组分的恒量层, 得到高质量的 $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 薄膜, 然后生长 15 nm 硅量子阱, 65 nm 硅锗间隔层和 1 nm 硅盖层. 在载流子浓度为 $2.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 时, 0.3 K 下二维电子气迁移率达到 $1.6 \times 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. 2012 年, Tsui 研究小组 [67] 通过降低 SiGe 缓冲层中锗的含量到 0.14, 在间隔层达到 526 nm 时, 0.3 K 下二维电子气迁移率峰值达到 $2 \times 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. 2015 年, Laroche 等 [68] 比较了不同间隔层厚度对电子气迁移率的影响, 分析了不同结构的散射机制 (图 1(d)), 结果表明可获得的最低载流子浓度随着间隔层厚度的减少而增大, 且比较适合纳米器件的间隔层厚

度为 25—50 nm, 可避免“remote scattering”的影响. 2015 年, 俄罗斯研究小组 Melnikov 等 [53] 利用热蒸发的 SiO 取代原子层沉积生长的 Al_2O_3 , 获得了质量更好的氧化物/半导体界面, 将二维电子气低温迁移率提高到目前最高值 $2.4 \times 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. 为研究背景杂质散射, 2015 年, Petta 研究小组 [69] 比较了 26 种不同结构的 Si/SiGe 异质结, 利用二次离子质谱测定结构中的氧含量, 发现背景氧含量和峰值迁移率之间呈现强的相关性. 表明在 Si/SiGe 生长过程中, 背景中可能引入的杂质是影响迁移率的关键. 值得注意的是, 虽然二维电子气迁移率达到百万量级, 实际上的百万量级的霍尔器件结构中, 锗的含量低于 0.2, 同时间隔层厚度大于 60 nm, 不利于表面栅极对电子气的调控. 常见的半导体量子点量子比特器件所用的锗含量一般为 0.25—0.3, 间隔层厚度一般在 30—50 nm.

对于 Si/SiGe 材料体系, 界面粗糙度不仅影响材料的迁移率, 界面存在的高密度原子台阶还会影响谷-轨道耦合, 抑制谷劈裂 [70–72]. 早期从 Hall bar 器件中提取的谷劈裂能量为 μeV 量级 [73–76], 器件尺寸缩小至 QPCs (quantum point contacts) [77] 和量子点器件 [78–80] 时, 谷劈裂能量可达到 1 meV 量级. 对于自旋量子比特, 需要大的谷劈裂能, 可在高磁场下调控量子点器件. 材料上需要采用无斜切的衬底, 避免高密度的原子台阶产生, 甚至预期制备无原子台阶的 Si/SiGe 界面.

量子点量子比特性质的提高不仅取决于材料结构的优化, 还有材料自身的影响. 在前期研究基础上, 将自然的 Si 材料替换成同位素提纯的 ^{28}Si 材料, 降低核自旋对电子自旋的噪音, 可以大幅提高比特退相干时间. 2014 年和 2015 年, Veldhorst 等 [23,28] 基于 ^{28}Si MOS 结构, 利用电子自旋共振操控实现量子比特退相干时间达到 120 μs , 相干时间达到 28 ms. 普通的 Si MOS 结构中退相干时间的最高记录值为 2020 年基于电偶极自旋共振操控实现的 18.1 μs [81]. 2018 年, 日本 Tarucha 研究小组 [21] 基于 $^{28}\text{Si}/\text{SiGe}$ 异质结量子点, 使电子自旋比特退相干时间达到了 20 μs , 保真度超过 99.9%. 2020 年, 德国 Struck 等 [82] 同样基于 $^{28}\text{Si}/\text{SiGe}$ 异质结材料, 使电子自旋比特退相干时间达到了 21 μs . 普通的 Si/SiGe 异质结材料中电子自旋比特退相干时间最高记录值是 2016 年 Tarucha 课题组 [27] 实现的 1.8 μs . 截止到目前, 对于 Si MOS

结构和 Si/SiGe 两种结构, 基于同位素提纯材料的器件相对未提纯材料的器件均提高了量子比特的退相干时间记录值^[83].

3 锗量子计算材料研究进展

Si 由于存在高质量且稳定的 SiO₂ 介电层而成为了微电子领域的基石, 但是随着材料制备技术的发展, 制备出了能够与 Ge 兼容的高介电常数的介电层, 且实现了 Ge 材料在 Si 衬底上的高质量外延生长, 同时在室温下体材料 Ge 具有已知半导体中最高空穴迁移率, 因此 Ge 或者 SiGe 成为了后摩尔时代可能替代 Si 的热点沟道材料.

此外, Ge 材料在量子计算领域也因其独特的优势而倍受关注^[84]. 一方面, Ge 具有高的空穴迁移率和小有效质量^[85], 为实现高质量的量子点提供了基础. 另一方面, 它具有大的 g 因子以及强的自旋-轨道耦合相互作用^[86,87], 且 g 因子可调^[88], 可以对自旋进行快速的全电学操控. 而且, Ge 材料利用空穴自旋进行比特的编码, 与电子相比, 空穴的 p 轨道与原子核的轨道交叠较小^[89], 由核自旋引起的超精细相互作用低, 也可以实现无核自旋的同位素纯化的 ⁷²Ge, 使得 Ge 空穴自旋量子比特可以具有长的退相干时间. 在器件制备方面, Ge 能够与当前的 Si 工艺兼容; 并且几乎所有的金属在与 Ge 接触时, 都能够使费米能级钉扎在价带处附近, 因此都能够与 Ge 形成良好的欧姆接触^[90]; 同时, 在 Ge 上也能够生长高质量且具有高介电常数的介电层, 有利于高性能器件制备及集成. 基于以上诸多优点, Ge 成为了实现半导体量子点量子计算的理想材料. 近年来, 从二维的 Ge/SiGe 异质结薄膜到一维的 Ge 纳米线制备技术都在不断发展, 并取得了一系列重要突破.

3.1 Ge/SiGe 异质结

Ge/SiGe 异质结中, 压应变的锗和弛豫的硅锗层, 形成 I 型能带, Ge 量子阱中限制了空穴, 应变使价带顶轻重空穴发生分裂, 导致空穴有效质量减少, 增强了 Ge 中空穴的迁移率. 如图 2(a) 所示, Ge/SiGe 异质结材料的发展主要经历了 4 个阶段^[84]. 前 3 个阶段主要是研究掺杂型结构, 后续研究集中在非掺杂型结构. Ge/SiGe 异质结所用 SiGe 缓冲层经历了锗衬底上固定 Ge 含量的生长

方法, Si 衬底上 Ge 组分缓渐变增大和 Si 衬底上先生长 Ge 薄膜再通过 Ge 组分减少的逆组分渐变方法 3 个阶段.

1988 年, Wagner 和 Janocko^[91] 利用分子束外延技术在 Ge 衬底上生长固定 Ge 组分的 Si_{0.5}Ge_{0.5} 缓冲层, 再构造掺杂型的 Si_{0.5}Ge_{0.5}/Ge 异质结形成二维空穴气, 4.2 K 时空穴迁移率为 3200 cm²/(V·s). 1990 年, Murakami 等^[92] 同样基于分子束外延在 Ge 衬底上生长 200—500 nm 固定 Ge 含量的 Si_{0.25}Ge_{0.75} 缓冲层, 然后外延 Ge/Si_{0.25}Ge_{0.75} 异质结, 77 K 时, 二维空穴气迁移率达到 4500 cm²/(V·s). 1991 年, Murakami 等^[93] 基于相同结构, 将二维空穴气低温迁移率优化到 9000 cm²/(V·s). 然而, 该时期基于 Ge 衬底上固定 Ge 含量的生长方法获得的 SiGe 缓冲层存在大量缺陷, 如图 2(b) 所示, 截面透射电子显微镜 (TEM) 表征可以看到明显堆垛层错面缺陷的存在^[92]. 缓冲层中大量的缺陷贯穿到 Ge 量子阱中, 使得基于该生长方法实现的二维空穴气迁移率没有突破 10⁴ cm²/(V·s) 量级.

为了提高 SiGe 缓冲层的质量, 各研究小组采用在 Si 衬底上组分渐变的方法生长高 Ge 含量的 SiGe 缓冲层. 贝尔实验室 Xie 等^[94] 利用分子束外延在 Si 衬底上渐变生长外延弛豫的 Si_{0.4}Ge_{0.6} 薄膜, 基于该薄膜生长调制掺杂的 Ge 空穴气结构, 4.2 K 时迁移率可以达到 5.5×10^4 cm²/(V·s). 2002 年, 意大利 von Kanel 研究小组^[95] 利用等离子体增强化学气相沉积按照 10%/μm 的渐变速率生长 7 μm 的渐变层和 1 μm 的 Si_{0.3}Ge_{0.7} 薄膜, 利用腐蚀坑密度的方法评估该薄膜的穿透位错密度约为 2×10^6 cm⁻². 基于此弛豫的 SiGe 缓冲层得到的二维空穴气在 4.2 K 时迁移率达到了 8.7×10^4 cm²/(V·s). 2004 年, von Kanel 课题组^[96] 进一步降低缓冲层渐变速率至 7%/μm, 得到的二维空穴气在 2 K 时迁移率达到 1.2×10^5 cm²/(V·s).

2008 年, 英国 Shah 等^[97] 提出了逆组分渐变的方法生长高质量的 SiGe 缓冲层. 利用减压化学气相沉积 (RPCVD) 生长技术, 首先通过低温加高温两步法在 Si 上外延生长穿透位错密度低于 5×10^7 cm⁻² 的 Ge 薄膜, 然后逐渐减少 Ge 的含量到 0.8, 最后生长固定 Ge 含量的 Si_{0.2}Ge_{0.8} 层. 化学蚀刻法表明该薄膜穿透位错密度为 10⁶ cm⁻², 表面均方根粗糙度为 2.6 nm, 最优值为 1.9 nm, 优于正渐变方法得到的 SiGe 薄膜表面粗糙度^[98]. 基于该

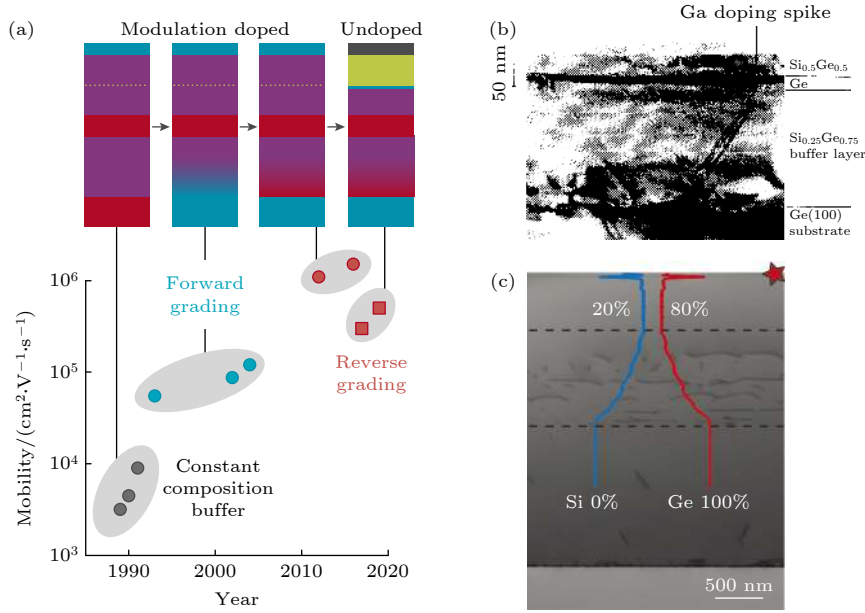


图 2 (a) 不同时期的 Ge/SiGe 异质结二维空穴低温霍尔峰值迁移率, 其中实心圆圈和实心方块分别代表掺杂型结构和非掺杂型结构; 黑色、蓝色和红色分别代表 SiGe 缓冲层固定锗含量、组分正渐变和组分逆渐变等 3 种不同生长方法^[84]; (b) Ge 衬底上固定锗组分生长 SiGe 缓冲层的截面 TEM, 可看到在缓冲层及量子阱层产生大量堆垛层错^[92]; (c) Si 衬底上锗组分逆渐变方法生长的 Ge/SiGe 空穴气结构的截面 TEM 图^[102], 位错主要分布在逆渐变缓冲层

Fig. 2. (a) Improvement of two-dimensional hole gas low temperature Hall mobility of Ge/SiGe heterostructure with time. Solid squares and circles refer to undoped structure and doped structure. The black, blue and red color refer to three different growth methods (the constant Ge composition, forward grading and the reverse grading)^[84]. (b) Cross-sectional TEM of SiGe buffer layer with constant Ge composition on Ge substrate, plenty of stacking faults inside the constant Ge composition buffer layer and Ge quantum well^[92]. (c) Cross-sectional TEM of two-dimensional hole gas obtained by reverse grading method^[102]. Dislocations are mainly localized inside the reverse grading buffer layer.

类型的 SiGe 缓冲层, 2012 年, 该小组制备的调制掺杂型二维空穴气迁移率在 12 K 达到 $1.1 \times 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[39], 2016 年, 他们进一步将调制掺杂型二维空穴气迁移率提高到 $1.5 \times 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[40].

随着对应变 Ge 量子阱中空穴量子比特研究的深入, 实验发现掺杂型结构虽然可以达到百万级别的迁移率, 但是掺杂层容易导致漏电流、寄生通道和电荷噪声^[14,99,100], 因此, 后期对空穴量子比特的研究主要集中在非掺杂型结构上. 2016 年, 中国台湾 Laroche 等^[101]利用快速热化学气相沉积采用逆组分渐变法生长的非掺杂型应变 Ge 量子阱结构, 在空穴浓度为 10^{11} cm^{-2} 量级时, 峰值迁移率达到 $3 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. 2019 年, Sammak 等^[102]基于组分逆渐变法生长 SiGe 缓冲层, 利用 RPCVD 生长的非掺杂型应变锗量子阱结构, 二维空穴迁移率达到了 $5 \times 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 空穴浓度为 $1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. 在空穴浓度比较低时, 迁移率得到提高的原因主要在于 SiGe 缓冲层质量的优化. 如图 2(c) 所示, Si 和 Ge 之间的失配位错主要分布在 Ge/Si 界面区域, 后续渐变的生长方法使得产生的

失配位错在渐变层中滑移, 释放了晶体内部积累的应变能, 同时滑移过程增加了失配位错相互作用并湮灭的概率, 最终提高了 SiGe 缓冲层的质量^[102]. 对于 Ge/SiGe 异质结二维空穴气, 目前还没有同位素纯化材料的相关报道.

3.2 Ge 纳米线

一维 Ge 纳米线的制备技术近年来迅速发展, 已经实现了从非面内生长的 Ge/Si 核/壳纳米线到 Si 衬底上面内无需催化剂生长的棚屋型 Ge 量子线, 最后到 Si 衬底上面内可定位生长的棚屋型 Ge 量子线的可控制备.

Ge/Si 核/壳纳米线主要利用气-液-固 (VLS) 生长机制^[103], 采用 CVD 法制备, 图 3(a) 为其生长过程示意图, 这种方法是利用金属颗粒作为催化剂, 通入气相反应物, 在一定温度下气相反应物与金属颗粒形成共熔合金, 当共熔合金处于过饱和状态时, 会析出晶体形成纳米线. 纳米线的横截面为圆形, 与衬底成一定角度的方向生长, 金属颗粒一直处于纳米线的顶端且会逐渐减小^[104], 其透射电

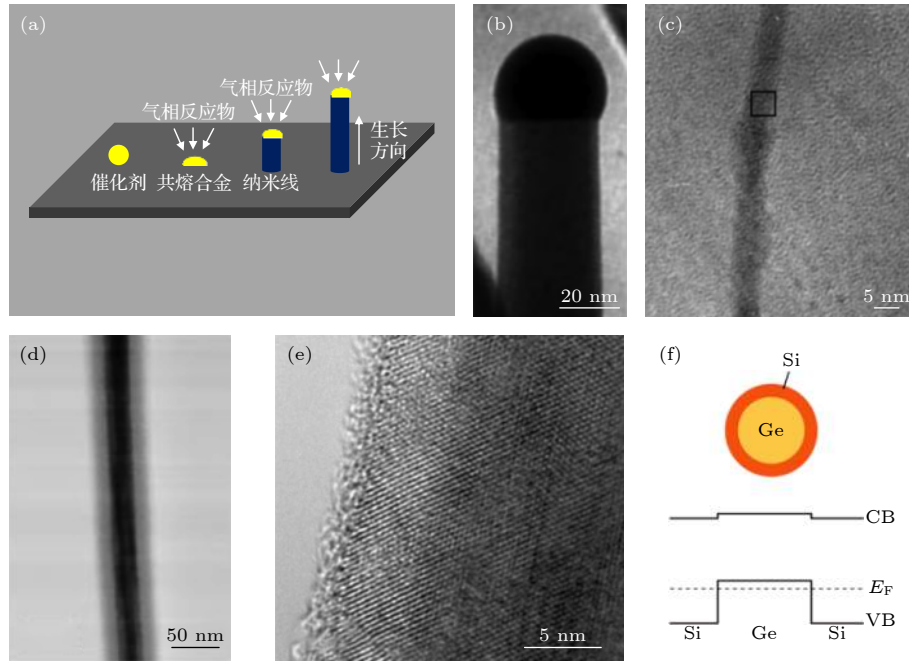


图 3 (a) VLS 方法生长纳米线的示意图; (b) VLS 方法生长的 Ge 纳米线的 TEM 图^[104]; (c) 结合激光烧蚀技术和 VLS 生长方法制备的直径为 (5 ± 0.6) nm 的 Ge 纳米线的 TEM 图^[47]; (d) Ge/Si 核/壳纳米线的 TEM 图, 其中黑色部分为 Ge 核, 浅灰色部分为 Si 壳^[105]; (e) Ge/Si 核/壳纳米线的高分辨 TEM 图, 表明 Si 壳为单晶结构^[105]; (f) Ge/Si 核/壳纳米线的横截面示意图以及能带偏移示意图^[19]

Fig. 3. (a) Schematic diagram of nanowires grown by VLS method; (b) TEM image of Ge nanowire grown by VLS method^[104]; (c) TEM image of Ge nanowires with diameter of (5 ± 0.6) nm prepared by laser ablation method and VLS method^[47]; (d) TEM image of Ge/Si core/shell nanowire with black Ge core and light gray Si shell^[105]; (e) high resolution TEM image of Ge/Si core/shell nanowire showing a crystalline Si shell^[105]; (f) schematic diagram of cross-section image and energy band offset of Ge/Si core/shell nanowire^[19].

子显微镜 (TEM) 图如图 3(b) 所示. 由于金属颗粒的直径决定了纳米线的直径, 而最初金属颗粒受到制备工艺的限制, 直径一般在 100 nm 以上. 1998 年, Morales 和 Lieber^[47] 采用激光烧蚀技术降低了金属颗粒的直径, 实现了直径最小达 5 nm 的 Ge 纳米线的制备, 如图 3(c) 所示. 2002 年, Lieber 研究小组^[105] 又基于上述生长方法实现了 Ge/Si 核/壳纳米线的制备. 如图 3(d) 所示, Ge 核的直径为 26 nm, 通过图 3(e) 的高分辨 TEM 图可知, Si 壳和 Ge 核全部为单晶结构, 其横截面示意图以及能级结构如图 3(f) 所示, Si 壳和 Ge 核的价带能级差为 0.5 eV, Ge 空穴被限制在 Ge 核内, 空穴迁移率约为 $1000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[19]. 理论和实验研究表明, Ge/Si 核/壳纳米线具有可调节的强自旋-轨道耦合相互作用^[86,106], 朗德 g 因子约为 2^[107], 基于 Ge/Si 核/壳纳米线制备的双量子点器件也表现出良好的特性, 实现了电场对两个量子点隧穿耦合强度的调控^[108], 自旋弛豫时间可达 0.6 ms^[109], 退相干时间可达 180 ns^[110].

虽然 Ge/Si 核/壳纳米线得到了广泛研究, 但是它仍存在着两个困难. 首先, 纳米线沿着非面内的方向生长, 需要将纳米线转移到 Si 或 SOI 等衬底上进行器件制备^[111], 增加了器件加工的难度, 且很难大规模集成; 其次, VLS 生长需采用金属颗粒作为催化剂, 纳米线中存在金属污染, 影响器件的电学性质^[112]. 以上不利因素制约了 Ge/Si 核/壳纳米线在半导体量子计算领域的进一步发展.

棚屋型 Ge 量子线是利用层状加岛状生长的 Stranki-Krastanow 生长模式^[113], 采用分子束外延生长方法在 Si 衬底上获得的面内 Ge 量子线. 早在 1990 年, Mo 等^[114] 就在 Si(001) 衬底上观察到了长度小于 100 nm 的棚屋型 Ge 岛, 而后 Tersoff 和 Tromp^[115] 预测这种棚屋型 Ge 岛可能延长成为 Ge 量子线. 2012 年, Zhang 等^[41] 在 Si(001) 衬底上通过沉积纯 Ge 层以及退火的方法, 实现了长度可达 2 μm 的 Ge 量子线的外延生长. 他们采用分子束外延生长方法, 在 570 $^\circ\text{C}$ 条件下以 0.06 $\text{\AA}/\text{s}$ 的速率沉积 4.4 个原子层厚度的 Ge 浸润层, 沉积

厚度稍小于 570 °C 时形成三维棚屋型 Ge 岛的临界厚度, 如图 4(a) 的原子力显微镜 (AFM) 图所示, 衬底表面没有形成任何三维结构. 然后将温度降低到 560 °C 并原位退火, 获得如图 4(b) 所示的面内生长的自组装 Ge 量子线. Ge 量子线的表面由 4 个 {105} 晶面组成, 取向沿平面内两个 <100> 方向, 底部为矩形 (图 4(c)), 横截面为三角形 (图 4(d)), 侧壁倾角为 11.3°, 称之为棚屋型量子线. 量子线平均高度约为 1.86 nm, 高宽比为 1:10, 长度可达 2 μm , 即长宽比可达 1000. 此外, 可以通过调节 Ge 层的厚度来调节 Ge 量子线的密度和长度. 另外, 还可以形成如图 4(e) 所示的 L 形 Ge 量子线. 理论计算表明应变状态下的 {105} 晶面具有很低的表面能, 它是棚屋型量子线形成的主要驱动力 [116].

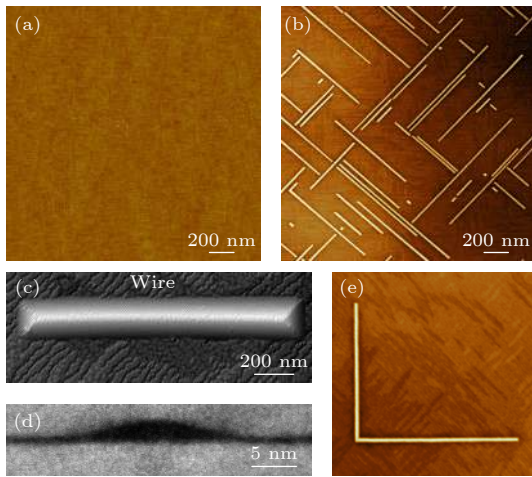


图 4 (a) Si 衬底上沉积 4.4 个 Ge 原子层后的表面 AFM 图; (b) Si 衬底上沉积 Ge 层以及退火之后形成的 Ge 量子线的表面 AFM 图 [41]; (c) 和 (d) 分别是单根 Ge 量子线的扫描隧道显微镜图 [116] 以及横截面 TEM 图 [41]; (e) Si 衬底上 L 形 Ge 量子线结构

Fig. 4. (a) AFM image of Ge wetting layer after the growth of 4.4 monolayer Ge on Si substrate; (b) AFM image of Ge hut wire on Si substrate after the growth of Ge layer with subsequently annealing [41]; (c), (d) scanning tunneling microscope image [116] and cross-sectional TEM image of a Ge hut wire [41]; (e) L-shaped Ge hut wires on Si substrate.

Si(001) 衬底上的棚屋型 Ge 量子线是无催化剂且面内生长的自组装量子线, 与 Ge/Si 核/壳纳米线相比, 避免了金属催化剂导致的金属污染以及纳米线的非面内生长导致的转移问题, 且纳米线直接生长在 Si 衬底上, 与当前的硅工艺兼容, 为后续器件制备带来了便利. 棚屋型 Ge 量子线的横截面为三角形, 与横截面为圆形的 Ge/Si 核/壳纳米线中轻重空穴混合不同, 棚屋型 Ge 量子线中的空穴

几乎全部为重空穴 [88], 轻空穴的含量小于 1%, 而轻重空穴分离有助于退相干时间的延长 [117]. 此外, 棚屋型 Ge 量子线具有大的 g 因子以及强的自旋-轨道耦合相互作用 [87,118], 空穴的自旋-轨道耦合长度约为 40—100 nm, 其 g 因子可达 4.34, 且 g 因子依赖于外加磁场的方向, 具有很强的各向异性 [88], 外加磁场垂直于量子线时的 g 因子与平行于量子线时的 g 因子比值可达 18. 目前, 已经在棚屋型 Ge 量子线中实现了国际上首个 Ge 空穴量子比特 [20], 退相干时间可达 130 ns. 国内中国科学技术大学郭国平研究小组 [118] 在 Ge 量子线量子比特器件方面做了系统而深入的研究, 在这种 Ge 量子线上实现了双量子点的可控调节, 且在这种量子线中实现了单量子点以及双量子点与超导微波谐振腔的耦合 [119,120], 能够采用超导微波谐振腔探测量子点中的空穴状态, 为实现远距离的量子点之间的通信以及进一步实现器件的集成和扩展奠定了重要基础. 郭国平研究小组 [121] 还首次在 Ge 空穴量子点中实现了 g 因子张量和自旋轨道耦合场方向的测量与调控, 对于硅锗体系更好地实现自旋量子比特的操控有重要的指导意义. 此外, 他们还实现了目前操控速度最快的量子比特, 其拉比振荡的频率约为 540 MHz [37].

然而, 以上棚屋型 Ge 量子线位置在 Si (001) 表面上是随机分布的, 不利于量子器件的精确寻址和大规模集成. 结合微纳加工和分子束外延生长方法, Gao 等 [42] 在 Si (001) 衬底上实现了棚屋型 Ge 量子线的面内精确定位生长. 该方法首先是利用电子束曝光和反应离子刻蚀技术在 Si (001) 衬底上刻蚀出周期性的凹槽图形结构, 凹槽的深度约为 70 nm, 如图 5(a) 所示, 其中黑色部分为凹槽结构, 由于面内棚屋型 Ge 量子线沿 <100> 晶向, 因此凹槽的方向也必须沿这两个方向. 然后, 利用分子束外延在此衬底上首先生长 3 nm 的 $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ 层, 在凹槽的两个侧边形成了如图 5(b) 所示的一维 SiGe 条带结构, 如 AFM 线扫描所示 (图 5(h) 中红线), SiGe 条带的横截面为梯形, 顶部是平台结构. 继续生长 0.6 nm 的 Ge 层并原位退火, 在此 SiGe 条带上获得了周期性有序的 Ge 量子线 (图 5(c)). 这主要源于 Ge 原子生长在 SiGe 条带上可以更好地释放应变能, 同时, Ge 原子在 SiGe 上的扩散势垒低于在 Si 上的扩散势垒 [122,123], 这也有利于 SiGe 条带上一维线的形成. Ge 量子线的横截面为三角形,

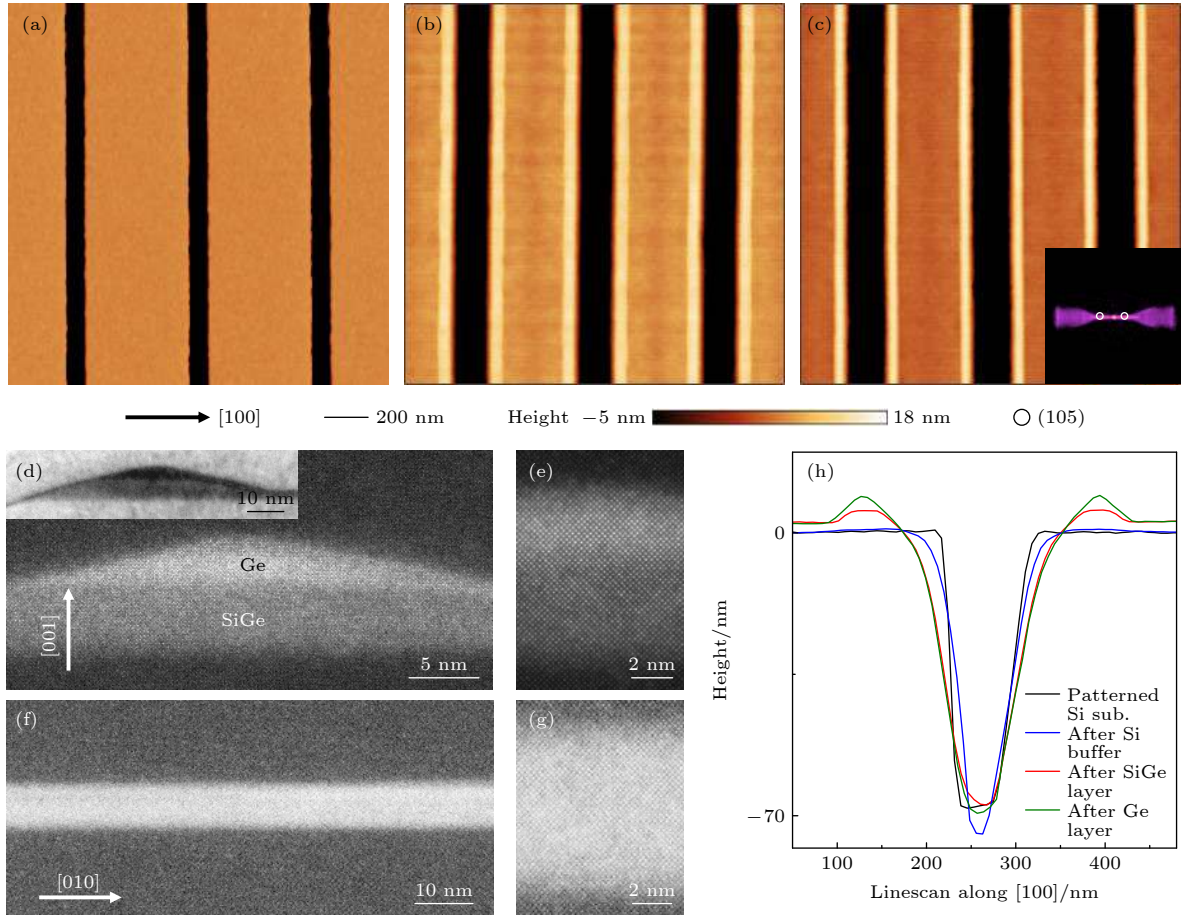


图 5 (a) 具有凹槽结构的 Si (001) 图形衬底的表面 AFM 图^[42]; (b) 生长 $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ 层后形成一维 SiGe 条带结构的表面 AFM 图^[42]; (c) SiGe 条带上形成 Ge 量子线的表面 AFM 图, 插图为量子线的晶面分析图, Ge 量子线的两个侧面均为 {105} 晶面^[42]; (d) 和 (e) 分别为 Ge 量子线的横截面 STEM 图及放大的 STEM 图^[42], 插图为 Ge 量子线的横截面全貌图; (f) 和 (g) 分别为 Ge 量子线沿线方向的高分辨 STEM 图以及放大的 STEM 图^[42]; (h) Ge 量子线各个生长阶段的 AFM 线扫描图^[42]

Fig. 5. (a) AFM image of trench-patterned Si (001) substrate^[42]; (b) AFM image of SiGe mound after the growth of $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ layer^[42]; (c) AFM image of Ge hut wire on $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ mound after the Ge layer deposition with subsequently annealing, where inset image shows the {105} side faceted Ge hut wires^[42]; (d), (e) cross-sectional STEM image and magnified STEM image of a Ge hut wire, respectively^[42], where inset is the overall view of a hut wire; (f), (g) STEM image and magnified STEM image along a Ge hut wire, respectively^[42]; (h) AFM line-scans showing the growth process of a Ge hut wire^[42].

两个侧面是稳定的 {105} 晶面 (如图 5(c) 中的插图所示), 高度约为 3.8 nm, 底部宽度为 38 nm, 高度标准偏差仅为 0.11 nm. 横截面方向的扫描透射电子显微镜 (STEM) 图 (图 5(d)) 和高分辨 STEM 图 (图 5(e)) 以及沿线方向的 STEM 图和高分辨 STEM 图 (图 5(f) 和 5(g)) 显示 Ge 量子线中没有缺陷, 具有完美的晶体质量.

棚屋型 Ge 量子线的位置、周期、长度和形状完全依赖于凹槽的位置、周期、长度和形状. 通过控制凹槽的周期实现了如图 6(a) 所示的紧邻平行的 Ge 量子线. 通过控制凹槽长度获得了长度为 10 μm 的 Ge 量子线 (图 6(b)), 原则上, Ge 量子线的长度可以任意长. 此外, 通过控制凹槽的形状

还实现了闭合结构的口字形 (图 6(c)) 以及 L 形 (图 6(d)) Ge 量子结构. 凹槽的深度和侧壁倾角对量子线的形成和位置也有重要影响^[124], 当凹槽的深度较浅, 例如深度为 6 nm, 宽度为 60 nm 时, 如果沉积低 Ge 含量 SiGe 层并原位退火处理, SiGe 会优先向凹槽内部扩散, 在槽内形成有序的 GeSi 量子线^[125] (图 6(e)). 槽内 GeSi 量子线同样具有 {105} 晶面, 其横截面为三角形, 高度约为 8 nm (图 6(h)), 且同样可以通过调节凹槽的周期和位置来控制量子线的周期和位置 (图 6(f) 和 图 6(g)). 槽内 GeSi 量子线中 Ge 的含量仅 30% 左右, 通过采用应力诱导的多层生长方法, 本课题组已经成功实现了槽内 Ge 量子线的有序生长.

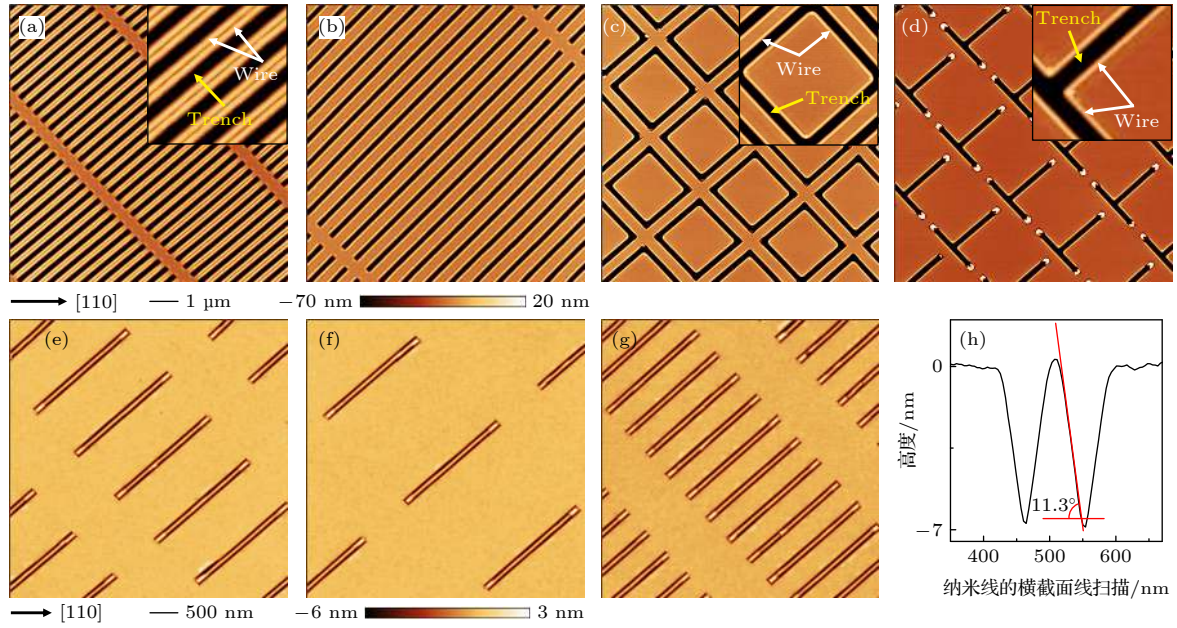


图 6 (a)–(d) 在 Si (001) 衬底上凹槽边缘生长的紧邻平行排列的 Ge 量子线、长度为 10 μm 的 Ge 量子线、口字形和 L 形 Ge 量子线的 AFM 图^[42]; (e)–(g) Si (001) 衬底上凹槽内部生长的 Ge_{0.33}Si_{0.67} 量子线的表面 AFM 图, 周期分别为 1 μm, 2 μm 及 500 nm^[125]; (h) 凹槽内部生长的单根 Ge_{0.33}Si_{0.67} 量子线的线扫描图, GeSi 量子线的侧壁倾角为 11.3°, 侧壁为 {105} 晶面^[125]

Fig. 6. (a)–(d) AFM images of closely spaced parallel Ge hut wires, Ge hut wires with length of 10 μm, square-shaped and L-shaped Ge hut wires at the edges of trenches on Si (001) substrate, respectively^[42]; (e)–(g) AFM images of Ge_{0.33}Si_{0.67} hut wires inside the trenches on Si (001) substrate with a period of 1 μm, 2 μm and 500 nm, respectively^[125]; (h) AFM line-scan of a Ge_{0.33}Si_{0.67} hut wire inside the trench, which shows the {105} side facet with an inclination angle of 11.3°^[125].

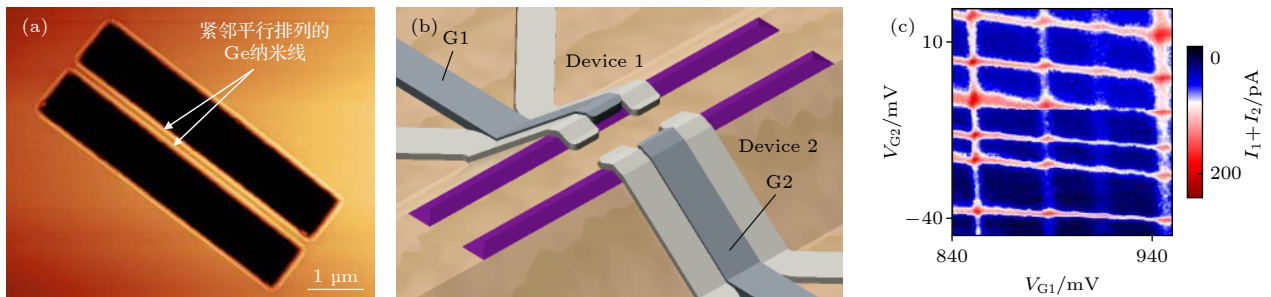


图 7 (a) 紧邻平行排列的 Ge 量子线 AFM 图; (b) 双量子点器件结构示意图^[42]; (c) 总电流 $I_1 + I_2$ 与 V_{G1} 以及 V_{G2} 的变化关系图^[42]

Fig. 7. (a) AFM image of the closely spaced parallel Ge hut wires; (b) schematic diagram of double quantum dot devices^[42]; (c) total current $I_1 + I_2$ versus V_{G1} and V_{G2} ^[42].

基于有序 Ge 量子线的器件研究还处于起始阶段, 基于凹槽边缘的棚屋型 Ge 量子线制备了单量子点器件, 观察到了典型的库仑阻塞现象, g 因子最高可达 3.91^[42], 同时观测到了重空穴态的零场分裂现象^[126], 表明量子线具有强的自旋-轨道耦合相互作用, 且可以利用电场对自旋-轨道耦合强度进行调控. 此外, 实现了两个紧邻平行排列 Ge 量子线 (图 7(a)) 上单量子点间的电容耦合. 器件示意图如图 7(b) 所示, 图 7(c) 为单量子点器件 1 和 2 的总电流与门电压 V_{G1} 和 V_{G2} 的关系图, 从图中的交叉点处可以看出, 当 1 个空穴隧穿过任意 1 个

器件时, 另 1 个器件的库仑峰就会出现位移, 表明两个量子点之间出现了耦合.

4 总结与展望

本综述主要介绍了近年来在半导体量子计算材料领域发展迅速的硅锗材料的制备方法、材料的基本性质以及相应量子器件的研究进展.

位错、应力、原子占位、原子台阶、同位素纯化程度和纳米线结构与成分的可控制备等都是影响量子比特性质和集成的关键因素. 未来量子计算芯

片材料的研究主要目标是实现晶圆级硅锗量子材料原子尺度的可控制备, 以推动硅基量子计算领域的发展。

参考文献

- [1] Zhang X, Li H O, Cao G, Xiao M, Guo G C, Guo G P 2019 *National Sci. Rev.* **6** 32
- [2] Wendin G 2017 *Rep. Prog. Phys.* **80** 106001
- [3] Lutchyn R M, Bakkers E P A M, Kouwenhoven L P, Krogstrup P, Marcus C M, Oreg Y 2018 *Nat. Rev. Mater.* **3** 52
- [4] Brown K R, Kim J, Monroe C 2016 *NPJ Quantum Inf.* **2** 16034
- [5] Kong X Y, Zhu Y Y, Wen J W, Xin T, Li K R, Long G L 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 220301 (in Chinese) [孔祥宇, 朱垣晔, 闻经纬, 辛涛, 李可仁, 龙桂鲁 2018 物理学报 **67** 220301]
- [6] Loss D, DiVincenzo D P 1998 *Phys. Rev. A* **57** 120
- [7] Petta J R, Johnson A C, Taylor J M, Laird E A, Yacoby A, Lukin M D, Marcus C M, Hanson M P, Gossard A C 2005 *Science* **309** 2180
- [8] Koppens F H, Nowack K C, Vandersypen L M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 236802
- [9] Yoneda J, Otsuka T, Nakajima T, Takakura T, Obata T, Pioro-Ladriere M, Lu H, Palmstrom C J, Gossard A C, Tarucha S 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 267601
- [10] Nadj-Perge S, Frolov S M, Bakkers E P, Kouwenhoven L P 2010 *Nature* **468** 1084
- [11] van den Berg J W, Nadj-Perge S, Pribyl V S, Plissard S R, Bakkers E P, Frolov S M, Kouwenhoven L P 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 066806
- [12] Elzerman J M, Hanson R, van Beveren L H W, Witkamp B, Vandersypen L M K, Kouwenhoven L P 2004 *Nature* **430** 431
- [13] Li R, Hudson F E, Dzurak A S, Hamilton A R 2015 *Nano Lett.* **15** 7314
- [14] Borselli M G, Eng K, Croke E T, Maune B M, Huang B, Ross R S, Kiselev A A, Deelman P W, Alvarado-Rodriguez I, Schmitz A E, Sokolich M, Holabird K S, Hazard T M, Gyure M F, Hunter A T 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 063109
- [15] Yang C, Zhong Z H, Lieber C M 2005 *Science* **310** 1304
- [16] Sellier H, Lansbergen G P, Caro J, Rogge S, Collaert N, Ferain I, Jurczak M, Biesemans S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 206805
- [17] Kane B E 1998 *Nature* **393** 133
- [18] Hendrickx N W, Lawrie W I L, Russ M, van Riggelen F, de Snoo S L, Schouten R N, Sammak A, Scappucci G, Veldhorst M 2021 *Nature* **591** 580
- [19] Higginbotham A P, Larsen T W, Yao J, Yan H, Lieber C M, Marcus C M, Kuemmeth F 2014 *Nano Lett.* **14** 3582
- [20] Watzinger H, Kukucka J, Vukusic L, Gao F, Wang T, Schaffler F, Zhang J J, Katsaros G 2018 *Nat. Commun.* **9** 3902
- [21] Yoneda J, Takeda K, Otsuka T, Nakajima T, Delbecq M R, Allison G, Honda T, Kodera T, Oda S, Hoshi Y, Usami N, Itoh K M, Tarucha S 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 102
- [22] Schoenfeld J S, Freeman B M, Jiang H 2017 *Nat. Commun.* **8** 64
- [23] Veldhorst M, Yang C H, Hwang J C, Huang W, Dehollain J P, Muhonen J T, Simmons S, Laucht A, Hudson F E, Itoh K M, Morello A, Dzurak A S 2015 *Nature* **526** 410
- [24] Takeda K, Noiri A, Nakajima T, Yoneda J, Kobayashi T, Tarucha S 2021 *Nat. Nanotechnol.* **16** 965
- [25] Borjans F, Croot X G, Mi X, Gullans M J, Petta J R 2020 *Nature* **577** 195
- [26] Kawakami E, Scarlino P, Ward D R, Braakman F R, Savage D E, Lagally M G, Friesen M, Coppersmith S N, Eriksson M A, Vandersypen L M 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 666
- [27] Takeda K, Kamioka J, Otsuka T, Yoneda J, Nakajima T, Delbecq M R, Amaha S, Allison G, Kodera T, Oda S, Tarucha S 2016 *Sci. Adv.* **2** 1600694
- [28] Veldhorst M, Hwang J C, Yang C H, Leenstra A W, de Ronde B, Dehollain J P, Muhonen J T, Hudson F E, Itoh K M, Morello A, Dzurak A S 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 981
- [29] Yang C H, Leon R C C, Hwang J C C, Saraiva A, Tanttu T, Huang W, Camirand Lemyre J, Chan K W, Tan K Y, Hudson F E, Itoh K M, Morello A, Pioro-Ladriere M, Laucht A, Dzurak A S 2020 *Nature* **580** 350
- [30] Petit L, Eenink H G J, Russ M, Lawrie W I L, Hendrickx N W, Philips S G J, Clarke J S, Vandersypen L M K, Veldhorst M 2020 *Nature* **580** 355
- [31] O'Gorman J, Nickerson N H, Ross P, Morton J J L, Benjamin S C 2016 *NPJ Quantum Inf.* **2** 15019
- [32] Pica G, Lovett B W, Bhatt R N, Schenkel T, Lyon S A 2016 *Phys. Rev. B* **93** 035306
- [33] Hill C D, Peretz E, Hile S J, House M G, Fuechsle M, Rogge S, Simmons M Y, Hollenberg L C L 2015 *Sci. Adv.* **1** 1500707
- [34] Muhonen J T, Dehollain J P, Laucht A, Hudson F E, Kalra R, Sekiguchi T, Itoh K M, Jamieson D N, McCallum J C, Dzurak A S, Morello A 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 986
- [35] Muhonen J T, Laucht A, Simmons S, Dehollain J P, Kalra R, Hudson F E, Freer S, Itoh K M, Jamieson D N, McCallum J C, Dzurak A S, Morello A 2015 *J. Phys. Condens. Matter* **27** 154205
- [36] He Y, Gorman S K, Keith D, Kranz L, Keizer J G, Simmons M Y 2019 *Nature* **571** 371
- [37] Wang K, X G, Gao F, Liu H, Ma R L, Zhang X, Zhang T, Cao G, Wang T, Zhang J J, Hu X, Jiang H W, Li H O, Guo G C, Guo G P 2020 arXiv: 2006.12340 [cond-mat. mes-hall]
- [38] Hendrickx N W, Franke D P, Sammak A, Scappucci G, Veldhorst M 2020 *Nature* **577** 487
- [39] Dobbie A, Myronov M, Morris R J H, Hassan A H A, Prest M J, Shah V A, Parker E H C, Whall T E, Leadley D R 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 172108
- [40] Failla M, Keller J, Scalari G, Maissen C, Faist J, Reichl C, Wegscheider W, Newell O J, Leadley D R, Myronov M, Lloyd-Hughes J 2016 *New J. Phys.* **18** 113036
- [41] Zhang J J, Katsaros G, Montalenti F, Scopece D, Rezaev R O, Mickel C, Rellinghaus B, Miglio L, De Franceschi S, Rastelli A, Schmidt O G 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 085502
- [42] Gao F, Wang J H, Watzinger H, Hu H, Rancic M J, Zhang J Y, Wang T, Yao Y, Wang G L, Kukucka J, Vukusic L, Kloeffel C, Loss D, Liu F, Katsaros G, Zhang J J 2020 *Adv. Mater.* **32** 1906523
- [43] Zwanenburg F A, Dzurak A S, Morello A, Simmons M Y, Hollenberg L C L, Klimeck G, Rogge S, Coppersmith S N, Eriksson M A 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 961
- [44] Hofheinz M, Jehl X, Sanquer M, Molas G, Vinet M, Deleoniibus S 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 143504
- [45] Fujiwara A, Inokawa H, Yamazaki K, Namatsu H, Takahashi Y, Zimmerman N M, Martin S B 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 053121
- [46] Liu H W, Fujisawa T, Inokawa H, Ono Y, Fujiwara A,

- Hirayama Y 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 222104
- [47] Morales A M, Lieber C M 1998 *Science* **279** 208
- [48] Kravchenko S V, Sarachik M P 2004 *Rep. Prog. Phys.* **67** 1
- [49] Wang K, Li H O, Luo G, Zhang X, Jing F M, Hu R Z, Zhou Y, Liu H, Wang G L, Cao G, Jiang H W, Guo G P 2020 *Europhys. Lett.* **130** 27001
- [50] Fitzgerald E A 1992 *J. Vac. Sci. Technol.* **10** 1807
- [51] Schaffler F, Tobben D, Herzog H J, Abstreiter G, Hollander B 1992 *Semicond. Sci. Technol.* **7** 260
- [52] Sugii N, Nakagawa K, Kimura Y, Yamaguchi S, Miyao M 1998 *Semicond. Sci. Technol.* **13** A140
- [53] Melnikov M Y, Shashkin A A, Dolgoplov V T, Huang S H, Liu C W, Kravchenko S V 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 092102
- [54] Abstreiter G, Brugger H, Wolf T, Jorke H, Herzog H J 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 2441
- [55] Lee M L, Fitzgerald E A, Bulsara M T, Currie M T, Lochtefeld A 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 011101
- [56] Schubert G, Schäffler F, Besson M, Abstreiter G, Gornik E 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 3318
- [57] Ismail K, Meyerson B S, Wang P J 1991 *Appl. Phys. Lett.* **58** 2117
- [58] Nelson S F, Ismail K, Nocera J J, Fang F F, Mendez E E, Chu J O, Meyerson B S 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 64
- [59] Xie Y H, Fitzgerald E A, Mii Y J, Monroe D, Thiel F A, Weir B E, Feldman L C 1991 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **220** 413
- [60] Mii Y J, Xie Y H, Fitzgerald E A, Monroe D, Thiel F A, Weir B E, Feldman L C 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 1611
- [61] Schaffler F 1997 *Semicond. Sci. Technol.* **12** 1515
- [62] Ismail K, LeGoues F K, Saenger K L, Arafa M, Chu J O, Mooney P M, Meyerson B S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 3447
- [63] Ismail K, Arafa M, Saenger K L, Chu J O, Meyerson B S 1995 *Appl. Phys. Lett.* **66** 1077
- [64] Ismail K 1996 *J. Vac. Sci. Technol.* , **B 14** 2776
- [65] Lai K, Ye P D, Pan W, Tsui D C, Lyon S A, Mühlberger M, Schäffler F 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 142103
- [66] Lu T M, Tsui D C, Lee C H, Liu C W 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 182102
- [67] Huang S H, Lu T M, Lu S C, Lee C H, Liu C W, Tsui D C 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 042111
- [68] Laroche D, Huang S H, Nielsen E, Chuang Y, Li J Y, Liu C W, Lu T M 2015 *AIP Adv.* **5** 107106
- [69] Mi X, Hazard T M, Payette C, Wang K, Zajac D M, Cady J V, Petta J R 2015 *Phys. Rev. B* **92** 035304
- [70] Ando T 1979 *Phys. Rev. B* **19** 3089
- [71] Friesen M, Eriksson M A, Coppersmith S N 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 202106
- [72] Friesen M, Chutia S, Tahan C, Coppersmith S N 2007 *Phys. Rev. B* **75** 115318
- [73] Weitz P, Haug R J, vonKlitzing K, Schaffler F 1996 *Surf. Sci.* **361** 542
- [74] Koester S J, Ismail K, Chu J O 1997 *Semicond. Sci. Technol.* **12** 384
- [75] Lai K, Pan W, Tsui D C, Lyon S, Mühlberger M, Schaffler F 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 156805
- [76] Khrapai V S, Shashkin A A, Dolgoplov V T 2003 *Phys. Rev. B* **67** 113305
- [77] Goswami S, Slinker K A, Friesen M, McGuire L M, Truitt J L, Tahan C, Klein L J, Chu J O, Mooney P M, van der Weide D W, Joynt R, Coppersmith S N, Eriksson M A 2007 *Nat. Phys.* **3** 41
- [78] Borselli M G, Ross R S, Kiselev A A, Croke E T, Holabird K S, Deelman P W, Warren L D, Alvarado-Rodriguez I, Milosavljevic I, Ku F C, Wong W S, Schmitz A E, Sokolich M, Gyure M F, Hunter A T 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 123118
- [79] Simmons C B, Prance J R, Van Bael B J, Koh T S, Shi Z, Savage D E, Lagally M G, Joynt R, Friesen M, Coppersmith S N, Eriksson M A 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 156804
- [80] Thalakulam M, Simmons C B, Van Bael B J, Rosemeyer B M, Savage D E, Lagally M G, Friesen M, Coppersmith S N, Eriksson M A 2011 *Phys. Rev. B* **84** 045307
- [81] Leon R C C, Yang C H, Hwang J C C, Lemyre J C, Tanttu T, Huang W, Chan K W, Tan K Y, Hudson F E, Itoh K M, Morello A, Laucht A, Pioro-Ladriere M, Saraiva A, Dzurak A S 2020 *Nat. Commun.* **11** 797
- [82] Struck T, Hollmann A, Schauer F, Fedorets O, Schmidbauer A, Sawano K, Riemann H, Abrosimov N V, Cywiński Ł, Bougeard D, Schreiber L R 2020 *NPJ Quantum Inf.* **6** 40
- [83] Peter S, Loss D 2021 arXiv: 2107.06485 v1 [cond-mat. mes-hall]
- [84] Scappucci G, Kloeffer C, Zwanenburg F A, Loss D, Myronov M, Zhang J J, De Franceschi S, Katsaros G, Veldhorst M 2020 *Nat. Rev. Mater.* **6** 926
- [85] Pillarisetty R 2011 *Nature* **479** 324
- [86] Kloeffer C, Trif M, Loss D 2011 *Phys. Rev. B* **84** 195314
- [87] Li S X, Li Y, Gao F, Xu G, Li H O, Cao G, Xiao M, Wang T, Zhang J J, Guo GP 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 133105
- [88] Watzinger H, Kloeffer C, Vukusic L, Rossell M D, Sessi V, Kukucka J, Kirchschrager R, Lausecker E, Truhlar A, Glaser M, Rastelli A, Fuhrer A, Loss D, Katsaros G 2016 *Nano Lett.* **16** 6879
- [89] Burkard G 2008 *Nat. Mater.* **7** 100
- [90] Dimoulas A, Tsiapas P, Sotiropoulos A, Evangelou E K 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 252110
- [91] Wagner G R, Janocko M A 1989 *Appl. Phys. Lett.* **54** 66
- [92] Murakami E, Etoh H, Nakagawa K, Miyao M 1990 *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* **29** 1059
- [93] Murakami E, Nakagawa K, Nishida A, Miyao M 1991 *IEEE Electron Device Lett.* **12** 71
- [94] Xie Y H, Monroe D, Fitzgerald E A, Silverman P J, Thiel F A, Watson G P 1993 *Appl. Phys. Lett.* **63** 2263
- [95] von Kanel H, Kummer M, Isella G, Muller E, Hackbarth T 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2922
- [96] Rossner B, Chrastina D, Isella G, von Kanel H 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 3058
- [97] Shah V A, Dobbie A, Myronov M, Fulgoni D J F, Nash L J, Leadley D R 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 192103
- [98] Shah V A, Dobbie A, Myronov M, Leadley D R 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 064304
- [99] Lu T M, Bishop N C, Pluym T, Means J, Kotula P G, Cederberg J, Tracy L A, Dominguez J, Lilly M P, Carroll M S 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 043101
- [100] Maune B M, Borselli M G, Huang B, Ladd T D, Deelman P W, Holabird K S, Kiselev A A, Alvarado-Rodriguez I, Ross R S, Schmitz A E, Sokolich M, Watson C A, Gyure M F, Hunter A T 2012 *Nature* **481** 344
- [101] Laroche D, Huang S H, Chuang Y, Li J Y, Liu C W, Lu T M 2016 *Appl. Phys. Lett.* **108** 233504
- [102] Sammak A, Sabbagh D, Hendrickx N W, Lodari M, Wuetz B P, Tosato A, Yeoh L, Bollani M, Virgilio M, Schubert M A, Zaumseil P, Capellini G, Veldhorst M, Scappucci G 2019 *Adv. Funct. Mater.* **29** 1807613
- [103] Wagner R S, Ellis W C 1964 *Appl. Phys. Lett.* **4** 89
- [104] Kodambaka S, Tersoff J, Reuter M C, Ross F M 2007

- Science* **316** 729
- [105] Lauhon L J, Gudiksen M S, Wang C L, Lieber C M 2002 *Nature* **420** 57
- [106] Hao X J, Tu T, Cao G, Zhou C, Li H O, Guo G C, Fung W Y, Ji Z, Guo G P, Lu W 2010 *Nano Lett.* **10** 2956
- [107] Roddaro S, Fuhrer A, Brusheim P, Fasth C, Xu H Q, Samuelson L, Xiang J, Lieber C M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 186802
- [108] Hu Y, Churchill H O, Reilly D J, Xiang J, Lieber C M, Marcus C M 2007 *Nat. Nanotechnol.* **2** 622
- [109] Hu Y, Kuemmeth F, Lieber C M, Marcus C M 2011 *Nat. Nanotechnol.* **7** 47
- [110] Higginbotham A P, Kuemmeth F, Larsen T W, Fitzpatrick M, Yao J, Yan H, Lieber C M, Marcus C M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 216806
- [111] Jia C, Lin Z, Huang Y, Duan X 2019 *Chem. Rev.* **119** 9074
- [112] Allen J E, Hemesath E R, Perea D E, Lensch-Falk J L, Li Z Y, Yin F, Gass M H, Wang P, Bleloch A L, Palmer R E, Lauhon L J 2008 *Nat. Nanotechnol.* **3** 168
- [113] Zhang J, Brehm M, Grydlik M, Schmidt O G 2015 *Chem. Soc. Rev.* **44** 26
- [114] Mo Y, Savage D E, Swartzentruber B S, Lagally M G 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1020
- [115] Tersoff J, Tromp R M 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2782
- [116] Daruka I, Grossauer C, Springholz G, Tersoff J 2014 *Phys. Rev. B* **89** 235427
- [117] Fischer J, Coish W A, Bulaev D V, Loss D 2008 *Phys. Rev. B* **78** 155329
- [118] Xu G, Gao F, Wang K, Zhang T, Liu H, Cao G, Wang T, Zhang J J, Jiang H W, Li H O, Guo G P 2020 *Appl. Phys. Express* **13** 065002
- [119] Li Y, Li S X, Gao F, Li H O, Xu G, Wang K, Liu D, Cao G, Xiao M, Wang T, Zhang J J, Guo G C, Guo G P 2018 *Nano Lett.* **18** 2091
- [120] Xu G, Li Y, Gao F, Li H O, Liu H, Wang K, Cao G, Wang T, Zhang J J, Guo G C, Guo G P 2020 *New J. Phys.* **22** 083068
- [121] Zhang T, Liu H, Gao F, Xu G, Wang K, Zhang X, Cao G, Wang T, Zhang J J, Hu X D, Li H O, Guo G P 2021 *Nano Lett.* **21** 3835
- [122] Shu D J, Liu F, Gong X G 2001 *Phys. Rev. B* **64** 245410
- [123] Huang L, Liu F, Gong X G 2004 *Phys. Rev. B* **70** 155320
- [124] Vastola G, Grydlik M, Brehm M, Fromherz T, Bauer G, Boioli F, Miglio L, Montalenti F 2011 *Phys. Rev. B* **84** 155415
- [125] Gao F, Feng Q, Wang T, Zhang J J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 028102 (in Chinese) [高飞, 冯琦, 王霆, 张建军 2020 物理学报 **69** 028102]
- [126] Katsaros G, Kukucka J, Vukusic L, Watzinger H, Gao F, Wang T, Zhang J J, Held K 2020 *Nano Lett.* **20** 5201

SPECIAL TOPIC—Quantum computation and quantum information

Research progress of silicon and germanium quantum computing materials*

Zhang Jie-Yin Gao Fei Zhang Jian-Jun[†]

(Key Laboratory of Nanophysics and Devices, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(Received 12 August 2021; revised manuscript received 23 September 2021)

Abstract

Semiconductor quantum dot is one of the promising ways to realize solid-state quantum computing. The key is to obtain high-quality semiconductor quantum computing materials. Silicon and germanium can be isotopically purified to achieve nuclear spin-free isotopes, meeting the requirement for long decoherence time. They are also compatible with the current CMOS technology, thus making them ideal material platforms for large scale integration. This review first summarizes the important progress of semiconductor quantum-dot quantum computing in recent years, then focuses on the material progress including the silicon-based Si/SiGe heterostructures, Ge/SiGe heterostructures, and Ge/Si one-dimensional wires, finally presents the outlook about the development of silicon and Ge quantum computing materials.

Keywords: silicon, germanium, heterostructure, nanowire, quantum computing

PACS: 78.40.Fy, 81.07.St, 81.07.Vb, 73.43.-f

DOI: 10.7498/aps.70.20211492

* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2016YFA0301701).

[†] Corresponding author. E-mail: jjzhang@iphy.ac.cn



基于辅助单比特测量的量子态读取算法

丁晨 李坦 张硕 郭楚 黄合良 鲍皖苏

A quantum state readout method based on a single ancilla qubit

Ding Chen Li Tan Zhang Shuo Guo Chu Huang He-Liang Bao Wan-Su

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 210303 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211066

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211066>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

中间测量对受驱单量子比特统计复杂度的影响

Influence of intermediated measurements on quantum statistical complexity of single driven qubit

物理学报. 2020, 69(23): 230301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200802>

无指针 δ -淬火直接测量法测量量子密度矩阵

Scheme of directly measuring quantum density matrix by δ -quench method

物理学报. 2021, 70(11): 110301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210269>

金刚石氮空位中心自旋量子调控

Quantum control of nitrogen-vacancy center in diamond

物理学报. 2018, 67(12): 120302 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180755>

基于奇异值分解的矩阵低秩近似量子算法

Matrix low-rank approximate quantum algorithm based on singular value decomposition

物理学报. 2021, 70(15): 150201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210411>

基于冗余图态的多人协作量子计算

Collaborative quantum computation with redundant graph state

物理学报. 2019, 68(11): 110302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190142>

核磁共振量子信息处理研究的新进展

New research progress of nuclear magnetic resonance quantum information processing

物理学报. 2018, 67(22): 220301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180754>

专题: 量子计算与量子信息

基于辅助单比特测量的量子态读取算法*

丁晨 李坦 张硕 郭楚 黄合良[†] 鲍皖苏[‡]

(河南省量子信息与量子密码重点实验室, 郑州 450004)

(2021 年 6 月 4 日收到; 2021 年 7 月 23 日收到修改稿)

在量子计算过程中, 需要通过量子测量读取计算结果. 然而, 受限于物理实现, 对量子态的测量往往存在较大误差, 直接影响量子计算结果的正确提取, 以及限制量子计算的大规模扩展. 本文针对一种特定形式的量子态, 提出基于辅助单比特测量的量子态间接读取算法, 避免多比特测量带来的大量测量误差. 理论和模拟结果表明, 当所读取的量子态比特数较大时, 该算法相比于直接读取具有更高的正确率, 可用于大规模量子纠错和量子态的高保真度读取.

关键词: 量子计算, 量子测量, 量子态读取

PACS: 03.67.Lx

DOI: 10.7498/aps.70.20211066

1 引言

20 世纪 80 年代以来, 量子计算由于具有可快速求解困难问题的强大潜力, 得到了广泛的关注和研究. 人们已经设计出一系列具有加速能力的量子算法, 比如 Shor 算法^[1]、Grover 算法^[2]、线性方程组量子求解算法^[3]等. 量子计算的多种物理平台实现(如超导^[4–13]、线性光学^[14–24]、离子阱^[25]、硅^[26, 27]、原子^[28])也取得了巨大的进展, 人们于 2019 年^[29]和 2020 年^[30]两次在不同的量子计算体系上验证了量子霸权(量子优越性), 即证明了量子计算在某些问题上具备极大超越经典计算机的计算能力. 尽管随着理论研究的深入, 随机线路采样的经典模拟速度得到了不断提升^[31, 32], 但中国研制的“祖冲之”号超导量子芯片^[33]依然可以保持量子优越性. 目前, 量子计算已呈加速发展之势, 并已进入中等尺度含噪声量子(noisy intermediate-scale quantum, NISQ)时代, 具备实现量子机器学习^[34–36]、

量子盲计算^[37–39]等量子计算近期应用的可能.

影响量子计算大规模扩展的一个主要因素是噪声, 包括门操控误差、读取误差、串扰噪声、退相干噪声等. 不同噪声所带来的影响因不同物理系统而异. 以 2019 年谷歌实现量子霸权的 Sycamore 号超导量子计算处理器^[29]为例, 读取误差比门操控误差高一个量级(单比特门误差 0.16%, 两比特门误差 0.62%, 读取误差 3.8%). 量子态的读取总误差往往与量子态的比特数呈正相关, 通常来说, 所测量的量子比特数越多, 错误概率也就越大. 但量子态的测量是量子计算过程不可避免的. 在量子算法和量子纠错中, 人们都依赖测量进行计算结果读取和错误探测. 因此, 如何避免或减小测量误差将直接影响量子计算结果的正确提取与量子计算的大规模扩展.

本文提出一种基于辅助单比特测量的量子态读取算法, 可以避免多比特测量引入的大量误差. 该算法适用于振幅的模长是二值的量子态 $|a\rangle = \sum_{i=0}^M a_i |i\rangle$, 其中 $|a_i|^2 \in \{0, \frac{1}{c}\}$, $\forall i \in \{0, \dots, M\}$.

* 青年人才托举工程(批准号: 2020-JCJQ-QT-030)、国家自然科学基金(批准号: 11905294, 11805279)、国防科技大学高性能计算国家重点实验室开放课题(批准号: 201901-01)和中国博士后科学基金资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: quanhhl@ustc.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: bws@qiclab.cn

它通过引入一个辅助比特, 将量子态的全部振幅编码到这个比特上, 使得仅通过测量这一个比特, 便可解码获取多比特量子态的信息. 对该算法进行了理论分析和数值模拟, 并与量子态的直接测量进行了比较. 结果表明, 当测量噪声较大, 或需读取的量子比特较多时, 本文算法可显著降低测量误差. 该算法适用的量子态具备一定代表性, 如 Grover 算法的输出态和量子纠错的错误探测比特等. 因此, 本文算法可直接提升部分量子计算过程的性能.

2 算 法

本节将通过伪代码的方式, 介绍提出的基于辅助单比特测量的量子态间接读取算法. 该算法针对如下类型量子态:

$$|a\rangle = \sum_{i=0}^M a_i |i\rangle,$$

其中量子态的振幅模长是二值的, 即所有振幅满足 $|a_i|^2 \in \{0, 1/c\}$, $\forall i \in \{0, \dots, M\}$, 其中 c 为 $|a\rangle$ 中非零振幅的个数. 该形式量子态广泛存在于量子算法的输出中, 比如, 多目标 Grover 算法^[2]所输出的态是所有目标态的均匀叠加.

通常来说, 通过直接对量子算法的输出态进行测量, 便可读取计算结果. 具体来说, 就是对输出量子态进行多次制备, 每次制备以后, 对其所有比特在自然基矢下进行测量, 从而得到一个结果列表. 当 $|i\rangle$ 在结果列表中时, 则认为 $|a_i|^2 = 1/c$, 否则认为 $|a_i|^2 = 0$. 由于直接读取需要读取每一个量子比特, 随着量子态规模的扩展, 读取结果正确性将呈指数级下降. 并且, 直接测量方法每次测量 $|a\rangle$ 都只坍缩到振幅非零的基矢上, 它在测出所有的非零振幅前无法确定那些振幅为 0 的基矢.

本文提出的间接读取算法就是为了克服以上两个问题. 在已知 c 的情况下, 可以仅通过一个比特的测量来读出所有振幅模方 $|a_i|^2$, 并确定其是 0 还是 $1/c$. 算法的大致思路是:

1) 把 $|a\rangle$ 中要读取的振幅通过受控旋转编码到一个辅助比特的振幅上, 得到

$$\sum a_i (\cos \theta_i |a\rangle |0\rangle + \sin \theta_i |a\rangle |1\rangle),$$

为了使得测量辅助比特能够获取到量子态 $|a\rangle$ 的振幅信息, 受控旋转的角度需要特殊设计 (具体见算法 1).

2) 测量辅助比特, 得到辅助比特中 $|0\rangle$ 的概率

$$A' \approx \sum |a_i|^2 \cos^2 \theta_i.$$

3) 对 A' 进行解码, 提取量子态的振幅信息 $|a_i|^2$.

根据需要, 可以读取所有的振幅模方 $|a_i|^2$, 也可以只读取部分的 $|a_i|^2$, 不同之处只在于受控旋转线路的设计. 而根据上面的讨论, 直接测量无法只读取部分 $|a_i|^2$.

下面用伪代码给出我们的读取算法流程.

2.1 读取所有 $|a_i|^2$

当需要知道所有基矢上的振幅模方时, 算法为

Algorithm 1 基于辅助单比特测量的 $|a_i|^2$ 读取算法.

Input: $|a\rangle = \sum_{i=0}^M a_i |i\rangle$, 其中 $|a_i|^2 \in \{0, 1/c\}$, $i \in \{0, \dots, M\}$, 常数 c , 测量次数 N .

Goal: 判断所有 $|a_i|^2$ 的取值.

1) 加一个辅助比特, 进行受控旋转: $|a\rangle |0\rangle \rightarrow \sum a_i |i\rangle R_i |0\rangle = \sum a_i (\cos \theta_i |i\rangle |0\rangle + \sin \theta_i |i\rangle |1\rangle)$, 其中 $\cos \theta_i = 2^{-\frac{i}{2}}$.

2) 在自然基矢下测量辅助比特.

3) 重复上述步骤 N 次, 统计得到 0 的频率 N_0 , 设 $N_0/N = A'$.

4) $i = 0$

5) while $i \leq M$ do

6) if $A' \geq 1/(2^i c)$ then

7) $|a_i|^2 = 1/c$

8) else

9) $a_i = 0$

10) end if

11) $A' = A' - |a_i|^2/2^i$

12) $i = i + 1$

13) end while

Output: $|a_i|^2$, $i = 0, \dots, M$.

2.2 读取部分 $|a_i|^2$

当我们只关注几个特定基矢上的振幅模方时, 算法为

Algorithm 2 基于辅助单比特测量的部分 $|a_i|^2$ 读取算法.

Input: $|a\rangle = \sum_{i=0}^M a_i |i\rangle$, 其中 $|a_i|^2 \in \{0, 1/c\}$, $i \in \{0, \dots, M\}$, 常数 c , 测量次数 N , 需要读取的振幅位置列表 $i_1, \dots, i_m$.

Goal: 判断 $|a_{i_j}|^2$, $j = 1, \dots, m$ 的取值.

1) 加一个辅助比特, 进行受控旋转: $|a\rangle|0\rangle \rightarrow \sum_{j=1}^m a_{i_j} |i_j\rangle R_{i_j} |0\rangle = \sum a_{i_j} (\cos \theta_{i_j} |i_j\rangle |0\rangle + \sin \theta_{i_j} |i_j\rangle |1\rangle)$, 其中 $\cos \theta_{i_j} = 2^{-\frac{j-1}{2}}$.

2) 在自然基矢下测量辅助比特.

3) 重复上述步骤 N 次, 统计得到 0 的频率 N_0 , 设 $N_0/N = A'$.

4) $j = 1$

5) while $j \leq m$ do

6) if $A' \geq 1/(2^{j-1}c)$ then

7) $|a_{i_j}|^2 = 1/c$

8) else

9) $a_{i_j} = 0$

10) end if

11) $A' = A' - |a_{i_j}|^2/2^{j-1}$

12) $j = j + 1$

13) end while

Output: $|a_{i_j}|^2, j = 1, \dots, m$.

事实上, 算法 1 是算法 2 的一个特例. 在算法 2 中, 当 $m = M + 1$ 且 $i_j = j - 1$ 时, 便可得到算法 1. 在算法 1 和算法 2 中, 为了保证算法达到所需要的正确概率, N 的取值需要根据第 3 节中分析的正确概率下界 P_1 进行给出.

3 误差分析

本节将刻画量子比特测量噪声、测量次数等因素对算法正确概率的影响, 并说明算法 2 在避免测量误差上相比于直接测量存在优势.

首先考虑测量噪声的一个简单模型. 即每个比特在测量时独立地按固定概率 η 翻转. 此时测量 n 个比特时, 算法每次执行的正确概率是 $(1 - \eta)^n$, N 次执行的正确概率为

$$P_{\text{测量}} = (1 - \eta)^{nN}.$$

接着考虑在这种模型下算法 2 的正确概率. 设 $A = \sum_{i=0}^M |a_i|^2 2^{-i}$, 从算法中对 $|a_i|^2$ 的判断步骤可以看出, 当 $\epsilon := |A - A'| \geq \frac{1}{2^{m_c}}$ 时, 会造成 $|a_{i_m}|^2$ 的判断错误. 而 $|A - A'| \leq \frac{1}{2^{m_c}}$ 时, 算法能正确得到 m 个 $|a_i|^2$.

我们依赖 N 次测量的统计结果 A' 来估计 A , 每次测量相当于投一个不均匀硬币, 因此有

$$P(|A' - A| \leq \epsilon) = \sum_{k=\lceil (A-\epsilon)N \rceil}^{\lfloor (A+\epsilon)N \rfloor} \binom{N}{k} A^k (1-A)^{N-k}.$$

不考虑测量噪声时, 测量 N 次, 算法的正确概率为

$$P_{\text{our}} = \sum_{k=\lceil (A-\frac{1}{2^{m_c}})N \rceil}^{\lfloor (A+\frac{1}{2^{m_c}})N \rfloor} \binom{N}{k} A^k (1-A)^{N-k}.$$

将测量噪声纳入考虑. 此时, 执行 N 次 1 比特测量, 算法的正确概率不小于

$$P_1 = P_{\text{测量}} P_{\text{our}} = (1 - \eta)^N \sum_{k=\lceil (A-\frac{1}{2^{m_c}})N \rceil}^{\lfloor (A+\frac{1}{2^{m_c}})N \rfloor} \binom{N}{k} A^k (1-A)^{N-k}.$$

在上式中, 直接将 P_{our} 和 $P_{\text{测量}}$ 相乘, 表达的是算法的 N 次测量都得到正确结果, 且算法能正确读出 m 个 $|a_i|^2$ 的概率. 当算法的 N 次测量中存在错误时, 也有一些可能会正确地读出所需的 m 个 $|a_i|^2$, 那与所需读取的态 $|a\rangle$ 有关, 这里不予考虑.

作为比较, 考虑另一种读取方法——对 $|a\rangle$ 的直接测量, 它直接对寄存器中的 n 个比特测量 N 次, 并根据测量结果推断出对应的振幅模方. 比如, 如果测量结果里含有 00, 则推断 $|a_{00}|^2 = 1/c$. 注意到直接方法每次测量都会把 $|a\rangle$ 投影到某一个振幅非零的基矢上. 在把所有振幅非零的项找到之前, 直接测量并不能确认剩下的振幅是不是 0. 因此, 对直接测量方法来说, 读取部分 $|a_i|^2$ 和全部 $|a_i|^2$ 所需要的算法测量次数是一样的.

不考虑测量误差时, 不妨设非零振幅对应指标为 $1, \dots, c$, 设 $P_{k_1, \dots, k_l}(N) := P(N \text{ 次测量结果不包含 } k_1, \dots, k_l)$, 则直接测量方法的正确概率为

$$\begin{aligned} P_{\text{direct}} &= 1 - P_{1, \dots, c}(N) \\ &= 1 - \sum_{1 \leq i \leq c} P_i(N) - \sum_{1 \leq i \leq j \leq c} P_{i,j}(N) + \dots \\ &\quad + (-1)^{c+1} P_{1, \dots, c}(N) \\ &= 1 - \binom{c}{1} \left(1 - \frac{1}{c}\right)^N - \binom{c}{2} \left(1 - \frac{2}{c}\right)^N + \dots \\ &\quad + (-1)^{c+1} (1 - 1)^N \\ &= 1 - \sum_{k=1}^{c-1} \binom{c}{k} \left(1 - \frac{k}{c}\right)^N (-1)^{k+1}. \end{aligned}$$

将测量误差纳入考虑. 此时, 由于执行 N 次

n 比特测量, 算法的正确概率不小于

$$P_2 = P_{\text{测量}} P_{\text{direct}}$$

$$= (1 - \eta)^{nN} \left[1 - \sum_{k=1}^{c-1} \binom{c}{k} \left(1 - \frac{k}{c} \right)^N (-1)^{k+1} \right].$$

与计算 P_1 的考虑相同, 上式中直接将 P_{direct} 和 $P_{\text{测量}}$ 相乘, 表达的是算法的 N 次测量都得到正确结果, 且算法能正确读出 m 个 $|a_i|^2$ 的概率. 本文不考虑算法在测量发生错误时依然正确地读出 m 个 $|a_i|^2$ 的情况.

现在已经得到了两个算法的正确概率 P_1 和 P_2 . 为了直观地比较 P_1 和 P_2 的大小, 计算给定测量次数 $N = 10$ 和测量噪声 η 的情况下, 两个算法随机读取一个 n 比特量子态的平均正确概率, 结果如图 1 所示.

从图 1 可以看出, 比特数增加时, 两个算法的平均正确概率都会降低, 但算法 2 的平均正确概率始终大于直接测量; 测量噪声为 0 时, 直接测量的平均正确概率比算法 2 高 0.02 左右, 但随着测量噪声增大, 两个算法的平均正确概率都会降低, 直接测量的平均正确概率在测量噪声大于 0.001 时被算法 2 超过. 因此, 当 n 或者 η 较大时, P_1 都会高于 P_2 , 算法 2 都具有显然的优势.

4 模拟

用 qiskit 语言^[40] 模拟了量子态读取的两个算法 (算法 2 和直接测量算法) 在多种情况下的表现,

并进行对比. 所有代码可以在 <https://github.com/helloinrm/readout> 查看和下载.

首先模拟测量噪声对两个算法正确率的影响. 如图 2 所示, 设置了不同大小的测量噪声 $\eta = 0, 0.01, \dots, 0.09$, 让算法 2 和直接测量算法对 $|00\rangle$ 态进行读取, 并设置测量次数 $N = 1$. 将算法运行 1000 次, 并将两个算法对 $|00\rangle$ 读取正确与否进行统计, 得到算法的正确率和正确率的 95% 置信区间. 从图 2 可以看出, 测量噪声 η 为 0 时, 两个算法正确率为 1. 随着测量噪声 η 的增加, 两个算法的正确率都会下降, 但直接测量算法的错误率下降更快.

接着, 考察测量比特数对两个算法正确率的影响. 如图 2 所示, 设置测量噪声 $\eta = 0.05$ (接近一些物理平台上的测量噪声参数), 让两个算法对不同比特数 ($n = 2, \dots, 8$) 的 $|0 \dots 0\rangle$ 态进行读取, 并设置测量次数 $N = 1$. 将算法运行 1000 次, 得到算法的正确率和正确率的 95% 置信区间. 从图 2 可以看出, 比特数增加时, 算法 2 的正确率维持在 0.05 上下, 但直接测量算法正确率不断下降.

5 讨论

5.1 算法推广

在原先的方法中, 对所求振幅的编码方式是 $A = \sum_{i=0}^M |a_i|^2 2^{-i}$, 它所对应的量子态振幅的特点是所有的振幅模方 $|a_i|^2$ 等于 0 或者 $1/c$. 当所需要读取的振幅模方不再是二值的, 而是属于某一个有限集时, 依然可以通过设计特定的编码方式

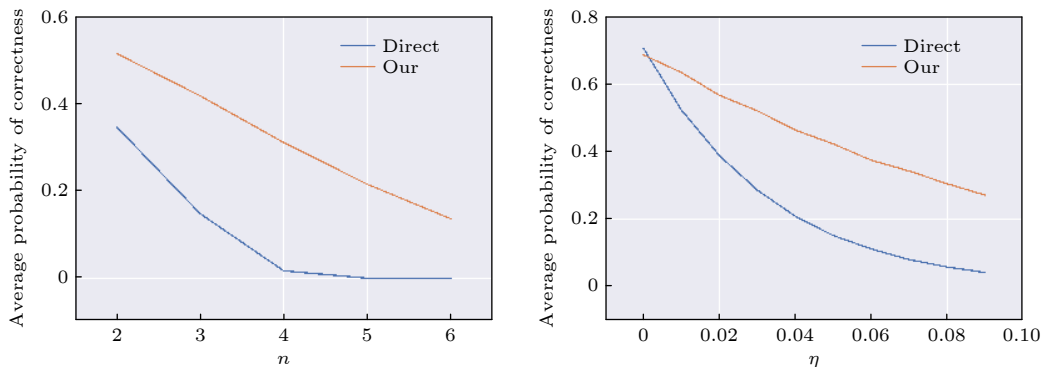


图 1 两个算法随机读取多比特量子态的平均正确概率. 在左图中, 测量噪声 η 固定为 0.05, 研究平均正确概率随测量噪声 n 的变化. 在右图中, 比特数 n 固定为 3, 研究平均正确概率随测量噪声 η 的变化. 平均正确概率的计算方法为随机抽取 1000 个量子态计算对应的 P_1 和 P_2 , 并取平均

Fig. 1. Average probability of correctness of the two algorithms reading a n -qubit quantum state. In the left subgraph, the number of qubits is 3, and we investigate the dependence of average probability of correctness on the readout noise η . In the right subgraph, the readout noise $\eta = 0.05$, and we investigate the dependence of average probability of correctness on the number of qubits. The values of average probability of correctness are calculated as the average of P_1 and P_2 on 1000 reading instances.

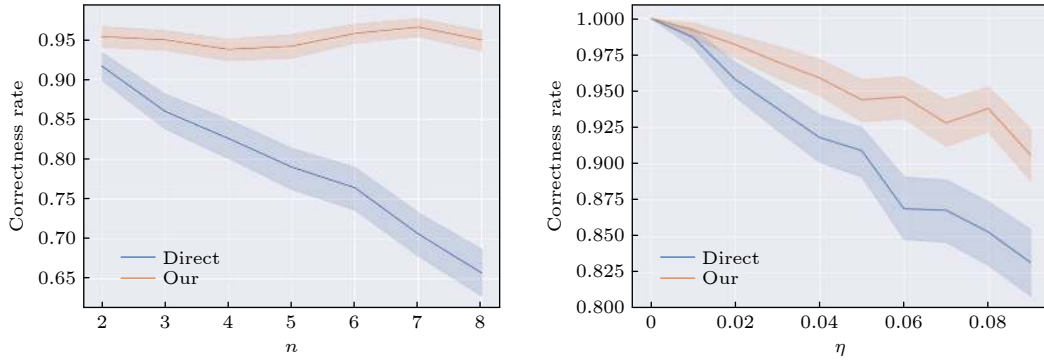


图 2 两个算法在多种情况下的正确率比较. 其中实线是正确率, 色带是 95% 置信区间. 图例中, direct 代表直接测量, our 代表算法 2

Fig. 2. Correctness rates of two algorithms under multiple circumstances. In the graph, the lines represent the correctness rates while the bands represent the 95% confidence intervals. In the legend, “direct” represents the direct method, “our” represents Alg. 2.

将这些振幅储存到一个辅助比特中, 并最终读取出来.

举例来说, 当 $|a_i|^2 \in \{0, b, d\}$, $0 < b < d$ 时, 设

$$\cos \theta_i = q^{-\frac{i}{2}}.$$

此时

$$A = \sum_{i=0}^M |a_i|^2 q^{-i}.$$

为了保证从 A 的取值到所有 $|a_i|^2$ 取值存在一一映射, 需要 A 关于 q 的高阶项和小于任意低阶项, 即

$$d \sum_{i=n}^{\infty} q^{-i} < \min\{b, d-1\} q^{-n+1}.$$

整理上式得出, q 可以取 $\min\left\{\frac{b}{d}, 1 - \frac{b}{d}\right\} + 1$. 此时可以进行如下解码:

Algorithm 3 离散振幅的解码算法.

Input: A 的估计值 A' .

Goal: 判断 $|a_i|^2$ 的取值.

- 1) $i = 0$
- 2) while $j \leq M$ do
- 3) if $A' \geq dq^{-i}$ then
- 4) $|a_{i_j}|^2 = d$
- 5) else if $A' \geq bq^{-i}$ then
- 6) $|a_{i_j}|^2 = b$
- 7) else
- 8) $a_{i_j} = 0$
- 9) end if
- 10) $A' = A' - |a_{i_j}|^2 / q^{j-1}$
- 11) $j = j + 1$
- 12) end while

Output: $|a_i|^2$, $i = 0, \dots, M$.

5.2 受控旋转精度

当所要读取振幅个数增多时, 算法执行受控旋转的最大角度不断逼近 $\pi/2$. 具体来说, 算法同时读取 m 个振幅时, $\theta_{\max} = \arccos(2^{\frac{1-m}{2}})$. 这对量子计算物理实现中受控旋转的精度提出了较高要求.

为了增强该算法对目前实现技术的适应性, 可以将振幅读取任务分割成几份, 通过多次调用算法 2 来避免高精度受控旋转. 比如, 将所需读取的 m 个振幅分为 k 份. 在每份中, 将所需读取的振幅指标作为输入调用算法 2, 则此时所需进行的最大受控旋转角度是 $\theta_{\max} = \arccos(2^{\frac{k-m}{2k}})$, 降低了对受控旋转的精度要求.

6 总 结

针对振幅是二值的这种特定形式的量子态, 提出了基于辅助单比特测量的量子态间接读取算法. 这种算法将所要读取的振幅编码到一个辅助量子比特上, 通过对单比特的测量来读取所需振幅. 从而避免了多比特测量带来的大量测量误差. 理论和模拟结果表明, 当所读取的量子态比特数较大时, 该算法相比于直接读取具有更高的正确率. 因此, 它可以用于大规模量子纠错和量子态的高保真度读取. 其高正确率也有助于降低量子算法的执行和测量次数, 有利于量子计算的大规模扩展.

根据算法所能读取的特定量子态形式, 我们预期其可以在读取多目标 Grover 算法的输出态和量子纠错的错误探测比特时使用. 同时, 该算法的

应用范围可以进行扩展, 以读取具有离散振幅的量子态. 考虑到这种扩展的思路在线路设计和编码方式上都具有较大的灵活度, 我们相信该算法的功能还可以大大扩增, 以符合更多的应用场景.

参考文献

- [1] Shor P W 1994 *Proceedings 35th Annual Symposium Foundations Computer Science* Santa Fe, New Mexico, USA, November 20–22, 1994 pp124–134
- [2] Grover L K 1996 *Proceedings 28th Annual ACM Symposium Theory Computing* Philadelphia, Pennsylvania, USA, May 22–24, 1996 pp212–219
- [3] Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 150502
- [4] Clarke J, Wilhelm F K 2008 *Nature* **453** 1031
- [5] Huang H L, Narożniak M, Liang F, Zhao Y, Castellano A D, Gong M, Wu Y, Wang S, Lin J, Xu Y, Deng H, Rong H, Dowling J P, Peng C Z, Byrnes T, Zhu X, Pan J W 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 090502
- [6] Huang H L, Wu D, Fan D, Zhu X 2020 *Sci. China Inf. Sci.* **63** 180501
- [7] Kjaergaard M, Schwartz M E, Braumjeller J, Krantz P, Wang J I J, Gustavsson S, Oliver W D 2020 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **11** 369
- [8] Krantz P, Kjaergaard M, Yan F, Orlando T P, Gustavsson S, Oliver W D 2019 *Appl. Phys. Rev.* **6** 021318
- [9] Gu X, Kockum A F, Miranowicz A, Liu Y X, Nori F 2017 *Phys. Rep.* **718–719** 1
- [10] Wendin G 2017 *Rep. Prog. Phys.* **80** 106001
- [11] You J Q, Nori F 2005 *Phys. Today* **58** 42
- [12] You J Q, Nori F 2011 *Nature* **474** 589
- [13] Nation P D, Johansson J R, Blencowe M P, Nori F 2012 *Rev. Mod. Phys.* **84** 1
- [14] O'Brien J L, Furusawa A, Vučković J 2009 *Nat. Photonics* **3** 687
- [15] Liu C, Huang H L, Chen C, Wang B Y, Wang X L, Yang T, Li L, Liu N L, Dowling J P, Byrnes T, Lu C Y, Pan J W 2019 *Optica* **6** 264
- [16] Huang H L, Luo Y H, Bai B, Deng Y H, Wang H, Zhao Q, Zhong H S, Nie Y Q, Jiang W H, Wang X L, Zhang J, Li L, Liu N L, Byrnes T, Dowling J P, Lu C Y, Pan J W 2019 *Phys. Rev. A* **100** 012114
- [17] Huang H L, Bao W S, Guo C 2019 *Phys. Rev. A* **100** 032305
- [18] Huang H L, Wang X L, Rohde P P, Luo Y H, Zhao Y W, Liu C, Li L, Liu N L, Lu C Y, Pan J W 2018 *Optica* **5** 193
- [19] Wang X L, Luo Y H, Huang H L, Chen M C, Su Z E, Liu C, Chen C, Li W, Fang Y Q, Jiang X, Zhang J, Li L, Liu N L, Lu C Y, Pan J W 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 260502
- [20] Huang H L, Zhong H S, Li T, Li F G, Fu X Q, Zhang S, Wang X, Bao W S 2017 *Sci. Rep.* **7** 15265
- [21] Huang H L, Bao W S, Li T, Li F G, Fu X Q, Zhang S, Zhang H L, Wang X 2017 *Phys. Lett. A* **381** 2673
- [22] Wang H, He Y, Li Y H, Su Z E, Li B, Huang H L, Ding X, Chen M C, Liu C, Qin J, Li J P, He Y M, Schneider C, Kamp M, Peng C Z, Höfling S, Lu C Y, Pan J W 2017 *Nat. Photonics* **11** 361
- [23] He Y, Ding X, Su Z E, Huang H L, Qin J, Wang C, Unsleber S, Chen C, Wang H, He Y M, Wang X L, Zhang W J, Chen S J, Schneider C, Kamp M, You L X, Wang Z, Höfling S, Lu C Y, Pan J W 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 190501
- [24] Wang X L, Chen L K, Li W, Huang H L, Liu C, Chen C, Luo Y H, Su Z E, Wu D, Li Z D, Lu H, Hu Y, Jiang X, Peng C Z, Li L, Liu N L, Chen Y A, Lu C Y, Pan J W 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 210502
- [25] Häffner H, Roos C F, Blatt R 2008 *Phys. Rep.* **469** 155
- [26] Kane B E 1998 *Nature* **393** 133
- [27] He Y, Gorman S K, Keith D, Krantz L, Keizer J G, Simmons M Y 2019 *Nature* **571** 371
- [28] Bloch I 2008 *Nature* **453** 1016
- [29] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. 2019 *Nature* **574** 505
- [30] Zhong H S, Wang H, Deng Y H, Chen M C, Peng L C, Luo Y H, Qin J, Wu D, Ding X, Hu Y, Hu P, Yang X Y, Zhang W J, Li H, Li Y, Jiang X, Gan L, Yang G, You L, Wang Z, Li L, Liu N L, Lu C Y, Pan J W 2020 *Science* **370** 1460
- [31] Guo C, Zhao Y, Huang H L 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 070502
- [32] Guo C, Liu Y, Xiong M, Xue S, Fu X, Huang A, Qiang X, Xu P, Liu J, Zheng S, Huang H L, Deng M, Poletti D, Bao W S, Wu J 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 190501
- [33] Wu Y, Bao W S, Cao S, Chen F, Chen M C, Chen X, Chung T H, Deng H, Du Y, Fan D, Gong M, Guo C, Guo C, Guo S, Han L, Hong L, Huang H L, Huo Y H, Li L, Li N, Li S, Li Y, Liang F, Lin C, Lin J, Qian H, Qiao D, Rong H, Su H, Sun L, Wang L, Wang S, Wu D, Xu Y, Yan K, Yang W, Yang Y, Ye Y, Yin J, Ying C, Yu J, Zha C, Zhang C, Zhang H, Zhang K, Zhang Y, Zhao H, Zhao Y, Zhou L, Zhu Q, Lu C Y, Peng C Z, Zhu X, Pan J W 2021 *arXiv2106.14734[quant-ph]*
- [34] Liu Y, Wang D, Xue S, Huang A, Fu X, Qiang X, Xu P, Huang H L, Deng M, Guo C, Yang X, Wu J 2020 *Phys. Rev. A* **101** 052316
- [35] Huang H L, Du Y, Gong M, Zhao Y, Wu Y, Wang C, Li S, Liang F, Lin J, Xu Y, Yang R, Liu T, Hsieh M H, Deng H, Rong H, Peng C Z, Lu C Y, Chen Y A, Tao D, Zhu X, Pan J W 2021 *Phys. Rev. Appl.* **16** 024051
- [36] Liu J, Lim K H, Wood K L, Huang W, Guo C, Huang H L 2021 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **64** 290311
- [37] Huang H L, Zhao Q, Ma X, Liu C, Su Z E, Wang X L, Li L, Liu N L, Sanders B C, Lu C Y, Pan J W 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 050503
- [38] Huang H L, Bao W S, Li T, Li F G, Fu X Q, Zhang S, Zhang H L, Wang X 2017 *Quantum Inf. Proc.* **16** 199
- [39] Huang H L, nad Tan Li Y W Z, Li F G, Du Y T, Fu X Q, Zhang S, Wang X, Bao W S 2017 *Front. Phys.* **12** 120305
- [40] Abraham H, Akhalwaya I Y, Aleksandrowicz G, et al. 2019 *Qiskit: An Open-source Framework for Quantum Computing*

SPECIAL TOPIC—Quantum computation and quantum information

A quantum state readout method based on a single ancilla qubit^{*}

Ding Chen Li Tan Zhang Shuo Guo Chu

Huang He-Liang[†] Bao Wan-Su[‡]

(Henan Key Laboratory of Quantum Information and Cryptography, Zhengzhou 450004, China)

(Received 4 June 2021; revised manuscript received 23 July 2021)

Abstract

Quantum state measurement is essential for reading-out a quantum computing outcome. Meanwhile, the readout results are always affected by the large noise of quantum measurements in physical implementation, which also hinders the large-scale expansion of quantum computing. In light of this, we present an indirect quantum state readout method based on a single ancilla qubit that can avoid the large noise of multiple-qubit measurements. The theoretical analysis and simulations indicate that our method is more robust against the measurement noise and promises to become a method of large-scale quantum error correction and high-fidelity quantum state readout.

Keywords: quantum computing, quantum measurement, quantum state readout

PACS: 03.67.Lx

DOI: [10.7498/aps.70.20211066](https://doi.org/10.7498/aps.70.20211066)

^{*} Project supported by the Youth Talent Lifting Project, China (Grant No. 2020-JCJQ-QT-030), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11905294, 11805279), the Open Research Fund from State Key Laboratory for High Performance Computing, National University of Defense Technology, China (Grant No. 201901-01), and the China Postdoctoral Science Foundation.

[†] Corresponding author. E-mail: quanhhl@ustc.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: bws@qiclab.cn