Многоспиновая запутанность и квантовые вычисления на пяти-кубитной платформе квантового компьютера фирмы IBM

Э.Б.Фельдман

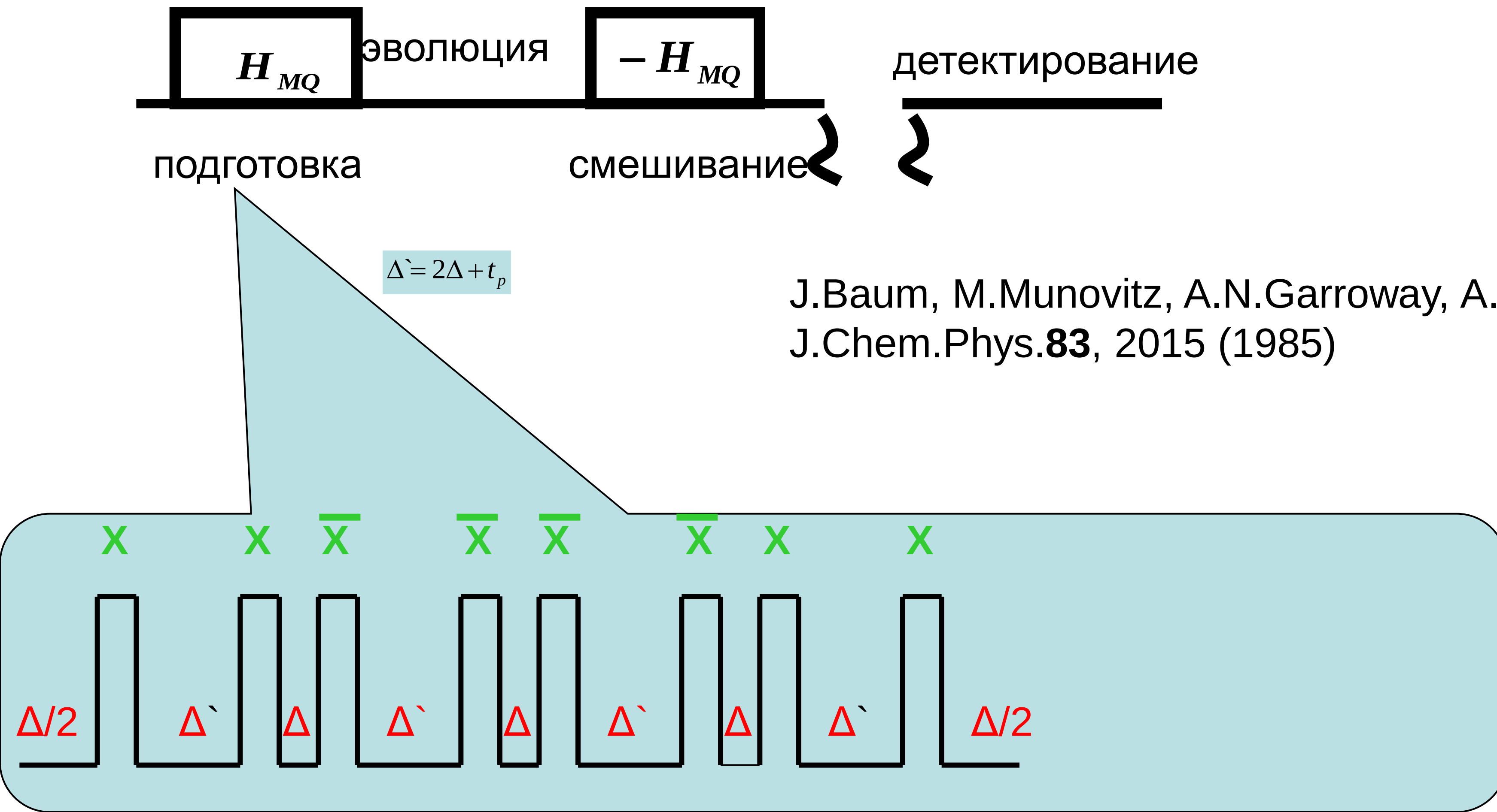
Институт проблем химической фиики РАН

План доклада

- Многоквантовая (МК) спектроскопия ЯМР в твердых телах.
- Теория МК динамики ЯМР спин-несущих молекул (атомов) в нано-поре при низких температурах.
- Многоспиновая запутанность в в МК спектроскопии ЯМР
- Решение системы из трех линейных уравнений на пяти-кубитной платформе квантового компьютера фирмы IBM
- Оценка точности вычислений на квантовом компьютере с помощью алгоритма, вычисляющего число π.

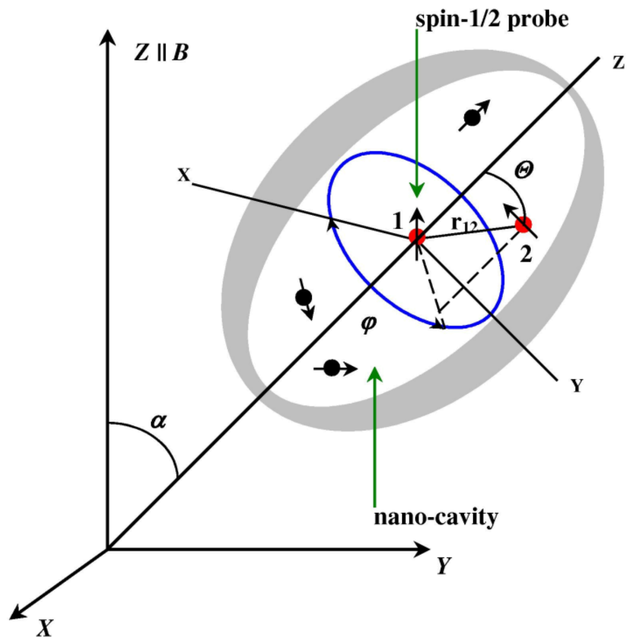
Многоквантовые эксперименты ЯМР в твердых телах

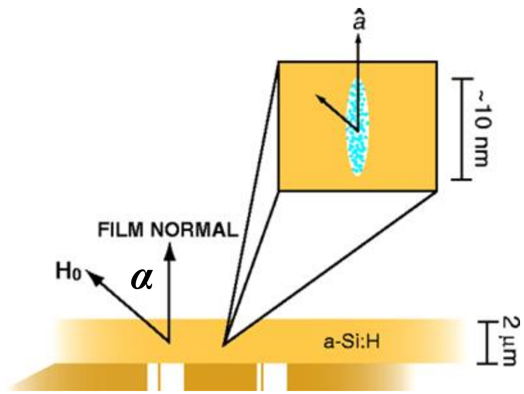
$$\rho_2 \sim I_{1z} I_2^+ I_3^+ I_{4z} I_5^+ I_6^-$$

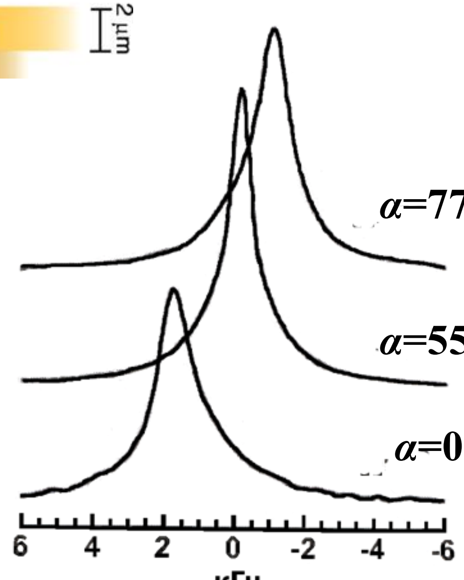


J.Baum, M.Munovitz, A.N.Garroway, A.Pines, J.Chem.Phys.**83**, 2015 (1985)

Исследование газа спин-несущих молекул в нано-полости методом ЯМР

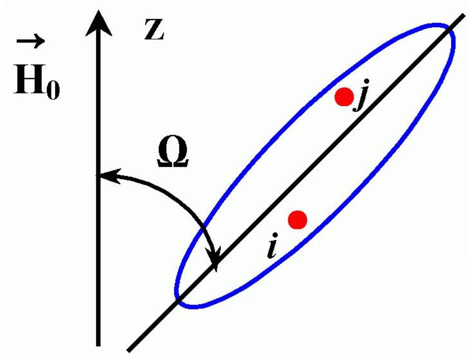






J. Baugh, A. Kleinhammens, D. Han, Q. Wang and Y. Wu, Science 294, 1506 (2001)

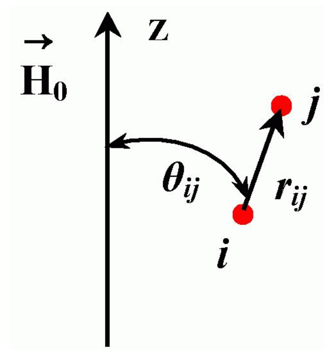
Диполь-дипольные взаимодействия в газах и жидкостях в нано-размерных полостях

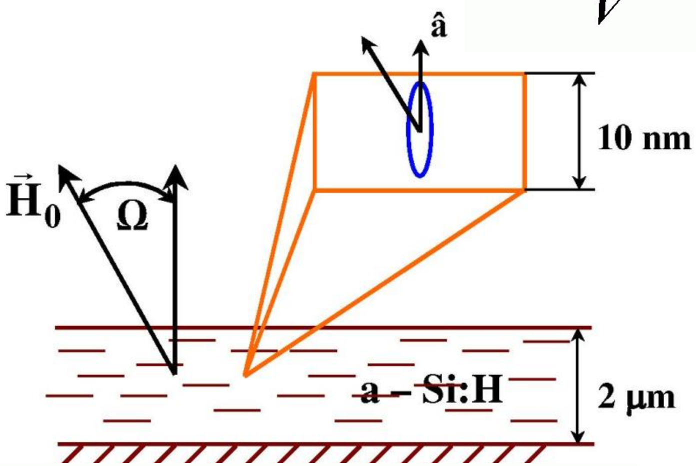


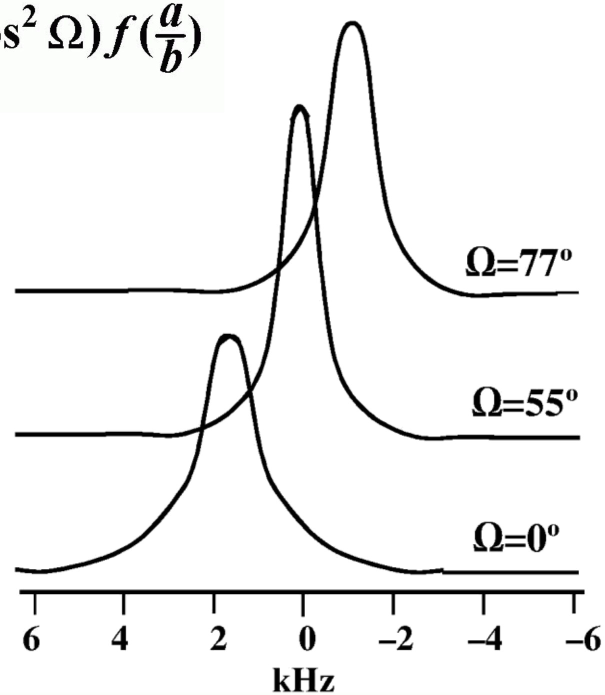
$$D_{ij} = \frac{\gamma^2\hbar}{r_{ij}^3}(1 - 3\cos^2\theta_{ij})$$

$$\overline{D} = \iint\limits_{V_iV_j} D(r_{ij}\theta_{ij})\frac{dV_i}{V}\frac{dV_j}{V}$$

$$\overline{D} = \frac{\gamma^2\hbar}{V}(1 - 3\cos^2\Omega)f(\frac{a}{b})$$







$$H = \overline{D}\sum_{i,j}(\overline{I}_i\overline{I}_j - 3I_{iz}I_{jz})$$

J. Baugh, A. Kleinhammes, D. Han, Q. Wang, Y. Wu, Science 294, 1506 (2001)

МК динамика ЯМР в системах взаимодействующих спинов

$$H_{MQ}=-\frac{D}{2}\sum_{j<k}\left(I_j^+I_k^+ + I_j^-I_k^-\right)=-\frac{D}{4}\left\{(I^+)^2+(I^-)^2\right\},$$

$$\left[H_{MQ},\hat{I}^2\right]=0$$

~~Мультипликативный базис~~

$$\hat{I}^2,\ I_z$$

$$I=\frac{N}{2},\frac{N}{2}-1,\ldots,\frac{N}{2}-\left[\frac{N}{2}\right]$$

S.I.Doronin, A.V.Fedorova, E.B.Fel’dman, A.I.Zenchuk,J.Chem.Phys.**131**,104109 (2009)

Блок МК гамильтониана для спинового числа S

$$\langle M \mid I^{+} \mid M-1 \rangle = \langle M-1 \mid I^{-} \mid M \rangle = \sqrt{(S+M)(S-M+1)},$$

$$M = -S+1, -S+2, \ldots, S$$

$$\langle M \mid (I^{+})^{2} \mid M-2 \rangle = \langle M-2 \mid (I^{-})^{2} \mid M \rangle$$
$$= \sqrt{(S+M)(S+M-1)(S-M+1)(S-M+2)},$$

$$M = -S+2, -S+3, \ldots, S-1, S$$

Вырождение блока МК гамильтониана

S=N/2

$$\frac{N}{2}\left(\frac{N}{2}+1\right)$$

$$I_z$$

S=N/2-1

$$\left(\frac{N}{2}-1\right)\frac{N}{2}$$

$$I_z$$

$$\frac{N}{2}-\left[\frac{N}{2}\right]$$

$$I_z$$

Полная размерность гамильтониана:

$$(N+1)+N+\cdots+1=\frac{(N+2)(N+1)}{2}\neq 2^N$$

Эти блоки вырождены!

$$n_N(S)=\frac{N!(2S+1)!}{(\frac{N}{2}+S+1)!(\frac{N}{2}-S)!}$$

$$\sum_S n_N(S)(2S+1)=2^N$$

Блочная структура МК динамики ЯМР в нано-поре

$$\overline{H}_{MQ} = diag\{\overline{H}_{MQ}^{\frac{N}{2}}, \overline{H}_{MQ}^{\frac{N}{2}-1}, ..., \overline{H}_{MQ}^{\frac{N}{2}-\left[\frac{N}{2}\right]}\}$$

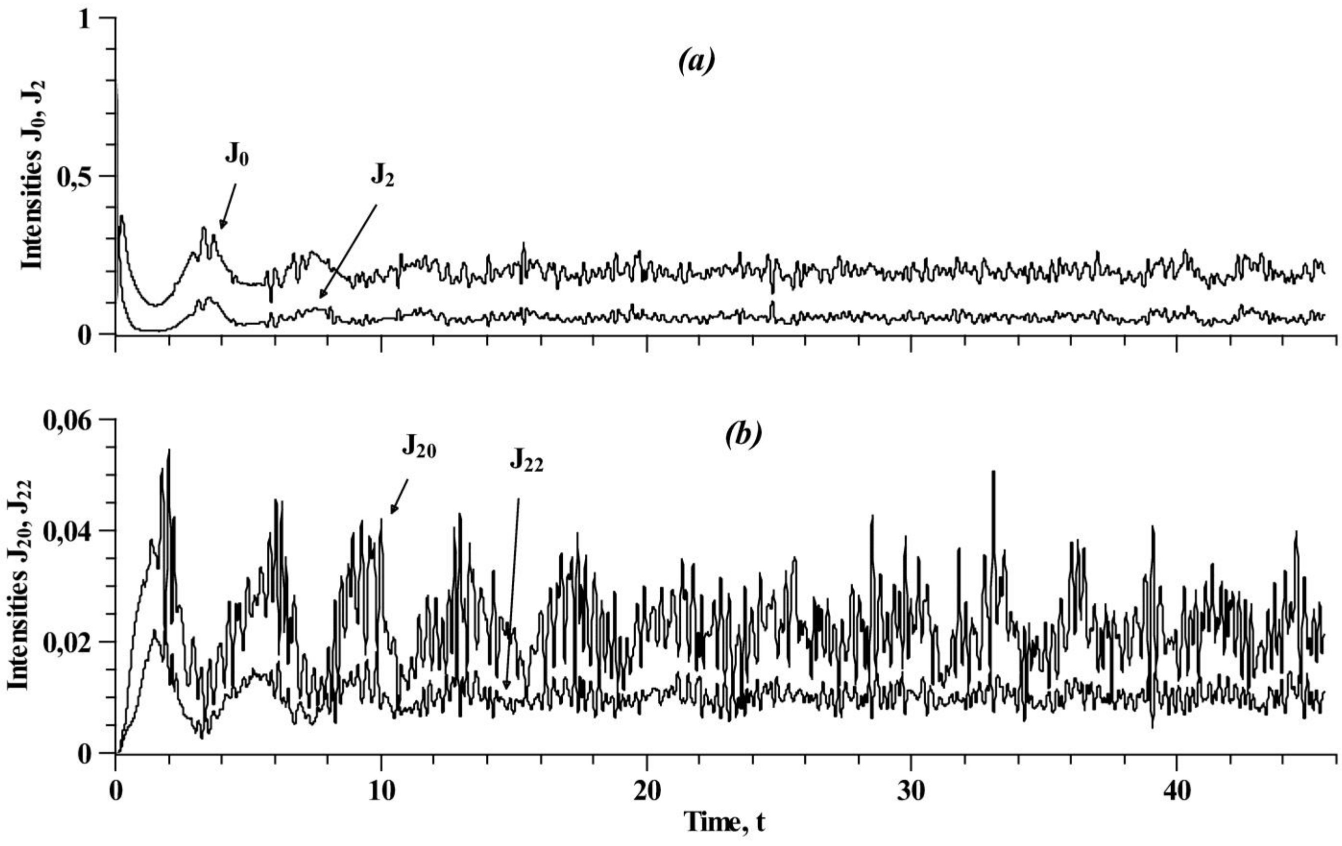
$$\Downarrow$$

$$\rho(\tau) = diag\{\rho^{\frac{N}{2}}, \rho^{\frac{N}{2}-1}, ..., \rho^{\frac{N}{2}-\left[\frac{N}{2}\right]}\}$$

$$J_{k,S} = \frac{Tr\left\{\rho_k^S \cdot \rho_{-k}^S\right\}}{Tr\left\{I_z^2\right\}}, \quad S = \frac{N}{2}, \frac{N}{2}-1, ..., \frac{N}{2}-\left[\frac{N}{2}\right]$$

$$J_k(\tau) = \sum_S n_N(S) J_{k,S}(\tau),$$

Зависимость интенсивностей МК когерентностей ЯМР от времени для системы из *N*=201спина



МК ЯМР при низких температурах

$$\rho(0) = \rho_{eq} = \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{kT} I_z\right)}{Z},$$

$$G(\tau,\phi) = Tr\left\{e^{i\Phi I_z}\rho_{LT}(\tau)e^{-i\Phi I_z}\cdot\rho_{HT}(\tau)\right\},$$

$$\rho_{LT}(\tau) = e^{-iH_{MQ}\tau}\rho_{eq}e^{iH_{MQ}\tau}; \qquad \rho_{HT}(\tau) = e^{-iH_{MQ}\tau}I_z e^{iH_{MQ}\tau},$$

$$\rho_{LT}(\tau) = \frac{1}{Z}e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}\rho_{HT}(\tau)}.$$

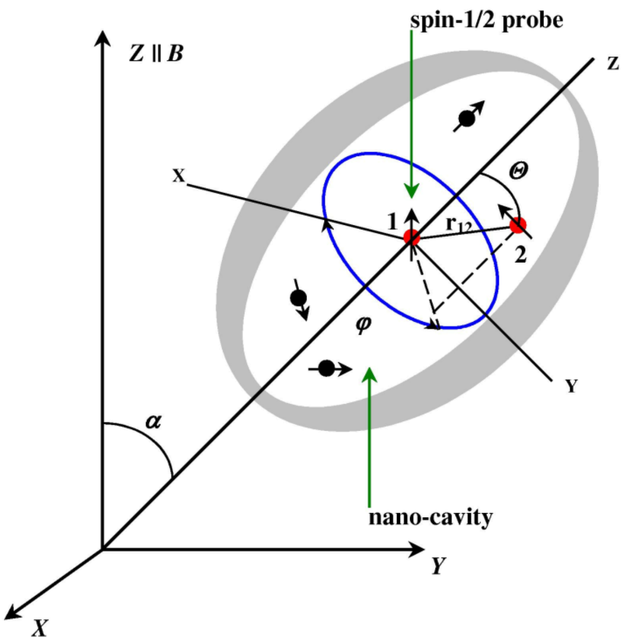
OUT of time ordered correlations (OTOC)

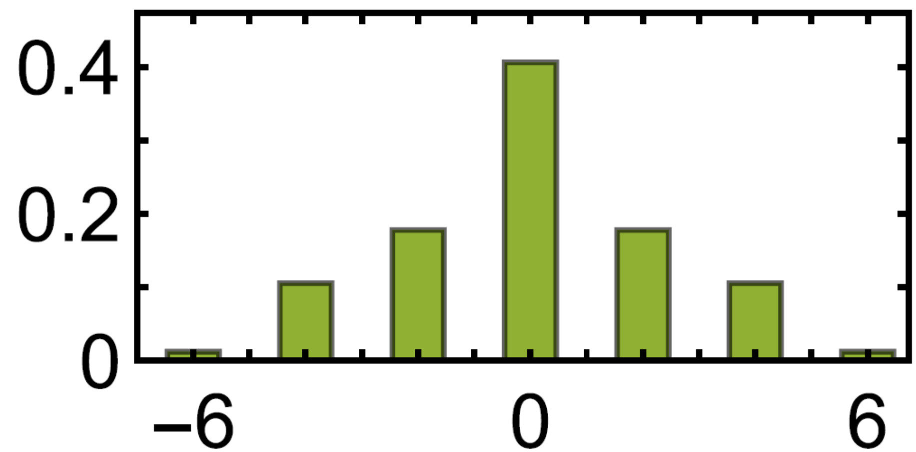
$$G(\tau,\phi) = \frac{b}{Z} Tr\left\{ e^{i\phi I_z} \rho_{HT}(\tau) e^{-i\phi I_z} \rho_{HT}(\tau) \right\},$$

$$b = \frac{\hbar\omega}{kT}$$

$$G_{LT}(\tau,\phi) = \frac{b}{Z} Tr\left\{ e^{i\phi I_z} \rho_{LT}(\tau) e^{-i\phi I_z} \rho_{LT}(\tau) \right\}.$$

Многоквантовая динамика ЯМР в нанопоре при низких температурах

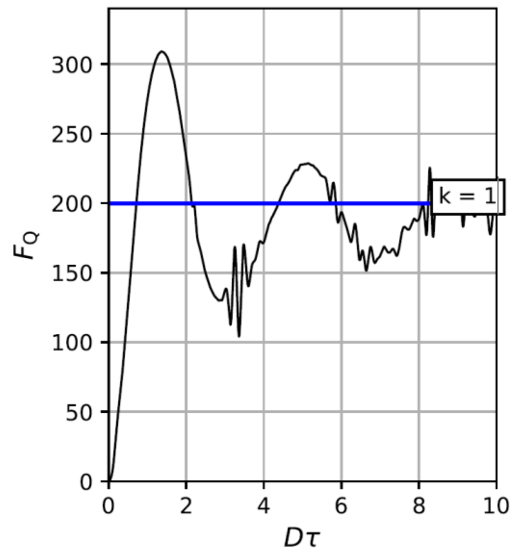


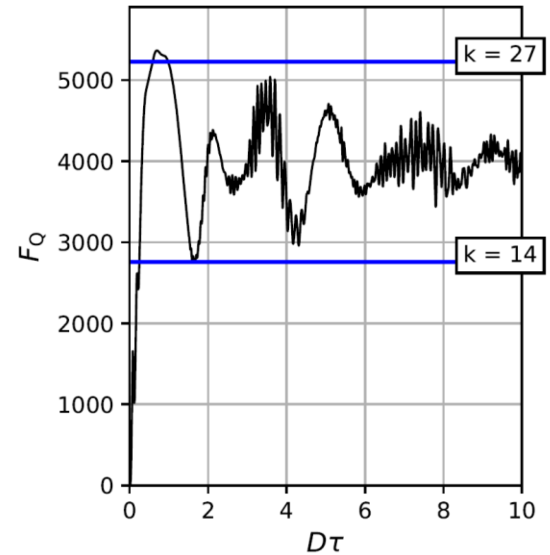


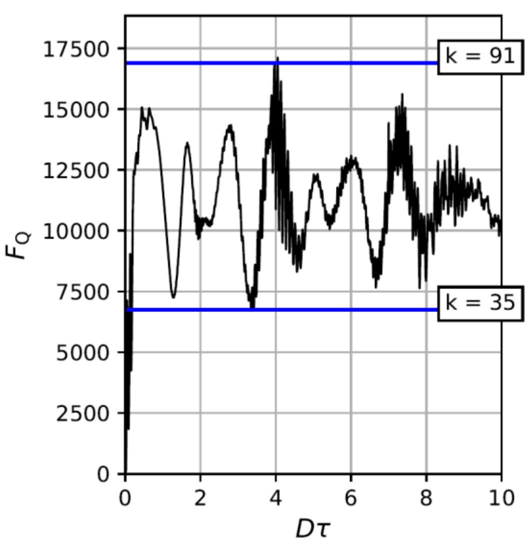
$$M_2(\tau) = \sum_{n=-N}^{N} n^2 J_n(\tau)$$

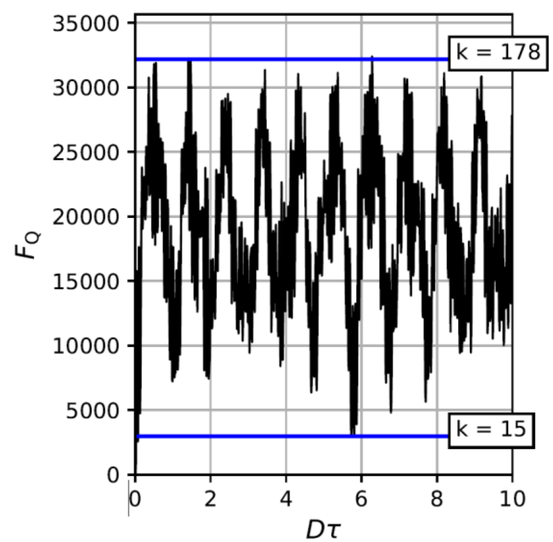
S.I.Doronin, E.B.Fel’dman, I.D.Lazarev, Physical Review A 100, 022330 (2019)

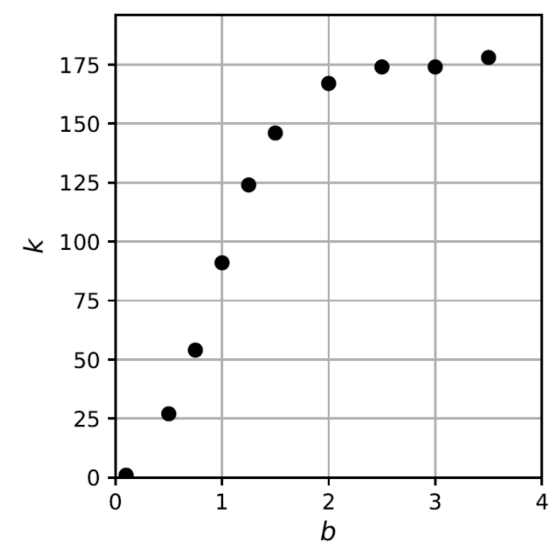
Зависимость числа запутанных спинов от температуры





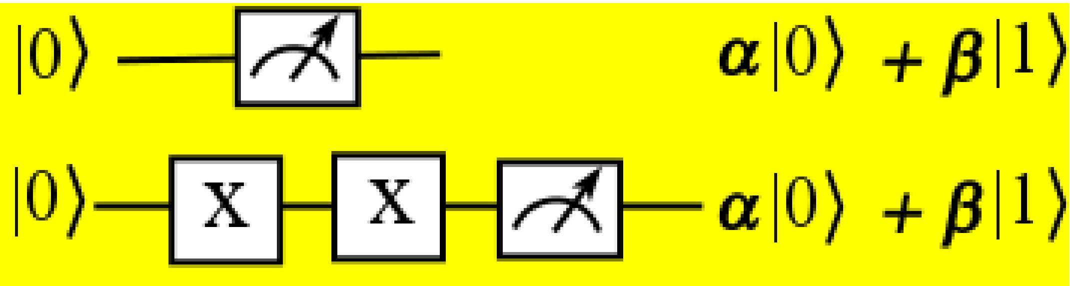






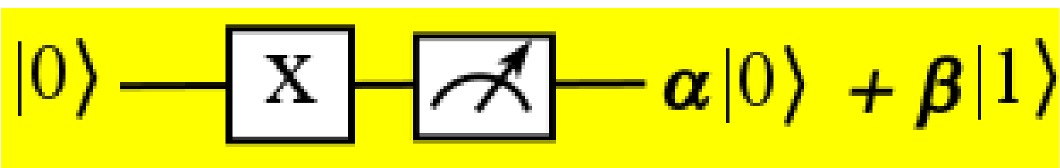
Решение систем линейных уравнений на квантовом процессоре IBM Quantum Experience

Ошибки измерений в простейших схемах



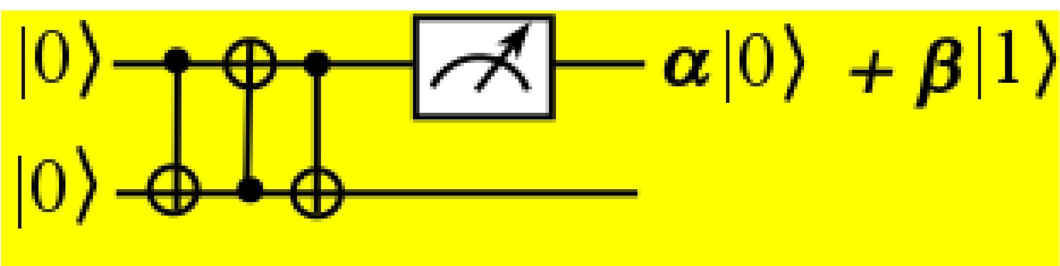
в идеале $|\beta| = 0;$

измерение $|\beta| \sim 0.01$



в идеале $|\alpha| = 0;$

измерение $|\alpha| \sim 0.02$



в идеале $|\beta| = 0;$

измерение $|\beta| \sim 0.05$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Система *M* уравнений в матричном виде: $Ax = b$

Закодируем *k*-ю строку матрицы A^{-1} в унитарный

(M +1) × *(M+1)* оператор ***U***

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} (A^{-1})_k & U^{(12)} \\ U^{(21)} & U^{(22)} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} (A^{-1})_k & U^{(12)} \\ U^{(21)} & U^{(22)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{b} \\ 0_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x_k} \\ U^{(21)}\boldsymbol{b} \end{pmatrix}$$

$$\sum_k |A_{kj}^{-1}|^2 \le 1$$

Полученная система позволяет найти компоненту x_k вектора $x = (x_1, x_2 , \dots , x_M)$

Реализация протокола на квантовом процессоре

По теореме Соловея-Китаева, оператор ***U*** представим в виде комбинации операторов однокубитных вращений

$$\mathrm{R}_j = \exp\left(i\varphi\, I_{\alpha j}\right), \qquad I_{\alpha j} = \frac{1}{2}\sigma_{\alpha j}, \qquad \alpha = x, y, z$$

и CNOTов (*i* – контролирующий спин)

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

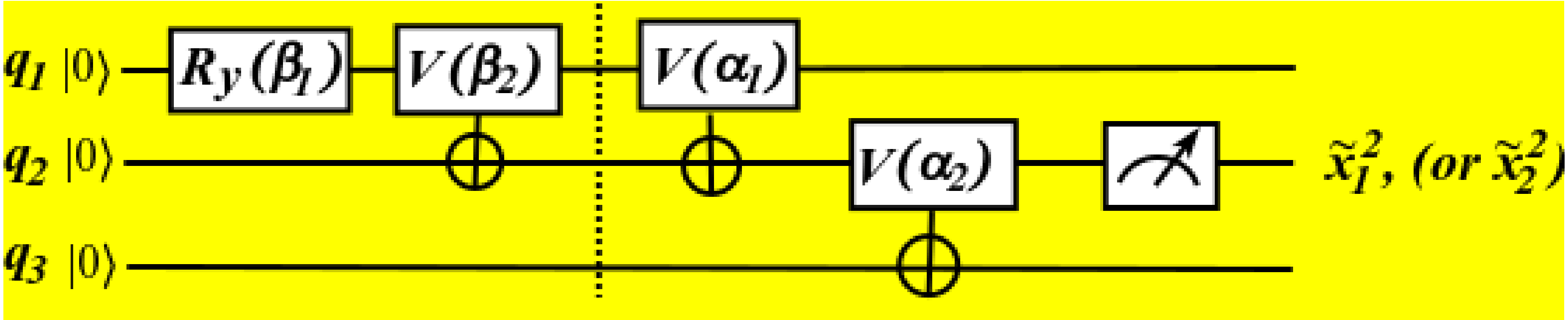
Общая схема реализации протокола решения системы линейных уравнений $Ax = b$

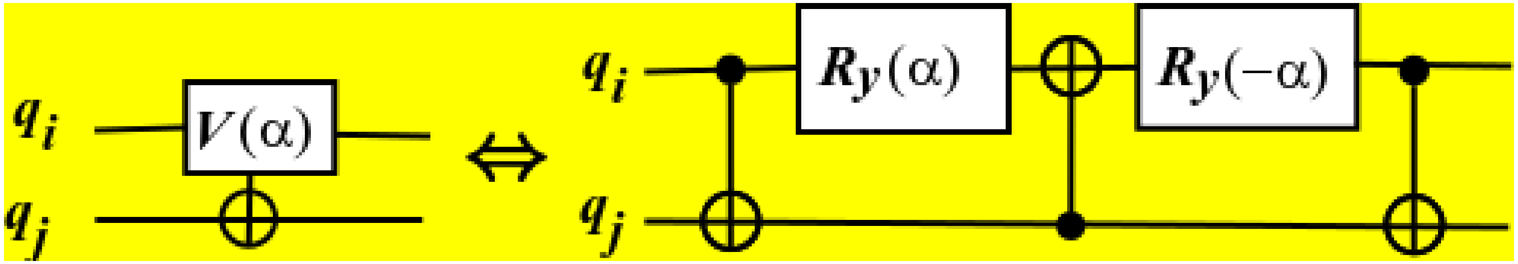
Оба блока состоят из операторов однокубитных вращений и двухкубитных операций CNOTов

Пример: система из двух уравнений

$$A = \begin{pmatrix} -1.8 & 0.6 \\ -0.4 & 1.4 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} -0.6 \\ 0.8 \end{pmatrix}$$

Инициализация ***b*** Реализация оператора ***U***





Система из трех уравнений

$$A = \begin{pmatrix} 0.9 & -0.6 & -1.8 \\ 1.6 & -0.5 & -0.6 \\ 0.8 & -1.4 & -0.5 \end{pmatrix}$$

x_i -- точное значение корня

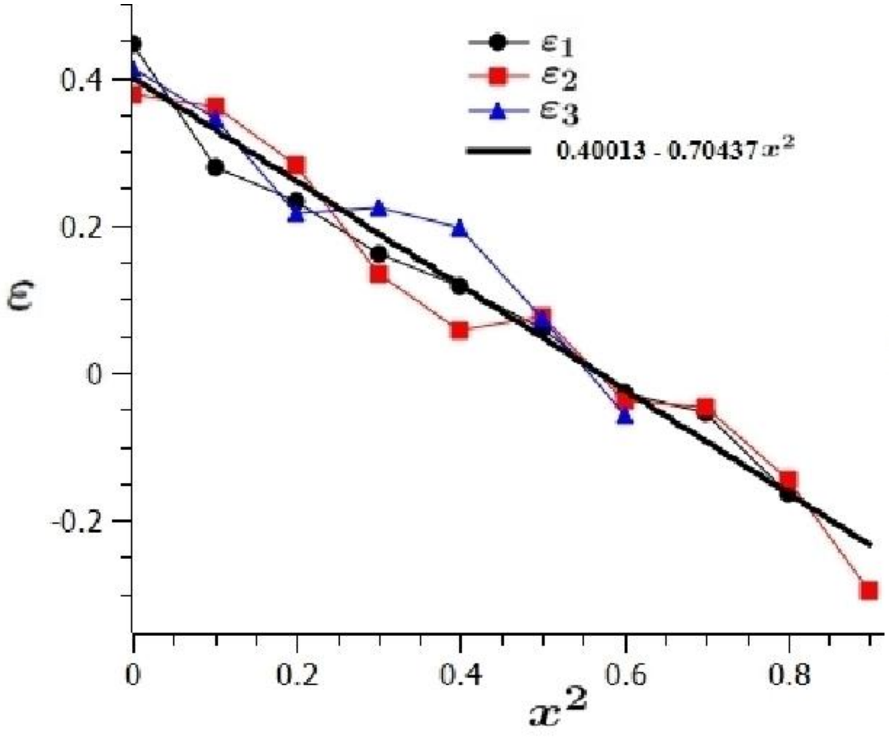
$\tilde{x}_i$ -- измеренное значение

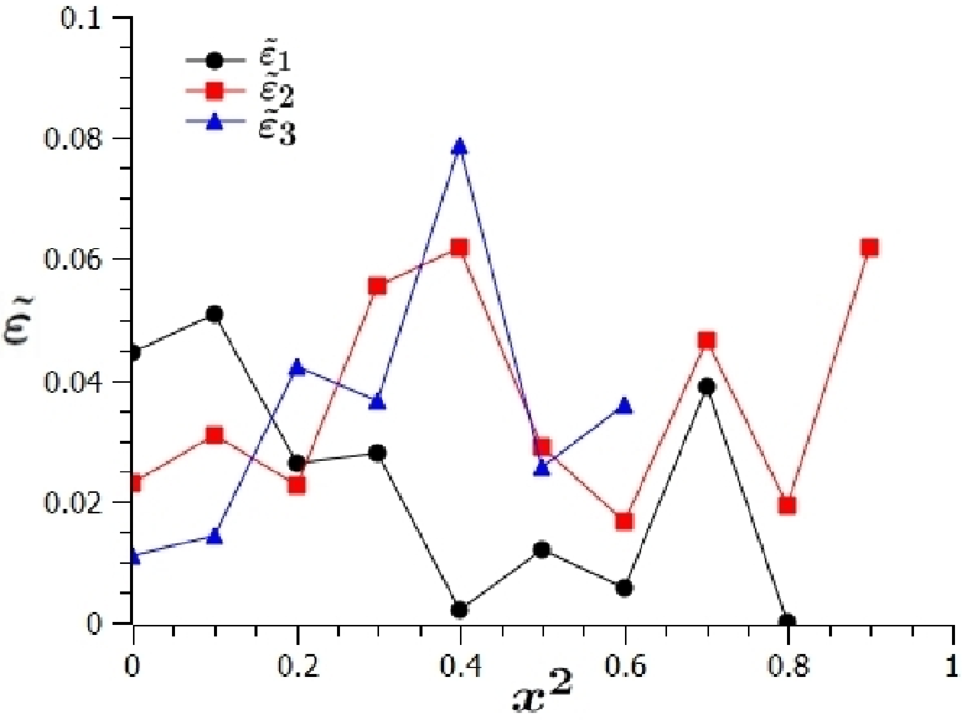
Погрешности измерений

усреднение по решениям для разных ***b***

до коррекции | после коррекции

$$\varepsilon_i = \tilde{x}_i^2 - x_i^2; \ \boldsymbol{\varepsilon(x) = 0.4 - 0.7\,x^2} \longrightarrow \boldsymbol{X_i = \tilde{x}_i^2 - \varepsilon(x_i)}; \ \tilde{\varepsilon}_i = X_i - x_i^2$$





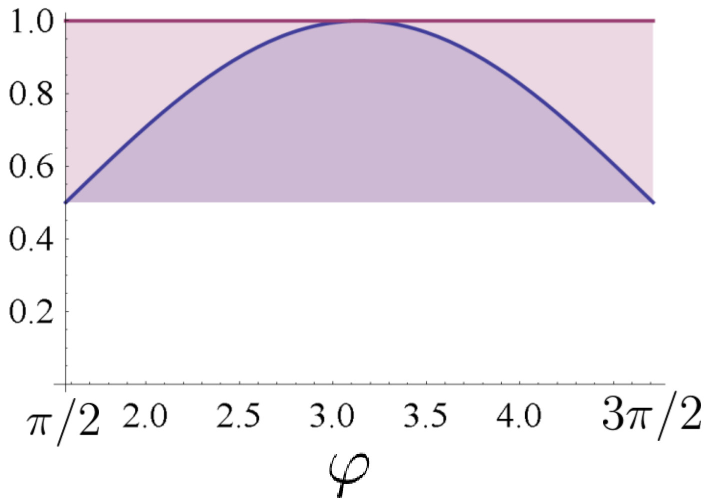
Вычисление числа π на квантовом компьютере

Кубит изначально находится в состоянии $|0\rangle$

Производим поворот вокруг оси Y на угол φ

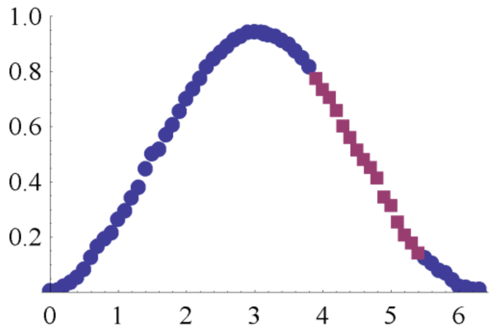
После этого кубит будет в состоянии $\cos(\varphi/2)|0\rangle + \sin(\varphi/2)|1\rangle$

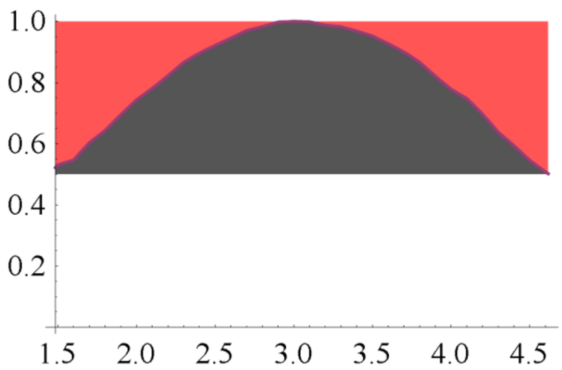
Проведем измерение состояния кубита. Вероятность найти его в состоянии $|1\rangle$ равна $\dfrac{1-\cos\varphi}{2}$



Слева – график этой вероятности в зависимости от φ. Отношение площадей сегмента, закрашенного тёмным цветом, к площади более светлого прямоугольника равно 2/π.

Оценка точности квантовых вычислений на 16-кубитной платформе квантового компьютера по вычислению числа π





- Вероятность получить состояние |1⟩ на реальном квантовом компьютере не равна 0, даже если измеряется начальное состояние, и не достигает единицы при повороте на угол π
- Минимум и максимум могут достигаться не при углах поворота 0 и π соответственно, а при других углах
- Это приводит к изменению масштаба графика по осям и к его сдвигам. Но отношение площадей при этом не меняется.
- Вероятности оцениваются путем многократных (8192) измерений для каждого значения угла

Не все кубиты дают хорошую точность. Например, кубит, на которм были получены графики слева, связан только с одним другим кубитом, и зависимость вероятности от угла близка к синусоиде.

По этим данным получаем π ≈3,13±0,03

Благодарности

Александру Зенчуку, ИПХФ РАН
Елене Кузнецовой, ИПХФ РАН
Сергею Доронину, ИПХФ РАН
Анне Федоровой, ИПХФ РАН
Алексею Пыркову, ИПХФ РАН
Сергею Васильеву, ИПХФ РАН
Георгию Бочкину, ИПХФ РАН
Илье Лазареву, ИПХФ РАН

Лаборатория спиновой динамики и спинового компьютинга ИПХФ РАН

Спасибо за внимание!
С наступающим Новым,
2020-ым годом!