



Національний університет
водного господарства
та природокористування

Міністерство освіти і науки України
**Національний університет водного господарства
та природокористування**

**О.О. Лебедь, О.Ю. Дейнека,
А.В. Рибалко, В.І. Гаращенко**



Національний університет
водного господарства
та природокористування

**ОСНОВИ КВАНТОВОГО КОМП'ЮТЕРА
ТА КВАНТОВОЇ ІНФОРМАТИКИ**

Навчальний посібник

Рівне – 2014



Національний університет

УДК 681.518:53 (075.8)

ББК 32.98:22.3я7

ЛЗЗ

Рецензенти:

Джунь Й.В., д-р фіз.-мат. наук, професор Міжнародного економіко-гуманітарного університету ім. акад. Степана Дем'янчука (м. Рівне);
Древецький В.В., д-р технічних наук, професор Національного університету водного господарства та природокористування (м. Рівне);

Лебедь О.О., Дейнека О.Ю., Рибалко А.В., Гаращенко В.І.

ЛЗЗ Основи квантового комп'ютера та квантової інформатики.

Навч. посібник. – Рівне: НУВГП, 2014. – 151с.

ISBN

Навчальний посібник призначено для вивчення фізичних явищ, методик та технологій, які можуть бути використані при конструюванні квантового комп'ютера. Розглянуто елементи квантової теорії, як теоретичної основи квантового комп'ютера, його будову та принцип роботи. У навчальному посібнику викладено основи квантової інформатики, наведені приклади квантових алгоритмів. Значну увагу приділено питанням технічної реалізації головних елементів квантового комп'ютера: квантовому процесору, квантовій пам'яті та квантовій шині.

Для студентів напрямів підготовки 6.040301 «Прикладна математика», 6.050101 «Комп'ютерні науки», 6.050102 «Комп'ютерна інженерія», 6.050701 «Електротехніка та електротехнології»

УДК 681.518:53 (075.8)

ББК 32.98:22.3я7

ISBN

© Лебедь О.О., Дейнека О.Ю., Рибалко А.В.,
Гаращенко В.І., 2014

© Національний університет водного господарства
та природокористування, 2014



Передмова

В основу навчального посібника покладено конспект лекцій спецкурсу «Фізичні основи інформаційних систем» для студентів напряму підготовки «Прикладна математика» Національного університету водного господарства та природокористування. Цей односеместровий спецкурс впродовж декількох років викладав співавтор підручника О.О. Лебедь.

Існує щонайменше три глобальні сфери діяльності людини, в яких необхідне використання комп'ютерів:

- Застосування комп'ютерів для автоматизації обчислень (розв'язування складних математичних задач);
- Використання комп'ютерів в системі управління (вони повинні автоматизувати збір даних, забезпечити розподіл обробки результатів і процес обчислення);
- Вирішення проблем створення штучного інтелекту (робототехніка, машинні переклади текстів, планування з урахуванням неповної інформації, складання прогнозів тощо).

Завдання для комп'ютерної техніки безперервно ускладнювалися з моменту створення перших ЕОМ до сучасних суперкомп'ютерів та інтегрованих комп'ютерних мереж (GRID). В останній чверті XX століття поступово визріло розуміння того, що існують задачі, які принципово не можуть бути розв'язані за допомогою «класичних» комп'ютерів. Настав час перейти до обчислень за допомогою нового типу комп'ютера – квантового, який базується на квантових законах, використовує квантові алгоритми для роботи з квантовою інформацією.

Квантовий комп'ютинг – це нова галузь науки і технології, що надзвичайно швидко розвивається. Вона поєднує в собі розділи фізики, математики, кібернетики та інженерії. Її метою є з'ясування фундаментальних законів фізики, відкритих в XX-ому столітті, для отримання, передачі та обробки зростаючих обсягів інформації. Вона повинна забезпечити використання квантових систем для реалізації принципово нових методів передачі повідомлень, обчислень і технологій (квантові канали зв'язку, квантова криптографія, квантовий комп'ютер).

При роботі над теоретичними засадами та практичною реалізацією квантового комп'ютера вдалося отримати нові знання із застосу-



вання фундаментальних законів фізики та інформатики, а також про процеси, з якими раніше фізика ніколи не мала справи – таких як декогеренція і рекогеренція, про які буде докладно розказано в навчальному посібнику. У результаті в науці виникли нові прикладні напрямки: теорія сплєтених станів, теорія декогеренції, квантова теорія інформації та інші сучасні розділи квантової теорії, які часто об'єднують під загальною назвою «фізика квантової інформації».

Метою цього посібника є висвітлення тих розділів квантової механіки, які використовуються при побудові квантового комп'ютера і необхідні для розуміння теорії квантової інформації.

В завдання посібника входить детальний опис однокубітних та багатокубітних квантових систем, опис основних логічних елементів та алгоритмів квантової інформатики, а також знайомство з найновішими досягненнями в галузі квантових інформаційних технологій.

Для вивчення цієї дисципліни необхідно, щоб студенти були знайомі з курсами вищої математики та загальної фізики в обсязі стандартної програми для технічних університетів. Особливий акцент потрібно зробити на курс квантової механіки, а також курси лінійної алгебри та теорії ймовірностей.

Автори спільно розробляли план і обговорювали зміст усіх розділів навчального посібника. Розділ I написаний А.В. Рибалком, В.І. Гарашенком та О.О. Лебедем, розділи II і IV О.О. Лебедем, а розділ III – О.Ю. Дейнекою.

Автори висловлюють подяку колегам В.Ф. Орленку, О.Д. Кочергінній за цінні зауваження при обговоренні книги, а також К.О. Віннік – за якісні ілюстрації до посібника.



1.1. Корпускулярно-хвильовий дуалізм природи мікрочастинок

Квантова механіка описує рух і взаємодію мікрооб'єктів: молекул, атомів, складових частинок атомів, квантів електромагнітного випромінювання тощо. Її засади формувалися на початку ХХ століття (1900 рік), коли німецький фізик Макс Планк теоретично пояснив експериментальні результати теплового випромінювання абсолютно чорного тіла, яке не описувалося рамками класичної фізики. Для цього пояснення Планк припустив, що атом випромінює світло (інфрачервоного, видимого, ультрафіолетового діапазонів) окремими дискретними порціями енергії – *квантами*. Згідно його гіпотези енергія такого окремого кванта дорівнює

$$E = h\nu, \quad (1.1)$$

де $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ – стала Планка, ν – частота електромагнітної хвилі цього кванта. А вже у 1905 році А. Ейнштейн припустивши, що світло не лише випромінюється, а й поширюється та поглинається квантами, успішно пояснив закономірності зовнішнього фотоелектру.

Отже, світло має подвійну природу: в одних випадках воно веде себе як електромагнітна хвиля, про що свідчать явища інтерференції, дифракції, дисперсії світла, а в інших – як потік частинок (*корпускул*), на що вказують закономірності теплового випромінювання, фотоелектру, ефекту Комптона тощо. Така двоякість природи світла була названа *корпускулярно-хвильовим дуалізмом*, а частинку (корпускулу) світла назвали *фотоном*. В природі нерухомих фотонів не існує. Швидкість руху фотона у вакуумі, згідно принципу відносності Ейнштейна, однакова в усіх інерціальних системах відліку і дорівнює $c = 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$.

Важливою фізичною характеристикою довільної рухомої частинки (не обов'язково мікроскопічної) є її *імпульс* (p) – добуток маси m на швидкість v

$$p = mv. \quad (1.2)$$

Фотон теж володіє імпульсом. З'ясовано, що цей імпульс дорівнює



$$p_{\phi} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}, \quad (1.3)$$

де λ – довжина електромагнітної хвилі фотона.

Аналізуючи корпускулярно-хвильові властивості світла, французький вчений Луї де Бройль у 1923 році висунув гіпотезу про те, що не лише світло, але й усі тіла в природі повинні володіти як корпускулярними, так і хвильовими властивостями одночасно. Тому співвідношення (1.3) повинне бути справедливим не тільки для фотона, а й для усіх частинок що мають імпульс p . Тобто кожній рухомій частинці відповідає *довжина хвилі де Бройля*

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu} \quad \text{або} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad (1.4)$$

де $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ – стала Планка з рискою (стала Дірака), $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – хвильове число.

Ця гіпотеза отримала блискуче експериментальне підтвердження. Наприклад, відомо, що за певних умов хвилям притаманне явище *дифракції*. Його можна спостерігати направляючи хвилю на вузьку щілину, за розмірами сумірну з довжиною цієї хвилі. Внаслідок на екрані отримується дифракційна картина, яка складається з чергування ділянок з максимальною та мінімальною амплітудою коливань. Більш складна дифракційна картина отримується внаслідок опромінення великої кількості таких щілин – дифракційної решітки.

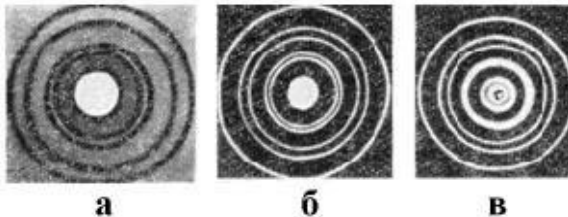


Рис. 1.1. а) дифракційна картина від рентгенівських променів на пластинці Al; б) і в) дифракційна картина від електронів на плівках Au і Cu відповідно

Прикладом так званої просторової дифракційної решітки є кристалічна решітка твердих тіл. Для більшості речовин період такої решітки становить приблизно 10^{-10} м, що відповідає довжині хвилі рентгенівських променів. Тому, якщо вузький пучок рентгенівсько-



го випромінювання проходить крізь дрібнокристалічний порошок або тонку металеву пластинку, то після його проходження на фотографічній пластинці утворюється дифракційна картина у вигляді кілець. На рис. 1.1 а подано фотографію дифракційної картини, отриманої при розсіюванні рентгенівських променів пластинкою алюмінію.

Аналогічну картину спостерігали у 1928 р. Д. Томсон і П. Тартаковський при пропусканні крізь металеві плівки потоків електронів. На рис. 1.1 б і в зображені фотографії дифракційних картин, отриманих при розсіюванні пучка електронів, що пройшли крізь тонкі плівки золота і міді. Як видно з фотографій дифракційні картини в обох випадках однакові, що є незаперечним доказом хвильових властивостей мікрочастинок.

Необхідно також згадати відомі досліди В. Фабриканта з дифракції окремо взятих електронів, розсіяних металевими плівками. Вони підтвердили той факт, що хвильові властивості притаманні кожній мікрочастинці окремо, а не є проявом їх колективу.

Пізніше були отримані експериментальні дані, що підтверджують хвильову природу не тільки електронів, а й інших мікрочастинок.

Проте хвилі де Бройля не слід розуміти буквально, як наприклад електромагнітні. Вони мають статистичний зміст: *квадрат модуля амплітуди хвилі де Бройля в певній точці простору є мірою ймовірності того, що частинку можна виявити в цій точці*. Наприклад, під час дифракції електрони потрапляють саме в ті точки екрану де інтенсивність хвилі де Бройля є найбільшою, і не потрапляють туди, де ця інтенсивність дорівнює нулю.

У класичній механіці певному значенню координати частинки відповідають точні значення її імпульсу. Внаслідок хвильових властивостей мікрочастинок існують обмеження в можливостях одночасного точного визначення координат та імпульсів мікрооб'єктів. Це обмеження визначається *співвідношенням невизначеностей* Гейзенберга

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar, \quad (1.5)$$

де Δx , Δy , Δz – інтервали координат, де може бути локалізована частинка, Δp_x , Δp_y , Δp_z – невизначеність (похибка) значень проєкцій її імпульсу. Наприклад, якщо $\Delta x = 0$, то $\Delta p_x \rightarrow \infty$ і навпаки. Тобто



співвідношення невизначеностей не сумісне з поняттям траєкторії.

Між шириною енергетичного рівня збудженого стану ΔE і часом перебування частинки в цьому стані Δt існує аналогічне співвідношення невизначеностей

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (1.6)$$

Тобто, енергія частинки в збудженому стані може бути визначена тим точніше, чим довше частинка перебуватиме в цьому стані.

Оскільки мікрочастинки володіють хвильовою природою, а хвиля – просторово-часовий процес, то у квантовій механіці стан частинки визначається за допомогою хвильової функції на множині комплексних чисел Ψ (Ψ – грецька буква, яка читається як «псі»). Аргумент цієї функції вибирається в залежності від того, що цікавить дослідників квантової системи. Якщо досліджується, наприклад, просторове розташування електронів навколо ядра атома чи в молекулі, то аргументами хвильової функції вибирають просторові координати відносно центру мас $\psi(\vec{r}) \equiv \psi(x, y, z)$. Якщо ж цікавить динамічна поведінка квантового об'єкту, наприклад в зовнішньому магнітному полі, то в якості аргументу хвильової функції вибирають час та певні магнітні властивості квантової системи (наприклад, її магнітний момент). Розгляд хвильової функції як комплексної функції різних наборів аргументів називають різними «представленнями» квантового об'єкта, які не є альтернативними, а, навпаки, суттєво доповнюють одне одного. Взагалі, представлення хвильової функції може бути безліч.

Хвильова функція у першому представленні описує просторову структуру електронної «шуби» атома чи молекули – свого роду «стоячу хвилю» навколо ядра чи кількох ядер. Вона дозволяє знайти ймовірність dw того, що частинка (електрон) знаходиться в елементарному об'ємі dV

$$dw = |\Psi|^2 dV, \quad (1.7)$$

де $|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$ – квадрат модуля хвильової функції, Ψ^* – функція спряжена до Ψ . Інтенсивність хвилі де Бройля визначається величиною $|\Psi|^2$. Ця величина є завжди додатною, на відміну від амплітуди Ψ , яка може бути і від'ємною.

Друге представлення описує особливості станів рівноваги та



прецесії квантового об'єкта в магнітному полі. Хвильова функція теж нормується так, щоб інтеграл від квадрата її модуля по усіх можливих проєкціях в будь-який момент часу дорівнював одиниці. Тоді квадрат Ψ – функції можна розглядати як густину імовірності відповідної орієнтації магнітного моменту об'єкта або як густину розподілу багатьох ідентичних квантових об'єктів за орієнтацією їх в магнітному полі у момент часу t .

Найчастіше в навчальній літературі функція Ψ розглядається в першому представленні. І в ньому її можна подати як розподіл густини ймовірності перебування частинки в певній точці простору в певний момент часу. В подальшому викладенні, якщо «пси – функція» залежить від координат і часу, ми будемо зображати її великою літерою $\Psi(\vec{r}, t)$, а у всіх інших випадках і коли це не важливо, маюмо – ψ (наприклад, $\psi(\vec{r})$).

Якщо ми переконані, що частинка точно перебуває в певному об'ємі V (ймовірність цієї події дорівнює 1), то

$$\int_V dw = \int_V |\Psi|^2 dV = 1. \quad (1.8)$$

Вираз (1.8) є умовою нормування функції Ψ .

Поле, що описується пси-функцією, ще називають дебройлівським. На відміну від гравітаційного та електромагнітного, дебройлівське поле не є силовим.

У 1930 році П. А. М. Дірак [1] запропонував постулат: кожній квантовій системі ставиться у відповідність комплексний векторний простір – **простір станів**. Стан замкнутої квантової системи, замість функції Ψ , можна описувати вектором в гільбертовому просторі H , який позначається як $|\Psi\rangle$ («кет-вектор»). Кожному кет-вектору $|\Psi\rangle$ ставиться у відповідність бра-вектор $\langle\Psi|$ із простору H^* , спряженому до H . Назва векторів пішла від «уполовинення» англійського слова «дужка»: $\langle\text{дужка}\rangle = \langle\text{bracket}\rangle = \langle\text{bra|cket}\rangle$ Дopusкаючи деяку математичну свободу, іноді говорять, що бра-вектори «співпадають» з відповідними їм ермітовоспряженими кет-векторами. Інколи бра-вектори ототожнюють з вектором-рядком, а кет-вектор – з вектором-стовпцем. Скалярний (внутрішній) добуток бра-вектора з кет-вектором (а точніше, дію бра-вектора на кет-



вектор) записується у вигляді $\langle \varphi | \psi \rangle$. Для двокомпонентних векторів внутрішній (скалярний) добуток $\langle \varphi | \psi \rangle = \varphi_1^* \psi_1 + \varphi_2^* \psi_2$ є комплексним числом. Зовнішній добуток кет-вектора з бра-вектором $|\varphi\rangle\langle\psi|$ є матрицею. Для двокомпонентних векторів

$$|\varphi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \varphi_1^* \psi_1 & \varphi_1^* \psi_2 \\ \varphi_2^* \psi_1 & \varphi_2^* \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Квадрат вектора, за визначенням гільбертового простору, невід'ємний: $\langle \Psi | \Psi \rangle \geq 0$. Оскільки в діраковському представленні важливий лише напрямок вектора стану в гільбертовому просторі, а не його величина, то можливе накладання умови нормування на даний вектор. Ця умова описується рівнянням:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1. \quad (1.10)$$

У квантовій механіці доводиться, що за допомогою хвильової функції (якщо вона відома) можна знайти середнє значення фізичних величин (координати, енергії, ентропії тощо) $\langle A \rangle$ за формулою

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r}, \quad (1.11)$$

де \hat{A} – відповідний квантовий оператор, яким поділяли на функцію Ψ .

В діраковському представленні середнє значення фізичної величини A записується у вигляді:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle. \quad (1.12)$$

Нагадаємо, що оператором у математиці розуміють рецепт, за яким за заданою функцією $\psi(q)$ знаходить іншу функцію $\varphi(q)$:

$$\varphi(q) = \hat{A} \psi(q). \quad (1.13)$$

Наприклад, загальновідомим є оператор Лапласа, який позначається ∇^2 або Δ , і зводиться до суми частинних похідних другого

$$\text{порядку за координатами: } \nabla^2 \Psi = \Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}.$$

Отже, кожній фізичній величині, що характеризує стан частинки у класичній механіці відповідає певний оператор квантової механіки. Ця відповідність відображена у таблиці 1.



Фізичні величини та оператори, які їм відповідають

Фізична величина	Оператор
Координата: \vec{r} , x , y , z .	Оператор множення: \vec{r} , x , y , z .
Імпульс: \vec{p} , p_x , p_y , p_z .	$\hat{p} = -i\hbar\nabla; \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$ $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$
Момент імпульсу: $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix},$ $L_x = yp_z - zp_y,$ $L_y = zp_x - xp_z,$ $L_z = xp_y - yp_x$	$\hat{L} = [\vec{r} \times \hat{p}] = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$ $\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$ $\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right),$ $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$
Кінетична енергія: $K = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}.$	$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta =$ $= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right).$
Потенціальна енергія: $U(\vec{r}, t) = U(x, y, z, t).$	Оператор множення: $U(\vec{r}, t) = U(x, y, z, t).$
Повна енергія: $E = \frac{p^2}{2m} + U(x, y, z, t).$	Оператор Гамільтона (гамільтоніан): $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z, t).$

де i – уявна одиниця ($i = \sqrt{-1}$).



Квантова механіка, згідно принципу суперпозиції, найчастіше має справу з лінійними операторами, які діють на будь-яку лінійну комбінацію векторів за наступним правилом:

$$\hat{A}(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) = \alpha\hat{A}|\psi_1\rangle + \beta\hat{A}|\psi_2\rangle. \quad (1.14)$$

Зрозуміло, що види вказаних операторів були з'ясовані на основі певних фундаментальних принципів квантової механіки. Зокрема – це принцип спостережуваності фізичних величин, згідно якого результати експериментальних вимірювань є дійсні числа. Тому середні значення операторів, що представляють фізичні величини – теж дійсні числа

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^*. \quad (1.15)$$

Деякі корисні відомості про лінійні оператори в квантовій теорії.

1. Якщо \hat{A} – оператор, а $|\psi\rangle$ – початковий вектор стану, то перетвореним (кінцевим) вектором стану буде $\hat{A}|\psi\rangle$. Кожній фізичній величині A у квантовій механіці ставиться у відповідність оператор цієї величини \hat{A} , такий що її середнє значення в деякому стані визначається за формулою (1.11).

2. Скалярним добутком цього перетвореного вектора на вектор $|\varphi\rangle$ буде $\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle$.

3. Оператори можна додавати, множити на комплексне число, в наслідок чого отримуються інші оператори.

4. Одиничний оператор \hat{I} залишає всі оператори та вектори без змін.

5. Оператору \hat{A} відповідає матриця $\{A_{mn}\}$ з елементами $a_{mn} = \langle \varphi_m | \hat{A} | \varphi_n \rangle$, де елемент матриці a_{mn} – m -та компонента вектора $\hat{A}|\varphi_n\rangle$ в деякому ортонормованому базисі $\{\varphi_n\}$. Для векторів цього базису виконується співвідношення $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn}$, де δ_{mn} – символ Кронекера, а саме функція двох змінних, яка набуває значення 1, якщо значення змінних однакові, і 0 в іншому випадку:



$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } i = j, \\ 0, & \text{якщо } i \neq j. \end{cases}$$

6. Одиничний оператор можна розкласти: $\hat{I} = \sum_{n=1}^D |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$. Це справедливо для довільного повного ортонормованого базису $\{|\varphi_n\rangle\}$.

Наслідок. Вектор $\hat{A}|\psi\rangle$ можна подати за допомогою послідовності $\{(\hat{A}\psi)_m\}$,

$$\text{де } (\hat{A}\psi) = \langle\varphi_m|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{n=1}^D \langle\varphi_m|\hat{A}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_{n=1}^D a_{mn}\psi_n. \quad (1.16)$$

7. Оператор \hat{A}^+ називають **спряженим (ермітово спряженим)** до оператора \hat{A} , якщо для будь-яких Ψ та φ справедлива рівність

$$\langle\varphi|\hat{A}^+|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle^*,$$

або

$$\int \varphi^* \hat{A} \psi d\vec{r} = \int \varphi (\hat{A} \psi)^* d\vec{r}. \quad (1.17)$$

8. **Нормальним** називається оператор, для якого $\hat{A}\hat{A}^+ = \hat{A}^+\hat{A}$. Справедливою є теорема про спектральний розклад: *будь-який нормальний оператор \hat{M} , визначений на векторному просторі V , має діагональне представлення в деякому базисі, що належить V .*

9. Внаслідок дійсності спостережуваних величин, оператори квантової механіки повинні бути **самоспряженими**, тобто

$$\hat{A} = \hat{A}^+. \quad (1.18)$$

Самоспряжені оператори називають ще **ермітовими**. Наприклад, оператор диференціювання $\frac{d}{dx}$ не є ермітовим. Зрозуміло, що усі оператори, наведені в таблиці 1 ермітові. В силу ермітовості операторів впливає умова ермітовості їх матриць $\{A_{nm}^*\} = \{A_{nm}\}$. Власливості ермітових операторів докладніше буде з'ясовано у розділі 3.

10. В скінченномірному гільбертовому просторі кожному ермітовому оператору відповідає повний набір ортогональних власних



векторів (або власних функцій) і дійсних власних значень, для яких має місце співвідношення

$$\hat{A}|\Psi_n\rangle = A_n|\Psi_n\rangle. \quad (1.19)$$

У загальному випадку це рівняння має розв'язок не для довільних значень A , а лише для певних A_1, A_2, \dots . Сукупність A_1, A_2, \dots може утворювати як дискретний ряд значень, так і неперервний у деякому інтервалі. Величини A_1, A_2, \dots називаються **власними значеннями оператора \hat{A}** , а відповідні цим власним значенням вектори $|\Psi_1(\vec{r}, t)\rangle, |\Psi_2(\vec{r}, t)\rangle, \dots$ – **власними векторами оператора \hat{A}** . Сукупність власних значень оператора \hat{A} називають спектром цього оператора. Числа n називають квантовими числами.

У деяких випадках одному й тому ж власному значенню A_n відповідають декілька власних векторів (або власних функцій): $|\Psi_{n1}\rangle, |\Psi_{n2}\rangle, \dots, |\Psi_{ns}\rangle$. Тоді говорять, що це власне значення A_n є **виродженням s -кратно**. Число s може бути й нескінченим, тобто матиме місце нескінченно кратне виродження.

11. Різниця добутків операторів $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$ називається комутатором операторів. Оператори \hat{A} і \hat{B} називаються комутуючими, якщо їх добуток $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Для комутуючих операторів існує спільний набір власних функцій. Співвідношення невизначеностей для фізичних величин означає що їх оператори **не комутують** ($[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$). Можна показати, наприклад, що для операторів координати та імпульсу справедливе співвідношення

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x]\psi &= \left[x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial (x\psi)}{\partial x} = \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi = i\hbar \psi, \quad (1.20) \\ [\hat{x}, \hat{p}_x] &= i\hbar. \end{aligned}$$

Ілюструючи пункт 10, можна показати, наприклад, на основі таблиці 1, що власною функцією оператора імпульсу є плоска хвиля де Бройля виду



$$\psi_p(\vec{r}) = C \exp\left(\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right). \quad (1.21)$$

Справді, діючи безпосередньо на неї оператором імпульсу \hat{p} , тобто беручи похідні за координатами (див. таблицю 1), маємо

$$\hat{p}\psi_p(\vec{r}) = \vec{p}\psi_p(\vec{r}). \quad (1.22)$$

Ця функція також є і власною функцією оператора кінетичної енергії:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_p(\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}\psi_p(\vec{r}), \quad (1.23)$$

причому оскільки власне значення енергії не залежить від напрямку імпульсу \vec{p} , то маємо приклад нескінченно кратного виродження,

адже одному значенню $\frac{\vec{p}^2}{2m}$ відповідає безліч функцій $\psi_p(\vec{r})$, які відрізняються лише напрямками вектора \vec{p} .

Вимірювання фізичних величин A в стані $\Psi(\vec{r}, t)$, дають взагалі щораз інші значення, але кожного разу із сукупності A_1, A_2, \dots і тільки! Тобто спектр можливих значень спостережуваних величин збігається із спектром операторів, що з ними зіставляються.

Серед великої кількості операторів фізичних величин існують так звані оператори породження і знищення, які будуть використані нами в розділі 4. Ці оператори задаються рівняннями:

$$\hat{a}^+\Psi_N = \sqrt{N+1}\Psi_{N+1} \text{ та } \hat{a}\Psi_N = \sqrt{N}\Psi_{N-1}, \quad (1.24)$$

де Ψ_N – хвильова функція N тотожних частинок, що перебувають в одному і тому ж квантовому стані (наприклад, фотони в лазері). Частинки, що описуються такими хвильовими функціями і операторами, називаються бозонами. Для ферміонів хвильові функції та оператори породження і знищення є іншими (докладніше про бозони та ферміони див. в параграфі 1.2.1).

Очевидно, що $\hat{a} \neq \hat{a}^+$, а оператор числа частинок $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$ є ермітовим: $\hat{N}^+ = \hat{N}$.

Будь-який квантовий об'єкт, тобто величина A в залежності від своєї еволюції може опинитися в одному з трьох типів квантових станів.



У власному стані φ_n якогось оператора \hat{A} (наприклад, енергії)

коли точно відомо, що

$$\langle A \rangle = a_{nn} \equiv \int \varphi_n^* \hat{A} \varphi_n d\vec{r} \quad (1.25)$$

і A не зазнає флуктуацій. Проілюструвати це можна наступним прикладом. Відомо, що фотони мають лише два взаємно перпендикулярних напрямки вектора поляризації – умовно вертикального (позначають, V , або $|\updownarrow\rangle$) і горизонтального (H , або $|\leftrightarrow\rangle$). Ψ – функції вертикально і горизонтально поляризованих фотонів можна записати у вигляді $\Psi(|\updownarrow\rangle)$ і $\Psi(|\leftrightarrow\rangle)$. Часто символ « Ψ » опускають і тоді стани вертикально та горизонтально поляризованих фотонів задається однозначно:

$$|V\rangle \equiv |\updownarrow\rangle = 1 \cdot |\updownarrow\rangle + 0 \cdot |\leftrightarrow\rangle \quad \text{та}$$

$|H\rangle \equiv |\leftrightarrow\rangle = 0 \cdot |\updownarrow\rangle + 1 \cdot |\leftrightarrow\rangle$. Якщо є фотони лише однієї поляризації, (наприклад, вертикальної), то при вимірюванні відліки будуть ресструватися тільки поляризаційним світлоподільником вертикальної поляризації;

В чистому стані. Чисті стани квантової системи можна описати вектором стану $|\Psi\rangle$, а також за допомогою деякої величини, що називається матрицею густини і яка задається зовнішнім добутком $|\Psi\rangle\langle\Psi|$. Чистий стан створюється **суперпозицією** або розкладом в базисі векторів φ_n

$$\Psi(r, t) = \sum_n a_n \varphi_n(r), \quad (1.26)$$

де коефіцієнти розкладу $a_n = \int \varphi_n^*(q) \varphi(q) dq$. Якщо n приймає неперервні значення, то в виразі (1.26) сумування замінюється інтегруванням. a_1, a_2, \dots, a_n – взагалі комплексні числа.

Чисті стани є когерентними. **Когерентний стан** квантової системи, яка може знаходитися лише в двох ортонормованих станах (умовно назвемо їх $|0\rangle$ та $|1\rangle$) – це стан, який може бути описаний у вигляді суперпозиції цих базисних станів:



$$|0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1, \langle 0|1\rangle = 0, \quad (1.27)$$

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

де α і β в загальному вигляді є комплексними числами.

Як приклад можна навести стан поляризації фотона

$$|+45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\uparrow\rangle + |\leftrightarrow\rangle \}. \quad (1.28)$$

Відповідна імовірність зареєструвати відліки становить 50 відсотків.

Особливістю суперпозиційного стану є наявність двох додаткових суперпозиційних членів в його матриці густини

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1| + \alpha\beta^*|0\rangle\langle 1| + \alpha^*\beta|1\rangle\langle 0|. \quad (1.29)$$

Поняття когерентності в квантовій фізиці по суті аналогічне поняттю когерентності в оптиці: хвильові функції (вектори стану) квантово-когерентних систем здатні до інтерференції. Дифракція потоку електронів на двох щілинах – це по суті є прояв квантової когерентності хвильового вектора $|\psi(\vec{r})\rangle$ вільного електрона.

Когерентні стани є тими станами, які мінімізують невизначеність Гейзенберга.

В змішаному стані. В такому стані додається неповнота інформації про хвильову функцію, яку дає некогерентна суміш хвильових функцій. Змішані стани не можна описати вектором стану, вони описуються лише матрицею густини. Для змішаних станів (1.27) вона задається виразом $\rho = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1|$. Чисті стани завжди когерентні, змішані – некогерентні. Змішані стани можна класифікувати як близькі до класичних станів, оскільки їх опис за допомогою матриці густини близький до статистичного опису класичних систем (система може бути виявлена лише в стані $|0\rangle$, або в стані $|1\rangle$ і ніколи – в їх суперпозиції).

Основна відмінність між чистим і змішаним станом полягає в тому, що для чистого стану завжди можна вказати базис, в якому значення вимірюваної величини строго визначене. Для змішаного



стану такого базису не існує. Наприклад, розглянемо чистий стан (1.28).

При вимірюваннях в базисі $|\uparrow\rangle$ та $|\leftrightarrow\rangle$, очевидно, що ці стани будуть виявлені з п'ятидесятивідсотковою імовірністю. Однак, якщо в якості базисних використовувати стани $|+45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\leftrightarrow\rangle)$ та $|-45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\leftrightarrow\rangle)$ то стан (1.28) строго визначений і не зазнає флуктуацій при вимірюваннях. Легко впевнитись, що нові базисні стани $|+45^\circ\rangle$ і $|-45^\circ\rangle$ ортогональні: $\langle +45^\circ | -45^\circ \rangle = 0$.

Принцип суперпозиції чистих станів є одним із найважливіших принципів квантової механіки. Він є проявом хвильової природи Ψ – функції і аналогом інтерференції когерентних хвиль в класичній фізиці.

Вираз (1.26) відомий як **закон додавання амплітуд ймовірностей**. До нього можна сформулювати наступні твердження:

1. Кількість членів у виразі (1.26) може бути як скінченною, так і необмеженою.
2. Якщо індекси, що нумерують стани, відрізняються між собою безмежно мало, то замість суми можна формально використовувати інтеграл:

$$\Psi = \int a_f \varphi_f df . \quad (1.30)$$

3. Якщо функції $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ задовольняють деякі рівняння, то і Ψ задовольняє ці рівняння. Звідси впливає важливий наслідок принципу суперпозиції: всі рівняння, яким задовольняють хвильові функції є лінійними рівняннями.

4. Коефіцієнти a_1, a_2, \dots дають «вагу» станів $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ в повному стані Ψ , тобто визначають «внесок» кожного доданку Ψ . Якщо функції $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ортонормовані, то величина $|a_n|^2$ визначає ймовірність реалізації стану φ_n , причому повна ймовірність $\sum_{n \geq 1} |a_n|^2 = 1$.

5. Якщо хвильову функцію домножити на довільне комплексне число, яке не дорівнює нулеві, то нова хвильова функція буде описувати той самий стан.



Отже суть квантово-механічного принципу суперпозиції полягає в тому, що квантова система з можливих станів обирає не «той або той» стан, а всі зразу, тобто «і той, і той». Фейнман говорив: «Що в дійсності означає $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$? Це таємниця. Ми не розуміємо цього. Але ми можемо сказати вам як це працює». В літературі найбільш популярна спроба пояснення суперпозиції станів приводиться на прикладі спіна електрона в експериментах ядерного магнітного резонансу (про поняття спіна див. нижче). Спін електрона часто зображають у вигляді стрілки, спрямованої вгору або вниз. Спін вгору можна прийняти за логічну одиницю, спін вниз – за логічний нуль. Але можна показати математично, що електрон може також знаходитися в «примарному» подвійному стані – стані суперпозиції, в якому спін одночасно напрямлений і вгору і вниз. Це означає що цей стан є одночасно логічним нулем і одиницею. Якщо тепер здійснювати обчислення за допомогою цього електрона, то вони будуть виконуватися з одночасним використанням нуля і одиниці, тобто відбуваються дві обчислювальні дії одночасно!

Поняття суперпозиції квантових станів є наріжним каменем в реалізації квантових обчислень.

Ще одним дуже важливим поняттям в теорії квантових обчислень є поняття **сплєтених станів**. Уперше поняття «сплєтених» станів було введено Е. Шредингером в його роботі від 29 листопада 1935 р. «Сучасний стан квантової механіки». Відомо, що поява цієї статті зобов'язана роботі А. Ейнштейна, Б. Подольського і Н. Розена «Чи може квантово-механічний опис реальності бути повним?» (15 травня 1935 р.) з доповненнями, написаними Н. Бором. Російськомовний переклад статті Е. Шредингера з'явився в журналі «Успехи хімії» в 1936 р. Шредингер запровадив поняття сплєтених станів для опису стану квантової системи, що складається з декількох частин, які можуть бути просторово рознесені. В літературі зустрічаються також терміни «заплутані», «зчеплені», «переплєтені», «сплутані», які на наш погляд не набагато кращі за «сплєтені». В німецькій мові термін «Verschränkung», використаний Шредингером, означає сильне сплєтіння рук при міцному рукостисканні.

Появу таких станів пояснимо на прикладі [2]. Нехай є система з двох частинок, що знаходиться в одновимірному просторі. Необхідно знайти власну функцію операторів сумарного імпульсу цих



двох частинок $\hat{p} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2$ та різниці їх координат $\hat{x} = \hat{x}_1 - \hat{x}_2$.

Можна показати, що оператори \hat{x} та \hat{p} комутують між собою. Дійсно згідно (1.20):

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &= [\hat{x}_1 - \hat{x}_2, \hat{p}_1 + \hat{p}_2] = \\ &= [\hat{x}_1, \hat{p}_1] + [\hat{x}_1, \hat{p}_2] - [\hat{x}_2, \hat{p}_1] - [\hat{x}_2, \hat{p}_2] = i\hbar + 0 - 0 - i\hbar = 0. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Оскільки вони комутуючі, то згідно п. 11 «Властивостей лінійних операторів» мають спільну систему власних функцій.

$$\begin{aligned} (\hat{x}_1 - \hat{x}_2)\psi(x_1, x_2) &= x_{12}^0\psi(x_1, x_2), \\ (\hat{p}_1 + \hat{p}_2)\psi(x_1, x_2) &= p_{12}^0\psi(x_1, x_2), \end{aligned} \quad (1.32)$$

де x_{12}^0 та p_{12}^0 – неперервні власні значення фіксують можливі відстані між частинками та їх повний імпульс. З першого рівняння видно, що $\psi(x_1, x_2) \sim \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^0)$, а оскільки дія оператора \hat{p} на дельта функцію дорівнює нулеві із другого рівняння маємо $\psi(x_1, x_2) \sim e^{ip_{12}^0 x_2/\hbar}$. Загальний розв'язок наступний:

$$\psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2) = C \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^0) e^{ip_{12}^0 x_2/\hbar}, \quad (1.33)$$

де C – стала нормування. З умови нормування можна знайти, що з точністю до фазового множника $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$. Остаточна хвильова функція сплетеної пари наступна:

$$\psi_{x_{12}^0, p_{12}^0}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \delta(x_1 - x_2 - x_{12}^0) e^{ip_{12}^0 x_2/\hbar}. \quad (1.34)$$

Така хвильова функція описує стан з точним значенням різниці координат та сумарного імпульсу частинок, однак ні координата, ні імпульс кожної з частинок не мають точного значення.

В матричному вигляді хвильова функція цієї сплетеної пари має вигляд:

$$\left| x_{12}^0, p_{12}^0 \right\rangle = e^{i\hat{p}_1 \hat{x}_2/\hbar} \left| x_{12}^0 \right\rangle_1 \left| p_{12}^0 \right\rangle_2, \quad (1.35)$$

де нижні індекси кет-векторів указують на їх приналежність до першої або другої частинки.

Можна показати, що сплетений стан частинок виникає тоді коли їх загальний стан не можна подати у вигляді добутку їх хвильових функцій:



$$|\Psi_{12}\rangle \neq |\Psi_1\rangle|\Psi_2\rangle. \quad (1.36)$$

Дві квантові підсистеми є сплєтеними, коли їх спільний стан більш визначений і менш стохастичний, ніж стан будь-якої з підсистем. В класичній фізиці інформація, яка дає повний опис системи як цілого достатня для повного опису і частин цілого. В квантовій механіці це правило не виконується для системи як цілого, якщо вона знаходиться в сплєтені стани. Інформація, яка дає повний опис цілого, недостатня для опису частин цього цілого.

Говорячи про сплєтені стани, ми, таким чином, виділяємо наступні їх атрибути:

- наявність хоча б одного параметра, що приймає ряд фіксованих значень для кожної з підсистем;
- наявність кореляцій між двома підсистемами по цьому параметру, або в більш загальному випадку – синхронності флуктуацій цього параметра.

Сформулюємо ще одне визначення *сплєтених станів* для двох підсистем:

Сплєтеними називаються дві підсистеми між якими існують квантові кореляції за параметром, що приймає принаймні два значення для кожної з підсистем. Вимірювання стану однієї з підсистем однозначно визначає (проекує) стан іншої. Спільний стан двох підсистем тоді називається сплєтеним.

Зауважимо також, що для трьох підсистем однозначного визначення сплєтених станів ввести не вдається. Пов'язано це з тим, що у разі вимірювання стану однієї з підсистем дві інші можуть або прийняти цілком визначені значення, або опинитися в сплєтених станах.

Ще слід звернути увагу на те, що кореляції повинні носити квантовий характер, тобто їх не можна описати класично.

Сплєтеність квантових станів мікрочастинок обов'язково необхідна для реалізації логічних операцій у квантовому комп'ютері. За допомогою яких квантових операцій можливе створення сплєтених станів частинок докладно розповідається в розділі 3.

1.2. Рівняння Шредінгера

Як зазначалося вище, знаючи хвильову функцію $\Psi(x, y, z, t)$ мо-

жна визначити стан частинки для довільних наступних моментів часу. Для розв'язку цієї задачі у загальному вигляді німецький вчений Шредінгер у 1926 році запропонував рівняння для частинок, які рухаються в силовому полі з потенціальною енергією $U(x, y, z, t)$ зі швидкістю значно меншою за швидкість світла. Це рівняння має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z, t) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.37)$$

Як видно з таблиці 1 перший доданок лівої частини рівняння Шредінгера є оператором кінетичної енергії, другий – оператором потенціальної енергії, дія якого зводиться до множення на функцію $\Psi(x, y, z, t)$, а вся ліва частина рівняння є оператором Гамільтона, що відображає повну механічну енергію. Тому рівняння (1.37) можна записати більш компактно

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \text{або} \quad \hat{H} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.38)$$

В матричному вигляді рівняння (1.37) буде мати вигляд:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle. \quad (1.39)$$

Рівняння (1.37, 1.38, 1.39) називаються **загальними часовими рівняннями Шредінгера**. Воно є основним рівнянням нерелятивістської квантової механіки і справедливе лише для частинки, що рухається зі швидкістю $v \ll c$ (c – швидкість світла у вакуумі).

Рівняння (1.37) доповнюється трьома умовами, які накладаються на функцію Ψ та її частинні похідні:

1. Функція $\Psi(x, y, z, t)$ має бути обмеженою, неперервною та однозначною.
2. Частинні похідні від функції Ψ за координатами та часом є неперервні.
3. Інтеграл $\int_V |\Psi|^2 dV$ і, відповідно, добуток $\langle \Psi | \Psi \rangle$ обмежені і зводяться до умови нормування.

Рівняння Шредінгера в квантовій механіці відіграє таку ж роль як і другий закон Ньютона в класичній, тобто встановлює причин-

но-наслідкові зв'язки при опису станів мікроб'єктів і описує їх еволюцію. З точки зору математики рівняння Шредінгера є лінійним диференціальним рівнянням за координатами та часом.

Якщо потенціальна енергія частинки не залежить від часу $U = U(x, y, z)$, то кажуть, що ця частинка перебуває у **стаціонарному стані**. У цьому випадку хвильову функцію можна подати у вигляді комбінації з двох окремих функцій $\Psi = \psi(x, y, z)f(t)$. Підставляючи цю функцію в рівняння (1.38) і поділивши його на добуток $\psi(x, y, z)f(t)$, отримаємо

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(x, y, z)\psi \right). \quad (1.40)$$

Оскільки ліва частина рівняння (1.40) залежить лише від t , а права лише від x, y, z , то обидві сторони повинні дорівнювати одній і тій же константі поділу, яку позначимо через E . Тоді, інтегрувавши рівняння (1.40) стосовно функції f , отримаємо

$$f(t) = Ce^{-iEt/\hbar}, \quad (1.41)$$

де C – довільна константа. Рівняння ж для ψ набуде вигляду

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad (1.42)$$

$$\text{або } \hat{H}\psi = E\psi.$$

Рівняння (1.42) називають **стаціонарним рівнянням Шредінгера**. Оскільки воно однорідне за ψ , то константу C в рівнянні (1.41) можна вибрати так, щоб функція ψ була нормованою (див. (1.8)). Тоді частковий розв'язок хвильового рівняння (1.38) матиме вигляд

$$\Psi = \psi(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}. \quad (1.43)$$

Відповідно до виразу (1.19) та таблиці 1 слідує, що значення E в рівнянні (1.42) відповідають *власним значенням енергії частинки*.

В матричному вигляді стаціонарне рівняння Шредінгера має наступний вигляд:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1.44)$$



1.2.1. Окремі приклади стаціонарних квантових систем

I. Розв'язування рівняння Шредінгера у випадку вільної частинки

Для руху вільної частинки ($U = 0$) вздовж осі OX стаціонарне рівняння Шредінгера (1.42) можна представити у вигляді

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \text{або} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (1.45)$$

де $\psi = \psi(x)$, $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ – хвильове число (див. (1.4)).

Рівняння (1.45) це диференціальне рівняння другого порядку, розв'язком якого на множині комплексних чисел є функція

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (1.46)$$

Тоді функція (1.43) набуває виду

$$\Psi = \psi e^{-i(E/\hbar)t} = Ae^{-i((E/\hbar)t - kx)} + Be^{-i((E/\hbar)t + kx)}, \quad (1.47)$$

Рівняння (1.47) описує суперпозицію двох плоских хвиль де Бройля однакової циклічної частоти $\omega = E/\hbar$, які поширюються з амплітудами A та B відповідно на зустріч одна одній паралельно осі OX . Ймовірність знайти частинку в будь-якій точці простору дорівнює $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = |\psi|^2$. У випадку руху частинки вздовж осі OX ($B=0$) $|\psi|^2 = A^2 = \text{const}$, тобто всі положення в просторі вільної мікрочастинки мають однакову ймовірність. Цей факт ілюструють спостереження треків частинок в камері Вільсона, бульбашковій камері, різноманітних іскрових лічильниках, товстошарових фотомульсіях тощо.

Значення енергії вільної частинки відповідно до (1.4) дорівнює

$$E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.48)$$

Оскільки жодних обмежень на k (а, отже, й на E) не накладалося, то рівняння (1.45) має розв'язки при довільних значеннях E , тобто *спектр власних значень енергії вільної частинки є неперервним*.



II. Частинка в одновимірній нескінченній глибокій потенціальній ямі

Усякий зв'язаний стан частинки (вільний електрон в металі, нуклон в ядрі тощо), тобто стан з від'ємною потенціальною енергією, можна описати, ввівши поняття потенціальної ями. Розглянемо найпростіший випадок, коли частинка масою m перебуває в одновимірній прямокутній нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною ℓ . Розглянемо потенціальну яму, на дні якої потенціальна енергія дорівнює нулю, а стінки – нескінченно високі (рис. 1.2):

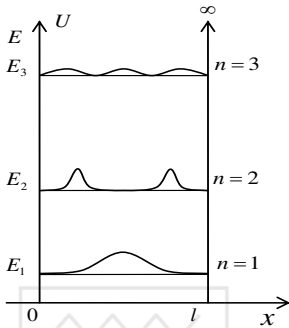


Рис.1.2. Енергетичні стани частинки в одновимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq x \leq \ell, \\ \infty & \text{при } x < 0, x > \ell. \end{cases}$$

Ймовірність перебування частинки за межами ями дорівнює нулю. Для частинки, що знаходиться всередині ями рівняння Шредінгера матиме вид (1.45), а його розв'язок відповідає (1.46).

З умови неперервності хвильової функції впливають граничні умови

$$\psi(0) = \psi(\ell) = 0. \quad (1.49)$$

З умови $\psi(0) = 0$ одержимо, що в (1.45) $A = -B$. Звідки

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin kx = A' \sin kx, \quad (1.50)$$

де $A' = 2iA$ – деяка стала величина.

З умови $\psi(\ell) = 0$ слідує, що $k\ell = \pi n$, де $n = 1, 2, 3, \dots$. Тоді згідно (1.48)

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} \cdot n^2. \quad (1.51)$$

Формула (1.51) свідчить про те, що енергія частинки в потенціальній ямі не є неперервною, а приймає одне з дискретних значень (квантується):



$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} \cdot 1^2, \quad E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} \cdot 2^2, \quad E_3 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} \cdot 3^2, \quad (1.52)$$

Квантові значення енергії $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$ називаються *енергетичними рівнями*, а числа $1, 2, 3, \dots, n$ – *квантовими числами*. За великих квантових числах ($n \gg 1$) відбувається відносно зближення енергетичних рівнів:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \approx \frac{2}{n} \ll 1. \quad (1.53)$$

Це означає, що за великих n енергетичні рівні зближуються, і результати квантової механіки співпадають з результатами класичної (енергетичний спектр – неперервний).

Хвильова функція частинки в потенціальній ямі виражається формулою:

$$\psi(x) = A' \sin \pi x / \ell. \quad (1.54)$$

Значення коефіцієнта A' знайдемо з умови нормування хвильової функції:

$$\int_0^\ell (A' \sin \pi x / \ell)^2 dx = 1. \quad (1.55)$$

Звідки $A' = \sqrt{2/\ell}$, а власні функції мають вигляд:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/\ell} \sin \pi x / \ell. \quad (1.56)$$

Густина імовірності $|\psi|^2$ (рис. 1.2) залежить від координати частинки, при цьому по різному в кожному квантовому стані. Наприклад, для центру ями вона максимальна в стані $n = 1$ і дорівнює нулю в стані $n = 2$. А з точки зору класичної механіки всі положення частинки рівноправні. За великих n така невідповідність зникає.

III. Частинка в трьохвимірній прямокутній потенціальній ямі

Таку трьохвимірну нескінченно глибоку потенціальну яму з обмеженою кількістю електронів всередині ще називають **квантовою точкою**. Квантовою точкою може служити будь-який достатньо маленький шматочок металу або дефекти чи сторонні вкраплення в напівпровіднику. Квантові точки – один з головних кандидатів для використання у квантових обчисленнях на квантових комп'ютерах.

Історично першими квантовими точками, імовірно, були мікрочастинки селеніду кадмію CdSe.

Розглянемо найпростіший випадок квантової точки – нескінченно глибокої прямокутної потенціальної ями обмеженої розмірами $0 < x < l_1$; $0 < y < l_2$; $0 < z < l_3$. Хвильове рівняння тут вже буде трьох-вимірним за координатою:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + E\psi = 0, \quad (1.57)$$

з крайовими умовами:

$$\psi(0, y, z) = \psi(x, 0, z) = \psi(x, y, 0) = \psi(l_1, y, z) = \psi(x, l_2, z) = \psi(x, y, l_3) = 0. \quad (1.58)$$

Розв'язок рівняння (1.57) запишемо у вигляді

$$\psi = B \sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z. \quad (1.59)$$

Підставляючи Ψ в рівняння, отримаємо співвідношення

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) = E. \quad (1.60)$$

З граничних умов слідує $k_1 l_1 = n_1 \pi$, $k_2 l_2 = n_2 \pi$, $k_3 l_3 = n_3 \pi$, де n_1, n_2, n_3 – цілі числа.

Підставляючи значення n_1, n_2, n_3 в рівняння (1.60) отримаємо вирази для енергії та хвильової функції

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right), \quad (1.61)$$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3} = B \sin \frac{\pi n_1 x}{l_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{l_2} \sin \frac{\pi n_3 z}{l_3}.$$

Стала B визначається з умови нормування $\int_V |\psi_{n_1 n_2 n_3}|^2 dx dy dz = 1$

і дорівнює: $B = \sqrt{\frac{8}{l_1 l_2 l_3}}$.

Нехай частинка знаходиться в квантовій точці кубічної форми, тобто $l = l_1 = l_2 = l_3$. Енергія мікрочастинки в такому випадку



дорівнює

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (1.62)$$

З цієї формули видно, що одне і те ж значення енергії може здійснюватись за допомогою різних комбінацій чисел n_1 , n_2 і n_3 , тобто рівні енергії є виродженими.

Розглянемо, наприклад, рівень енергії $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell} \cdot 6$,

де $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$. Це рівняння можна задовольнити трьома різними способами:

1. $n_1=2, n_2=1, n_3=1$;
2. $n_1=1, n_2=2, n_3=1$;
3. $n_1=1, n_2=1, n_3=2$.

Це значить, що даному рівню енергії відповідають три різних стани $|\psi_{211}\rangle$, $|\psi_{121}\rangle$, $|\psi_{112}\rangle$, тобто кратність виродження дорівнює трьом.

IV. Проходження частинки через потенціальний бар'єр

Спорідненою до описаної в II є задача про проходження частинки через потенціальний бар'єр. Нехай мікрочастинка з масою m і енергією E налітає на одновимірний прямокутний потенціальний

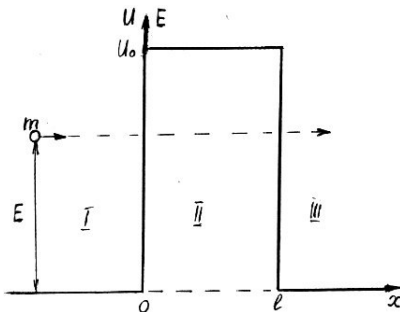


Рис. 1.3. Проходження частинки через потенціальний бар'єр

бар'єр шириною l і висотою U_0 (рис. 1.3).

Якщо частинка класична, то вона пролітає над бар'єром, коли $E > U_0$, і відбивається від нього, коли $E < U_0$.

Проникнути під бар'єр класична частинка не може, бо тоді її кінетична енергія $E_k = E - U_0$

була б меншою від нуля.

Розв'язок рівняння Шредінгера для квантомеханічної мікрочастинки дає, що хвильові функції

в усіх трьох областях ($\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$) відмінні від нуля, тобто мікро-



частинка проникає під бар'єр і за бар'єр. Це явище називається *тунелюванням*. Від'ємні значення кінетичної енергії мікрочастинки в момент проходження бар'єру не можуть турбувати, бо в квантовій

механіці кінетична енергія $\left(E_k = \frac{p^2}{2m} \right)$, як і потенціальна енергія,

не є точно визначеними. Прозорість бар'єру, тобто імовірність тунелювання частинки, знаходиться як відношення густин імовірності в областях III та I. Розрахунок дає

$$D = \frac{|\psi_{III}|^2}{|\psi_I|^2} \approx e^{-\frac{2\ell}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}} \quad (1.63)$$

Звідси видно, що бар'єр тим прозоріший, чим менші його ширина і висота. Для класичної частинки ($m \rightarrow \infty$) і макробар'єру ($l \rightarrow \infty$) прозорість бар'єру зникаюче мала.

V. Квантовий лінійний гармонічний осцилятор

Лінійний гармонічний осцилятор – це матеріальна точка, яка здійснює одновимірний (вздовж осі x) рух під дією квазіпружної сили $f = -kx$. Потенціальна енергія осцилятора (рис. 1.4)

$$U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}, \quad (1.64)$$

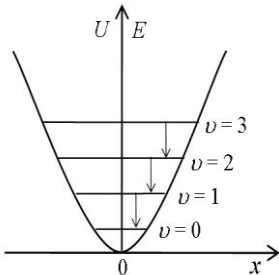


Рис. 1.4. Енергія квантового лінійного гармонічного осцилятора

де m – маса осцилятора, ω_0 – його власна циклічна частота, x – зміщення від положення рівноваги. Отже, мова піде про мікрочастинку, яка перебуває в потенціальній ямі з параболічними стінками. Підставляючи (1.64) в рівняння Шредінгера (1.42), отримаємо

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (1.65)$$

Власні хвильові функції, тобто розв'язки цього рівняння, які задовольняють стандартні вимоги до хвильової функції мають вигляд



$$\psi_v(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} H_v\left(\frac{x}{x_0}\right), \quad (1.66)$$

де $x_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^{1/2}$, H_v – поліноми Чебишева-Ерміта ν -го порядку, $\nu = 1, 2, 3, \dots$ – квантове число.

Для класичного осцилятора зміщення x обмежене амплітудою коливань $\left(A = \sqrt{\frac{2E}{m_0\omega^2}}\right)$; для квантового осцилятора таке обмеження знімається за рахунок можливості тунелювати через стінки потенціальної ями. А це означає, що існує ненульова імовірність знайти мікрочастинку поза ямою.

Власні значення оператора Гамільтона для квантового осцилятора

$$E_\nu = \hbar\omega_0\left(\nu + \frac{1}{2}\right) = h\nu_0\left(\nu + \frac{1}{2}\right). \quad (1.67)$$

Тут враховано, що $\omega_0 = 2\pi\nu_0$. Отже, енергія квантового осцилятора приймає дискретні значення $\left(E_0 = \frac{h\nu_0}{2}; E_1 = \frac{3}{2}h\nu_0, \dots\right)$, тобто

квантується (рис. 1.4). Найменша енергія квантового осцилятора, так звана *нульова енергія*, на відміну від класичного осцилятора, не дорівнює нулю. Наявність нульових коливань підтверджується експериментально в дослідях по розсіянню світла в кристалах при дуже низьких температурах, коли з точки зору класичної фізики коливальний рух кристалічної решітки повинен був би припинитися.

Перебуваючи в стаціонарному стані, квантовий осцилятор не поглинає і не випромінює енергії. Випромінювання (поглинання) світла відбувається при переході осцилятора між стаціонарними станами, при цьому квантова механіка дозволяє лише переходи між сусідніми енергетичними рівнями, тобто $\Delta\nu = \pm 1$ (правило відбору). Енергія випромінюваного (поглинутого) кванту $\Delta E = E_{\nu+1} - E_\nu = \hbar\omega_0 = h\nu_0$, що підтверджує квантовий постулат



VI. Воднеподібні атоми в квантовій механіці. Квантові числа

З врахуванням виразу для потенціальної енергії електрона в кулонівському полі ядра воднеподібного атома, стаціонарне рівняння Шредингера набуде вигляду

$$\hat{\nabla}^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) \psi = 0. \quad (1.68)$$

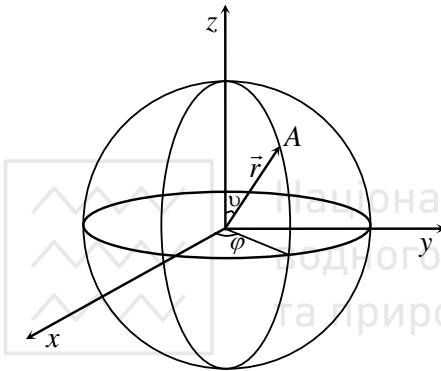


Рис. 1.5. Сферична система координат

Оскільки кулонівське поле володіє центральною симетрією, то зручно перейти до сферичної системи координат (рис. 1.5), де положення довільної точки A описується трьома координатами r, φ, ν . У цьому випадку хвильову функцію можна представити як добуток радіальної функції $R(r)$ і кутової $Y(\nu, \varphi)$, тобто провести розділення змінних:

$$\psi_{n,\ell,m_\ell}(r, \nu, \varphi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m_\ell}(\nu, \varphi). \quad (1.69)$$

Стандартні вимоги як до хвильової функції в цілому, так і до окремих складових забезпечуються лише при певних, дискретних значеннях не тільки енергії електрона, але і квадрату моменту імпульсу його орбітального руху L_ℓ^2 , а також проекції цього моменту $L_{\ell z}$ на вибраний напрямок (вісь z). Квантування вказаних характеристик визначається трьома квантовими числами: *головним* n , *орбітальним (азимутальним)* ℓ та *магнітним* m_ℓ наступним чином:

$$E_n = -hcR \frac{Z^2}{n^2}, \quad (1.70)$$

де R – стала Рідберга, c – швидкість світла, $n=1,2,3,\dots$;



$$L_\ell^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1), \quad (1.71)$$

де $\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$;

$$L_{\ell z} = \hbar m_\ell, \quad (1.72)$$

де $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$.

Вектор орбітального моменту імпульсу електрона \vec{L} має певні дискретні орієнтації в просторі. Це пов'язано з тим, що рухаючись по замкненій орбіті електрон створює ніби замкнений виток зі струмом, якому притаманний власний магнітний момент. Якщо такий «виток» помістити у магнітне поле напруженістю \vec{H} , яка паралельна осі OZ , то площина електронної орбіти, а значить і вектор \vec{L} відповідним чином переорієнтуються в просторі. Вектору орбітального моменту імпульсу теж можна поставити у відповідність оператор моменту імпульсу з таблиці 1:

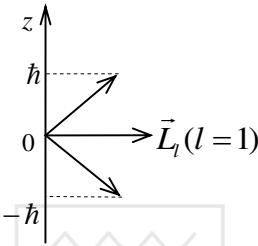


Рис.1.6. Орієнтація і проекції вектора моменту імпульсу електрона

$$\hat{l} = -i\hbar \begin{pmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (1.73)$$

Оператор проекції вектора орбітального моменту на вісь z тоді буде

$$\hat{l}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (1.74)$$

Оскільки енергія електрона E_n визначається лише головним квантовим числом n , а хвильова функція ψ_{n,ℓ,m_ℓ} – усіма квантовими числами, то декільком станам (виродженим станам) з різними ℓ та m_ℓ відповідає одне значення енергії.

Перебуваючи в певному стаціонарному стані з енергією (1.70)



електрон не випромінює і не поглинає енергію. Перехід електрона з одного стаціонарного стану в інший супроводжується випромінюванням або поглинанням фотона, енергія якого дорівнює різниці енергій двох станів атома

$$h\nu = E_n - E_m. \quad (1.75)$$

В загальному вигляді розв'язок (1.68) має складний вид. Для основного стану ($n = 1, l=0, m=0$) хвильова функція має вигляд

$$\psi_{100} = R_{10} Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right). \quad (1.76)$$

Електрони з однаковими головними квантовими числами утворюють *електронну оболонку*. Електрони з однаковими квантовими числами n та ℓ утворюють *підоболонку*.

Стани електрона з різними значеннями орбітального квантового числа ℓ прийнято позначати наступним чином:

ℓ	0	1	2	3
Стан	s	p	d	f

Тому енергетичні рівні з різними n реалізуються наступними станами:

$n = 1$	стан –	$1s$;			
$n = 2$	стани –	$2s,$	$2p$;		
$n = 3$	стани –	$3s,$	$3p,$	$3d$;	
$n = 4$	стани –	$4s,$	$4p,$	$4d,$	$4f$.

Стан $1s$ є основним, усі інші стани – збуджені. Час життя електрона в збудженому стані складає $\sim 10^{-8}$ с.

Важливою характеристикою кожної елементарної частинки є її власний момент імпульсу $\vec{L}_s = \vec{spin}$, не пов'язаний з просторовим рухом мікрочастинки:

$$L_s^2 = \hbar^2 s(s+1), \quad (1.77)$$

де s – *спінове* квантове число, яке для електрона дорівнює $1/2$.

У важливому для нас випадку, коли $s = 1/2$, зі спіном частинки можна пов'язати оператор спіна, так що таблицю 1 можна доповнити значеннями проєкцій цього оператора:



$$\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i, \dots i = x, y, z$$

де

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \dots \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \dots \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.78)$$

так звані матриці Паулі.

Природа існування спіна у мікрочастинок невідома. Власний (спіновий) рух притаманний усім мікрочастинкам (атомам, ядрам, протонам, нейтронам тощо). Спін – така ж характеристика мікрочастинок як маса і заряд. Наявність спіну впливає з розв’язку релятивістського аналогу рівняння Шредінгера – рівняння Дірака. В залежності від значення квантового числа s усі мікрочастинок поділяються на **ферміони** – частинки з напівцілим спіном ($s = 1/2, 3/2, \dots$) і **бозони** – частинки з цілочисельним спіном ($s = 0, 1, \dots$). До ферміонів належать електрони, протони, нейтрони, до бозонів – фотони, π -мезони. Атоми та ядра можуть бути як ферміонами, так і бозонами. Поділ мікрочастинок на ферміони і бозони є наслідком принципу квантової нерозрізняльності тотожних частинок. Для системи з двох тотожних частинок цей принцип визначається рівнянням $|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2$, тобто густина імовірності не змінюється при перестановці частинок місцями (тут x_i – сукупність просторових і спінових координат i -тої частинки). Звідси можливі два варіанти:

$\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$ – симетрична хвильова функція;

$\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$ – антисиметрична хвильова функція.

Бозони описуються симетричними, а ферміони – антисиметричними хвильовими функціями.

Проекція спіну електрона на виділену як і в попередньому випадку вісь може приймати значення $\pm \frac{1}{2} \hbar$. Відповідно стан електрона

в атомі характеризується четвертим квантовим числом, яке називають *магнітним спіновим*. Це число може приймати значення

$$m_s = \pm \frac{1}{2}.$$

Зі спіном пов’язаний *власний магнітний момент* частинки. На-



приклад, для електрона

$$\vec{P}_{ms} = -\frac{e}{m_{el}} \vec{L}_s. \quad (1.79)$$

Проекції цих моментів на вибраний напрямок (вісь z)

$$L_{sz} = m_s \hbar, \quad (1.80)$$

$$P_{msz} = -\frac{e}{m_{el}} L_{sz} = -\frac{e\hbar}{m_{el}} m_s = -2\mu_e \cdot m_s, \quad (1.81)$$

де $\mu_e = \frac{e\hbar}{2m_{el}}$ – так званий, електронний магнетон Бора.

Отже стан електрона в атомі характеризується чотирма квантовими числами, властивості яких подано у таблиці 2.

Таблиця 2

Можливі значення квантових чисел

	Назва квантового числа	Сим-вол	Визначає	Можливі значення
1	Головне	n	Енергію електрона	Цілі числа від 0 до ∞
2	Орбітальне	ℓ	Форму орбіти електрона	Цілі числа від 0 до $n - 1$
3	Магнітне	m_l	Орієнтацію орбіти електрона у просторі	Від $-\ell$ до ℓ
4	Магнітне спінове	m_s	Власний магнітний момент електрона	$-1/2$ і $1/2$

VII. Молекулярний йон водню H_2^+

Ця система складається з двох протонів, між якими рухається електрон і є класичною дворівневою системою для електрона. Подібні системи широко використовуються при моделюванні роботи



Нехай $|\Psi_I\rangle$ – вектор стану електрона на першому протоні при відсутності другого, а E_0 – його енергія. На другому протоні, за відсутності першого, – квантовий стан електрона $|\Psi_{II}\rangle$, енергія також E_0 . Коли присутні обидва протони, то електрон реалізує суперпозиційний стан (1.26):

$$|\Psi\rangle = C_1|\Psi_I\rangle + C_2|\Psi_{II}\rangle. \quad (1.82)$$

З умови симетрії випливає, що $|C_1|^2 = |C_2|^2$, а з умови нормування $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$. Із цих рівнянь, обмежуючись дійсними розв'язками, знаходимо $C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Решта розв'язків згідно

пункту 5 принципу суперпозиції описують той самий стан. Таким чином, отримуємо два розв'язки:

$$|\Psi_I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_I\rangle + |\Psi_{II}\rangle) \text{ та } |\Psi_{II}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_I\rangle - |\Psi_{II}\rangle). \quad (1.83)$$

Якщо Ω – частота «перескоків» електрона між протонами, то відповідно він має два стійкі енергетичні стани з енергіями $E_I = E_0 - \hbar\Omega$ та $E_{II} = E_0 + \hbar\Omega$. Величину $A = \hbar\Omega$ називають обмінною енергією.

Згідно принципу мінімальності енергії реалізується стан з енергією E_I , тобто стан із симетричною хвильовою функцією $|\Psi_I\rangle$. З умов симетрії випливає, що посередині між протонами стани однакові ($|\Psi_I\rangle = |\Psi_{II}\rangle$). Тоді в цій точці $|\Psi_I\rangle = \sqrt{2}|\Psi_1\rangle$ і ймовірність перебування електрона в ній максимальна ($|\Psi_I|^2 = 2|\Psi_1|^2$). Це означає, що електрон знаходиться на прямій, яка з'єднує протони, точно посередині між ними. Він екранує їх заряди і, в результаті, протони, хоч і слабо, але притягуються електроном, утворюючи зв'язаний стан H_2^+ .

У стані $|\Psi_{II}\rangle$ для точки, що лежить посередині між протонами, маємо $\Psi_{II}=0$. Це означає, що електрон здебільшого перебуває поза цією точкою і ймовірність знаходження його в ній дорівнює нулю.



Між протонами немає екрануючого заряду, кулонівське відштовхування розводять їх і робить систему нестабільною.

1.3. Основні принципи побудови Періодичної системи хімічних елементів

Періодична система хімічних елементів Менделєєва – це їх класифікація за структурою електронних оболонок атомів. Заповненість кожної оболонки визначає **принцип Паулі** – *дві тотожні частинки з напівцілим спіном не можуть одночасно знаходитися в одному стані*. Тобто в будь-якому атомі не може бути двох електронів, які знаходяться у двох однакових стаціонарних станах, що визначаються набором квантових чисел n , ℓ , m_ℓ , m_s . Кількість можливих значень цих чисел визначається відповідно до таблиці 2 попереднього параграфу.

Кожному значенню орбітального квантового числа ℓ відповідає $2\ell + 1$ електронних орбіт, на яких знаходиться по два електрони з протилежно напрямленими спінами. Загальна кількість електронів на певному енергетичному рівні з головним квантовим числом n дорівнює:

$$\sum_{\ell=0}^{\ell=n-1} 2(2\ell + 1) = 2n^2 \quad (1.84)$$

Електронні оболонки в атомі прийнято позначати латинськими літерами K, L, M, N, O, \dots як зображено в таблиці 3.



Кількість електронів на оболонках атомів

n	Оболонка	Число електронів у станах					Максимальне число електронів
		s ($l = 0$)	p ($l = 1$)	d ($l = 2$)	f ($l = 3$)	g ($l = 4$)	
1	K	2					$2 \cdot 1^2 = 2$
2	L	2	6				$2 \cdot 2^2 = 8$
3	M	2	6	10			$2 \cdot 3^2 = 18$
4	N	2	6	10	14		$2 \cdot 4^2 = 32$
5	O	2	6	10	14	18	$2 \cdot 5^2 = 50$

Порядок заповнення електронами станів конкретного атома відповідають певним правилам, наведеним у таблиці 4.

Таблиця 4

Принципи та правила, за якими заповнюються оболонки атомів

Назва правила	Формулювання	Застосування
1. Принцип мінімуму	Стійкому стану атома відповідає мінімальна енергія	Електрон займає стан з найменшою енергією
2. Принцип Паулі	Атом не може мати двох електронів з однаковими значеннями всіх чотирьох квантових чисел	Максимальна кількість електронів на рівні $2n^2$
3. Правило Клечковського	Підоболонки заповнюються за зростанням суми квантових чисел. Цьому значенню суми $n + \ell$ відповідає заповнення спочатку	Вказує послідовність заповнення підоболонки



	оболонки із меншим n та більшим ℓ , а потім із більшим n та меншим ℓ . Заповнення кожної оболонки завершується s -електронами.	
4. Правило Хунда	Модуль сумарного спінового квантового числа електронів на підоболонці максимальний.	Вказує порядок заповнення електронами однакових орбіт

На рис. 1.7 схематично показано принцип заповнення рівнів енергії в багатоелектронному атомі.

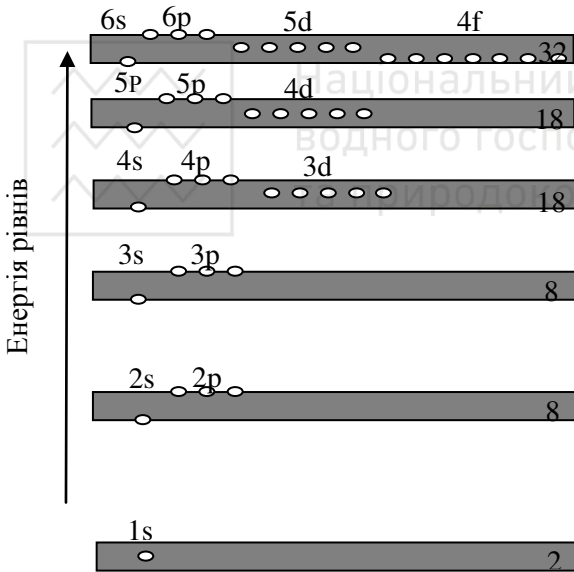


Рис. 1.7. Принцип заповнення рівнів енергії в багатоелектронному атомі

Як видно з рисунку електрони p -підоболонки мають дещо вищу енергію, ніж s -підоболонки за тих же значень головного квантового числа n . d -і f -підоболонки з одним і тим самим головним квантовим числом мають відповідно ще більшу енергію. Таке заповнення пов'язано з тим, що при цьому атом як система має меншу енергію. Внаслідок

чого за досить великих n стани з більшим n і більшим ℓ заповнюються швидше, ніж стани з менших n і більшим ℓ . Тому є хімічні



елементи з незаповненими попередніми оболонками, в яких заповнюються наступні – *перехідні елементи*.

1.4. Спін атомного ядра

Атомне ядро складається з двох видів частинок – *протонів* і *нейтронів*. Протон володіє позитивним елементарним зарядом, а нейтрон – електрично нейтральний. З точки зору ядерної взаємодії протони і нейтрони в ядрі абсолютно тотожні частинки і мають одну назву – *нуклони*.

Нуклони також, як і електрони, мають спін, що дорівнює $1/2$. Як зазначалося у попередньому параграфі із спіном, наприклад, електрона пов'язаний його магнітний момент, який визначається відповідним співвідношенням (1.81). Можна чекати, що магнітний момент протона дорівнює *ядерному магнетону*

$$\mu_p = \frac{e}{2m_p} \hbar = \frac{m_e}{m_p} \mu_e, \quad (1.85)$$

де m_p – маса протона. Проте насправді *магнітний момент протона* μ_p не дорівнює ядерному магнетону:

$$\mu_p = 2,79 \mu_n. \quad (1.86)$$

Як не дивно, але нейтральний нейтрон теж має магнітний момент

$$\mu_n = -1,91 \mu_n. \quad (1.87)$$

Знак « \leftrightarrow » вказує на те, що магнітний момент нейтрона направлений протилежно до спіну.

Ядро, яке складається з нуклонів, також у цілому характеризується певним моментом імпульсу і магнітним моментом. Момент імпульсу зумовлюється спінами окремих нуклонів, а також орбітальним рухом усередині ядра. Результируючий момент імпульсу ядра утворює його *спін*. Квантове число, яке характеризує спін ядра прийнято позначати як I . Тоді спін ядра дорівнює $\sqrt{I(I+1)}\hbar$. Встановлено, що проекція магнітного моменту на напрям спіну дорівнює

$$\mu_I = g \sqrt{I(I+1)}, \quad (1.88)$$

де g – так зване *гіромагнітне відношення*.

Оператор магнітного моменту будь-якої частинки пов'язаний з



операторами орбітального і спінового моментів співвідношенням

$$\hat{\mu}_z = \frac{e\hbar}{2m} (g_s \hat{s} + g_l \hat{l}). \quad (1.89)$$

Тут m – маса частинки, гіромагнітні відношення для електрона (e), протона (p), нейтрона (n) приведені в таблиці 5.

Таблиця 5

Значення гіромагнітних відношень для мікрочастинок

	e	p	n
g_l	-1	1	0
g_s	-2	2(2,793)	2(-1,913)

1.5. Надпровідність та ефекти Джозефсона

Як відомо питомий опір металів ρ з пониженням температури неперервно зменшується. Якби кристалічна решітка металу була ідеальною (тобто не містила домішок та дефектів), то його опір повністю зник би за температури 0 K . Однак, при зниженні температури у більшості металів і сплавів спостерігається різкий перехід в так званий надпровідний стан. Цей перехід відбувається при цілком визначеній для кожного матеріалу температурі T_c , яка називається критичною. Так, для алюмінію $T_c=1,2\text{ K}$, а для ніобію $T_c=9,2\text{ K}$.

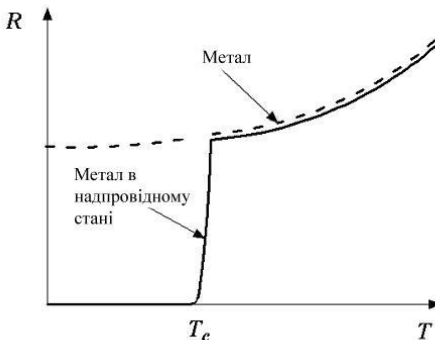


Рис. 1.8. Залежність опору металів від температури

Надпровідний перехід – це перехід в абсолютно новий фізичний стан. Можемо коротко нагадати основні фундаментальні властивості цього стану надпровідників, які були встановлені експериментально і описані феноменологічними теоріями і мікроскопічною теорією БКШ (Бардіна-Купера-



Шріффера):

- **Ідеальна електропровідність** (питомий опір ρ металу дорівнює нулю, якщо густина струму менша деякої критичної величини j_c , (див. рис. 1.8)). Електричний струм в надпровіднику є бездисипативним і згідно закону Джоуля – Ленца потужність, яка в ньому виділяється $Q = I^2 R = 0$. Тут R – опір провідника, I – сила струму в ньому. Як відомо, $R = \rho \frac{l}{S}$, де l довжина провідника, а S – його площа поперечного перерізу.

- **Ідеальний діамagnetизм** (індукція магнітного поля всередині надпровідників дорівнює нулю, якщо її значення ззовні менше критичного B_c). Магнітне поле може проникати в товщу надпровідника на глибину не більше $\lambda \approx 10^{-5}$ см ;



Рис. 1.9. а) Залежність теплоємності матеріалів на одиницю температури від температури T ; б) величини енергетичної щілини від температури

- **Енергетична щілина.** Термодинамічні властивості надпровідників також відрізняються від властивостей звичайних металів. В спектрі електронних збуджень є заборонений інтервал енергій (Δ – енергетична щілина), внаслідок чого електронний вклад в теплоємність малий. Величина щілини суттєво залежить від температури;

- **Квантування магнітного потоку.** В масивному надпровідному кільці циркулюючий струм і створене ним магнітне поле не можуть мати довільне значення. Захоплений в отвір магнітний потік Φ може приймати лише дискретні значення:

$$\Phi = n\Phi_0, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (1.90)$$



де $\Phi_0 = \frac{hc}{2e} \approx 2,07 \cdot 10^{-15} \text{ Вб}$. Фундаментальна одиниця потоку Φ_0

(квант потоку) пропорційна квантово-механічній величині – сталій Планка h ;

• **Макроскопічна хвильова функція.** Гінзбург і Ландау ввели поняття комплексного параметра порядку для напівпровідника – хвильову функцію надпровідних електронів

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{n(\vec{r})} e^{i\varphi(\vec{r})}. \quad (1.91)$$

Квадрат модуля макроскопічної хвильової функції дорівнює концентрації надпровідних електронів $n(\vec{r})$, а градієнт фази $\varphi(\vec{r})$ визначає струм в надпровіднику;

• **Куперівські пари.** Очевидно, що різниця властивостей металу у не надпровідній і надпровідній фазах пояснюється різницею «поведінки» електронів його провідності. У звичайній фазі вільні електрони рухаються між вузлами кристалічної решітки безладно,

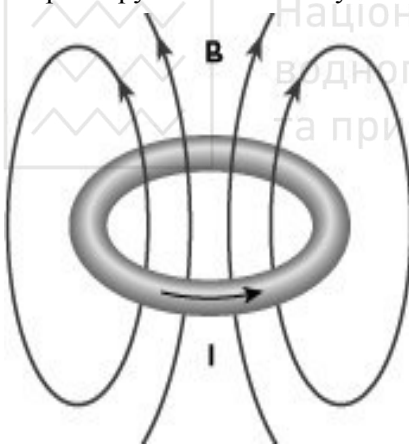


Рис. 1.10. Струм в надпровідному кільці і створюване ним магнітне поле. Потік магнітного поля може приймати лише дискретний ряд значень

подібно до молекул ідеального газу. Відмінність надпровідної фази полягає в тому, що деяка частина електронів провідності ніби сконцентрована в *надтечучу* рідину, яка як одне ціле (когерентний стан) може рухатися через кристал. Цей рух відбувається безперешкодно, тобто без тертя. Саме з цієї причини у надпровідній фазі відсутній електричний опір і електричний струм у надпровіднику може протікати не згасаючи, як завгодно довго без будь-якого зовнішнього джерела живлення. Вищевказана вла-

стивість електронів провідності у надпровіднику пов'язана з їх об'єднанням за низьких температур у так звані *куперівські пари*. Як показав американський фізик Л. Купер (1956 р.) певна частина електронів у надпровіднику, що мають протилежно спрямовані імпульси та спіни, можуть об'єднуватися в пари завдяки взаємодії через



кристалічну решітку. Механізм такого спарювання може бути різноманітним. Куперівські пари мають цілочисельний (нульовий) спин, тобто є бозонами. Система куперівських пар володіє *надтекучістю*, що у випадку електронів провідності забезпечує надпровідний стан.

Явища надпровідності лежать в основі так званих ефектів Джозефсона, відкритих у 1962 році. Вони почали широко застосовуватись в наш час як фізична основа квантових комп'ютерів [3].

Два надпровідних шари, розділених дуже тонким шаром ізолятора товщиною всього в декілька нанометрів, ведуть себе не як три, а як єдина квантова система. Така система отримала назву джозефсонівського тунельного контакту (див. рис. 1.11 а). Застосувавши до такої системи принципи квантової механіки, Джозефсон показав, що куперівські пари будуть долати цей бар'єр (тепер його прийнято називати переходом Джозефсона) навіть за відсутності прикладеної напруги. Існування електричного струму подібного роду незабаром було підтверджено експериментально, а сам ефект також отримав назву **стаціонарного ефекту Джозефсона**.

Надпровідникові шари S , складові контакту (береги контакту) характеризуються хвильовими функціями $\Psi_1 = |\Psi|e^{i\varphi_1}$ та

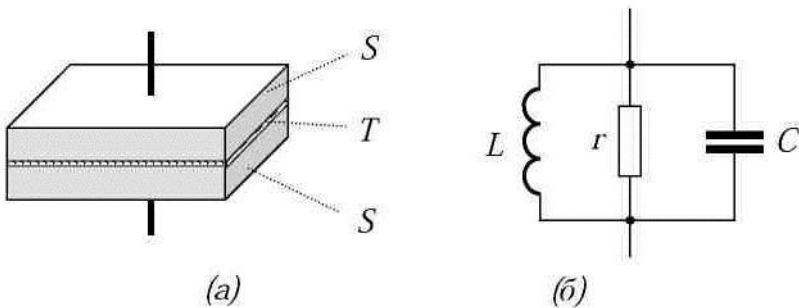


Рис. 1.11. а) Джозефсонівський тунельний контакт – два надпровідники S , розділених тонким шаром діелектрика T ; б) Еквівалентна схема джозефсонівського контакту (C - ємність, L - джозефсонівська індуктивність, r – активний опір, суттєвий при великому струмі через контакт)

$\Psi_2 = |\Psi|e^{i\varphi_2}$. Оскільки матеріали і температури однакові, модулі обох хвильових функцій повинні збігатися, а фази φ_1 і φ_2 когерент-



тні в кожному з надпровідників, але не скорельовані між собою. Однак, якщо встановити між ними хоча б слабкий контакт, наприклад тунельний, куперівські пари будуть проникати з одного берега в інший і встановиться фазова когерентність. Виникне єдина хвильова функція всього надпровідника $\tilde{\Psi} = |\Psi|e^{i\varphi}$ з різницею фаз на контакті $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$, яку можна розглядати як результат інтерференції хвильових функцій двох половинок.

З квантової механіки відомо, що густина струму j визначається з рівняння:

$$j = \frac{ie\hbar}{2m} (\tilde{\Psi} \nabla \tilde{\Psi}^* - \tilde{\Psi}^* \nabla \tilde{\Psi}). \quad (1.92)$$

Якщо врахувати, що хвильова функція $\tilde{\Psi} = |\Psi|e^{i\varphi}$, то легко знайти, що $j \sim \nabla \varphi$.

Отже, надпровідний струм може протікати без опору через тунельний бар'єр діелектрика, причому величина струму залежить від різниці фаз φ . Фаза квантовомеханічної хвильової функції прямо визначає таку вимірювану величину як сила струму (!).

В реальних металах ми не спостерігаємо (у відсутність зовнішнього поля) макроскопічного струму в зв'язку з тим, що значення фази у різних електронів є випадковими величинами і розкид фази призводить до того, що середнє значення густини струму дорівнює нулю. Отже, якщо утворити тунельний контакт, що складається з двох різних надпровідників, то через такий контакт, навіть у відсутність різниці потенціалів $V = 0$, потече струм, що залежить від різниці фаз ($\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$). Густина цього струму (струму Джозефсона) описується простим співвідношенням:

$$j = j_0 \sin \varphi. \quad (1.93)$$

Тут j_0 - максимальне значення густини бездисипативного струму через контакт, при перевищенні якого поряд з надпровідним струмом з'являється дисипативна компонента струму і на контактах виникає напруга V .

Якщо ж прикласти постійну напругу до переходу, квантова механіка показує, що куперівські пари електронів почнуть переміщатися через бар'єр спочатку в одному напрямку, а потім у зворотному-



му, у результаті чого виникне змінний струм, частота якого збільшується зі збільшенням напруги. Цей ефект отримав назву **нестационарного ефекту Джозефсона**. Друге співвідношення Джозефсона пов'язує напругу на контакті з похідною фази за часом:

$$V = \frac{\hbar}{2e} \frac{d\varphi}{dt}. \quad (1.94)$$

У випадку прикладеної до джозефсонівського контакту постійної напруги струм, згідно співвідношень (1.93, 1.94), коливається з частотою

$$\omega = \frac{2e}{\hbar} V = 483,6 \text{ МГц} / \text{мкВ}.$$

Отже, *постійна* напруга на контакті двох надпровідників викликає *змінний* струм. Оскільки частоту струму можна виміряти з великою точністю, ефект змінного струму тепер використовується для високоточного калібрування напруг.

Назвемо важливі характеристики джозефсонівського переходу:

- **Джозефсонівська енергія** E_j . Наявності на контакті різниці фаз φ відповідає енергія джозефсонівського зв'язку:

$$\begin{aligned} E(\varphi) &= E_j (1 - \cos \varphi), \\ E_j &= \frac{\hbar I_c}{2e}, \end{aligned} \quad (1.95)$$

де I_c - максимальне значення сили струму через контакт.

- **Джозефсонівська індуктивність** L . Надпровідне коло, що містить джозефсонівський контакт, можна представити у вигляді еквівалентної схеми (див. рис. 1.11 б).

Із означення індуктивності можна отримати

$$L = \frac{\hbar}{2e I_c \cos \varphi}. \quad (1.96)$$

Джозефсонівська індуктивність L нелінійно залежить від фази φ , що є необхідним для реалізації бітів квантового комп'ютера на основі джозефсонівського контакту.

- **Зарядова енергія** E_c . На обкладках тунельного контакту ємністю C накопичується заряд $Q = C \cdot V$. Характерна зарядова енергія



$$E_c = \frac{e^2}{2C}. \quad (1.97)$$

Запишемо енергію джозефсонівського контакту як суму кулонівської енергії (згідно 1.94) $E_{кул} = \frac{Q^2}{2C} = \frac{CV^2}{2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{2e} \right)^2 C \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2$ і енергії джозефсонівського зв'язку $E(\varphi) = \frac{\hbar I_c}{2e} (1 - \cos \varphi)$. Тоді гамі-

льтоніан з рівняння Шредінгера для контакту прийме вигляд:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{2e} \right)^2 C \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 + \frac{\hbar I_c}{2e} (1 - \cos \varphi) = \frac{1}{2} E_c N^2 + E_j (1 - \cos \varphi),$$

де $N = \frac{C\hbar}{4e^2} \frac{d\varphi}{dt}$ – число куперівських пар.

Якщо ввести оператори фази $\hat{\varphi}$ і кількості куперівських пар $\hat{N} = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$, то, виявляється справедливим рівняння невизначеностей Гейзенберга для цих операторів, тобто вони некомутативні

$$[\hat{\varphi}, \hat{N}] = i. \quad (1.98)$$

Найпоширеніше застосування ефекту Джозефсона. Якщо зробити невеликий надпровідний контур з двома вбудованими переходами Джозефсона на кожному кінці, а потім пропустити по ньому струм, ми отримаємо прилад під назвою «надпровідниковий квантовий інтерферометр», або СКВІД (від англійського SQUID – Superconducting QUantum Interference Device). В залежності від інтенсивності зовнішнього електромагнітного поля струм в його ланцюгу може змінюватися від нуля (коли струми, що йдуть від двох переходів, взаємно гасяться) до максимуму (коли вони однонаправлені і підсилюють один одного). Надпровідникових квантовий інтерферометр – найточніший і найкомпактніший на сьогоднішній день прилад для вимірювання магнітних полів. Сучасні комерційні SQUID дозволяють вимірювати магнітні поля з точністю $10^{-9} - 10^{-10}$ Гс (напруженість магнітного поля Землі приблизно дорівнює 10 Гс).



1.6. Ядерний магнітний резонанс

Ядерним магнітним резонансом (**ЯМР**) називають резонансне поглинання радіочастотних електромагнітних хвиль речовиною з ненульовим магнітним моментом ядер. Ненульовий магнітний момент мають ядра ^1H , ^2H , ^{13}C , ^{14}N , ^{15}N , ^{29}Si , ^{31}P та ін. Це явище спостерігається коли на зразок діють взаємно перпендикулярні магнітні поля: сильне постійне, напруженістю \vec{B}_0 , і слабке радіочастотне \vec{B}_1 ($10^6 - 10^7 \text{ Гц}$).

Розглянемо речовини зі спіном ядра $I = \frac{1}{2}$ (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{29}Si , ^{31}P та ін.). Для них в постійному полі \vec{B}_0 можливі дві орієнтації магнітного моменту ядра μ – «за полем» і «проти поля». У першому стані енергія ядра в магнітному полі дорівнює $-\mu B_0$, у другому $+\mu B_0$. Спочатку всі ядра знаходяться в першому стані, а для переходу в

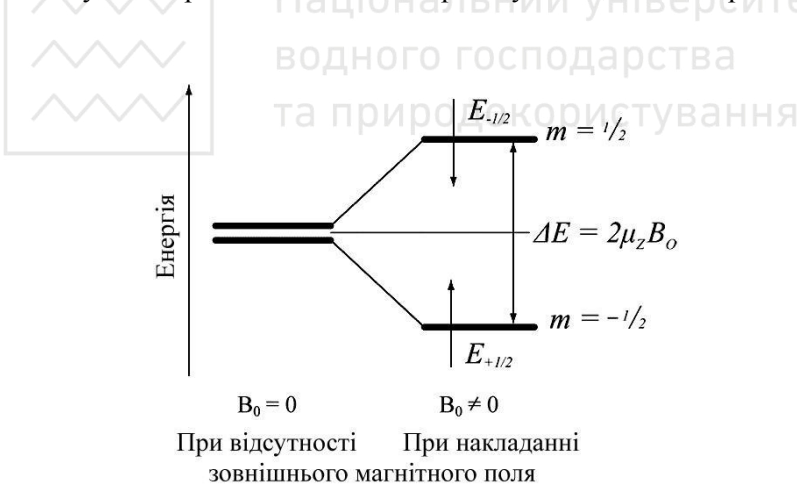


Рис.1.12. Розщеплення енергетичного рівня при ЯМР

другий стан ядру треба надати енергію $\Delta E = 2\mu B_0$ (див. рис. 1.12).

Якщо частота ω_0 змінного радіочастотного магнітного поля B_1 така, що виконується співвідношення:

$$\hbar\omega_0 = \Delta E, \quad (1.99)$$



то в речовині буде спостерігатись резонансне поглинання енергії цього поля, яке назвали ЯМР. Для ядер ^1H , ^{13}C , ^{31}P в магнітному полі з індукцією 11,7 Тл частоти ЯМР дорівнюють відповідно (в МГц): 500; 160,42; 202,4.

На явищі ЯМР базується спектроскопія ЯМР. Спектри ЯМР реєструють за допомогою радіоспектретрів (див. рис. 1.13). Зразок досліджуваної речовини розміщують як осердя в котушку генеруючого контуру (магнітне поле з індукцією B_1), розташованого в зазорі магніту, що створює постійне поле з індукцією B_0 так, що B_1 перпендикулярне B_0 . При частоті ω поля B_1 , що дорівнює $\omega_0 = \Delta E/\hbar$ настає резонансне поглинання, що викликає падіння напруги в контурі, в схему якого включена котушка зі зразком. Падіння напруги

детектується, посилюється і подається на розгортку осцилографа або записуючий пристрій.

В сучасних радіоспектретрах ЯМР зазвичай використовують поля індукцією 1-12 Тл. Область спектру, в якій є сигнал детектування з однією або декількома максимумами, називається лінією поглинання ЯМР. Ширина спостережуваної лінії, виміряна на половині максимуму інтенсивності (площі сигналу) і виражена в Гц, називається шириною лінії ЯМР. Роздільна здатність спектру ЯМР – мінімальна шири-

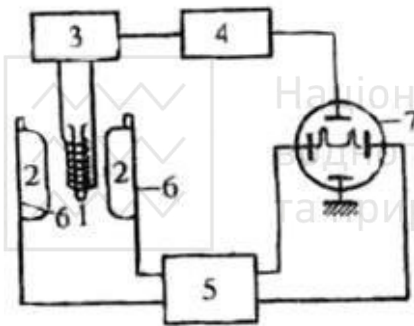


Рис. 1.13. Схема спектрометра ЯМР: 1 - котушка зі зразком; 2 - полюси магніту; 3-генератор радіочастотного поля; 4 - підсилювач і детектор; 5 - генератор моделюючої напруги; 6 - котушки модуляції поля B_0 ; 7 - осцилограф

на лінії ЯМР, яку дозволяє спостерігати даний спектрометр.



2.1. Поняття класичного та квантового комп'ютера

Елементи сучасної комп'ютерної техніки – транзистори, діоди, інтегральні мікросхеми, фотоприймачі, світлодіоди і лазери є «класичними» приладами. Визначення «класичний» відображає ту обставину, що фізичні величини, які визначають роботу приладів (наприклад, струми та напруги на електродах) описуються законами класичної фізики. Звичайно, внутрішні процеси в приладах, що відбуваються на атомному рівні, є квантовими. Такими процесами є утворення енергетичних зон, тунелювання в тунельно-резонансних діодах, розсіяння електронів в напівпровідниковій структурі транзисторів, випромінювання і поглинання фотонів в активному середовищі лазерів тощо. Ці внутрішні процеси описуються квантово-статистичним методом.

Головною тенденцією розвитку технологій «класичної» мікроелектроніки стало неперервне зменшення розмірів елементів приладів і, зокрема, елементної бази комп'ютерів. Відомий емпіричний закон Мура (див. табл. 6), згідно з яким починаючи з 1959 року кількість транзисторів в кристалі однієї інтегральної схеми протягом перших 15 років подвоювалася кожен рік, а після цього таке подвоєння відбувається за 1,5 року. Якщо перші кремнієві мікросхеми мали розміри елементів в площині кристала порядку десятків мікрон, то сучасні зразки характеризуються розмірами порядку 100 нм, а їх контроль здійснюється з точністю порядку 10 нм. Відповідно до закону Мура розміри інтегральної мікросхеми до 2020 року стануть порядку атомних, а отже, закони їх функціонування будуть визначатися законами мікросвіту, тобто квантовою механікою.

Таблиця 6

Залежність числа транзисторів в мікросхемі від року її випуску

Мікропроцесор	Рік випуску	Число транзисторів
4004	1971	2300
8008	1972	2500
8080	1974	5000



Продовження таблиці 6

8086	1978	29000
286	1982	120000
Intel 386™ processor	1985	275000
Intel 486™ processor	1989	$1,18 \cdot 10^6$
Intel® Pentium® processor	1993	$3,1 \cdot 10^6$
Intel® Pentium® II processor	1997	$7,5 \cdot 10^6$
Intel® Pentium® III processor	1999	$24 \cdot 10^6$
Intel® Pentium® 4 processor	2000	$42 \cdot 10^6$
Intel® Itanium® processor	2002	$220 \cdot 10^6$
Intel® Itanium® 2 processor	2003	$410 \cdot 10^6$

Сучасні комп'ютери є сукупністю **бітів** (елементів лише з двома можливими логічними станами «0» і «1», англ.: **binary digit - двійковий розряд**), обробляючих біти електронних елементів, та з'єднань між ними. Існують біти пам'яті, які зберігають інформацію, і керовані біти, які обробляють інформацію. На жорсткому диску комп'ютера бітом є намагнічена ділянка робочої поверхні, вектор намагнічення якої має два напрямки, що відповідає двом станам: «0» і «1». Управляючі біти електронних пристроїв комп'ютера реалізуються за допомогою напівпровідникової техніки (тригери тощо) і також мають два стійких стани. Між двома станами бітів повинен бути досить великий енергетичний бар'єр, для того щоб система не могла спонтанно переходити з одного стану в інший. Перемикання «0» \rightarrow «1» і «1» \rightarrow «0» вимагає подолання цього бар'єру, чим забезпечується надійність зберігання і обробки інформації. В управляючих пристроях комп'ютера, що реалізуються за допомогою напівпровідникової техніки (ТТЛ – логіка), рівню логічного «0» (низький рівень) відповідають сигнали діапазону ($-0,4 B < U_0 < 0,4 B$), а рівню логічної «1» – ($2,2 B < U_1 < 5,5 B$). У булевій алгебрі їм відповідають поняття «FALSE» і «TRUE». Комп'ютери, в яких логічні операції виконуються з цими класичними, з точки зору фізики, станами в даний час прийнято називати **класичними** [4].

Вже достатньо давно було виявлено, що класичні комп'ютери не

можуть бути ефективними в розв'язуванні деяких дуже важливих задач. Прикладами таких задач є довгострокові метеорологічні прогнози, при складанні яких необхідно проводити пошук інформації в неструктурованій базі даних, моделювання еволюції квантових систем (наприклад, ядерні реакції) і, нарешті, задачі криптографії, для яких необхідно проводити *факторизацію великих чисел*.

Щоб розв'язати задачу, комп'ютер, класичний чи квантовий, виконує певну послідовність операцій (інструкцій). Опис цієї послідовності операцій називається *алгоритмом розв'язку задачі*. Задача характеризується її розміром n , який дорівнює, наприклад, числу розрядів двійкового числа, над яким виконується алгоритм. Алгоритм визначається деякою схемою операцій N_n , яка залежить від n . Схема N_{n+1} отримується із N_n на основі простих правил.

В теорії складності алгоритмів для класичного комп'ютера прийнято поділяти алгоритми на ефективні та неефективні [5]. Алгоритм є ефективним, якщо схема операцій N_n складається із кількості операцій пропорційній n^d , де $d = \text{const}$. Час виконання ефективного алгоритму $t_n \sim n^d$. Ефективні алгоритми ще називають поліноміальними (P).

Ефективним алгоритмам класу P протиставляються неефективні, які вимагають експоненціально великих ресурсів ($N_n \sim a^n$, $t_n \sim a^n$). Наприклад, якщо $t_n \sim 2^n$, алгоритм вважають неефективним. Прикладом задачі, для якого не знайдено ефективного алгоритму на класичному комп'ютері є задача факторизації чисел. Вона полягає в розкладанні великих n розрядних чисел на прості множники. На класичному комп'ютері для цього потрібно $2^{\alpha \sqrt{n \log_2 n}}$ операцій. Наприклад, злам системи криптографії з відкритим ключем RSA – 129 (*Rivest, Sharnir, Adieman, 1977*: розкладання на прості множники 129-розрядного числа) зайняв в 1994 році вісім місяців роботи 1600 потужних комп'ютерів, розташованих по всьому світу і об'єднаних за допомогою GRID-систем. Розгадування шифру з ключем на основі розбиття на прості множники числа з $n=300$ на класичному комп'ютері займе вже 13 млрд. років (сьогоднішній вік Всесвіту) неперервної роботи. Недоступність цього завдання сучасним комп'ютерам використовується в криптографії для кодування (шифрування) секретної інформації.

Функціональна обмеженість класичних комп'ютерів в розв'язку складних задач квантової фізики, криптографії, статистики тощо



привела в середині 80-их років ХХ ст. до висунення ідеї обчислень на кардинально новій основі – квантових обчислень. Вперше ідея квантових обчислень була висловлена Ю. І. Манінім в 1980 році [6], але активно ця проблема стала обговорюватися після появи статей американського фізика-теоретика Р. Фейнмана [7, 8]. У цих роботах було запропоновано використовувати для обчислень операції не з числами (як у класичному комп'ютері), а зі станами квантової системи і було доведено, що це є основною перевагою квантового комп'ютера над класичним. Тоді ж було сформульовано *тезу Чьорча - Тьюринга - Дойча (СТД-принцип)*: «Будь-який фізичний процес може бути ефективно промодельований на квантовому комп'ютері». Це зумовлено тим, що стани квантової системи на відміну від класичної можуть знаходитися в суперпозиції між собою.

Квантовий комп'ютер є сукупністю квантових об'єктів (аналогів тригерів, магнітних ділянок жорстких дисків, комірок оперативної пам'яті тощо) – **кубітів (qubits)**, частинок або фізичних процесів, які можуть перебувати в двох квантових станах. Так само назвали і квантову одиницю інформації. Вперше це поняття було введено Б. Шумахером в 1995 році. Хвильові функції кубіта у двох основних станах позначають як $|0\rangle$ та $|1\rangle$ і називають «базисом», в позначеннях Дірака $[1]$ – логічний "0" $\equiv|0\rangle$, логічна "1" $\equiv|1\rangle$. Переходам $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ відповідають переходи квантової системи зі стану з енергією E_0 в стан з енергією E_1 і навпаки ($E_0 \leftrightarrow E_1$).

Розрізняють мікроскопічні і макроскопічні або мезоскопічні реалізації кубітів. В якості прикладів мікроскопічної реалізації можна вказати на:

1. дворівневі атоми;
2. частинки зі спіном $\frac{1}{2}$ (див. рис. 2.1);
3. фотон з двома можливими поляризаціями V і H (див. рис. 2.4).

В якості прикладів мезоскопічної реалізації можна вказати, наприклад, квантовані стани струмів в надпровідних кільцях з джозефсонівськими контактами.

В квантових комп'ютерах кубіти, так як і в класичних комп'ютерах біти, об'єднані в регістри. Звичайний трьохбітовий регістр у певний момент часу може зберігати лише **одне** з восьми значення – логічні 000, 001, 011, 010, 100, 101, 110, 111. А в трьохкубі-

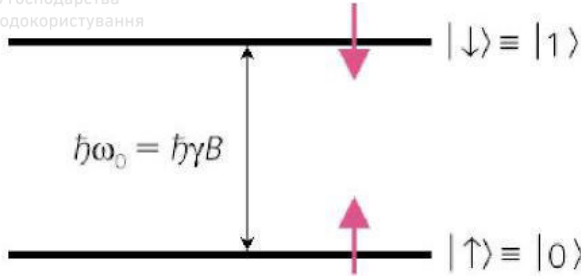


Рис. 2.1. Стани ядерного спіна $I = \pm 1/2$ частинки з гіромагнітним відношенням $\gamma > 0$ її рівні у зовнішньому магнітному полі з індукцією B представляють логічні стани кубіта $|0\rangle$ і $|1\rangle$. ω_0 - частота переходу між станами, \hbar - стала Дірака

товому реєстрі одночасно знаходяться **всі** вісім можливих значень. (Взагалі в реєстрі розміром N кубітів одночасно „живуть” всі можливі 2^N значень.)

Щоб зробити наочною принципову різницю між класичним бітом та кубітом, приводять [27] наступну аналогію. Елемент зображення (піксел), який відповідає класичному бістабільному елементу, може бути лише або чорним, або білим. А піксел, що відповідає кубіту, може мати будь-який колір. І як кольоровий піксел несе набагато більше інформації, ніж чорно-білий, так і кубіт зберігає в собі набагато більше інформації, ніж 1 класичний біт.

Якщо потрібно виконати якусь дію над кожним з 8 можливих чисел в реєстрі з 3 бітів на класичному комп'ютері, то потрібно виконати 8 кроків послідовно, оскільки в 3 звичайних бітах в кожний момент часу записано лише 1 з 8 можливих чисел. Потрібно їх послідовно перебрати і над кожним виконати певну операцію. У квантовому комп'ютері з реєстром з 3 кубітів завдання буде виконано за один крок, адже операція проводиться відразу над всіма числами, які одночасно зберігаються в реєстрі. Це називається «**квантовим паралелізмом**». Саме квантовий паралелізм дозволяє зробити деякі обчислення набагато ефективнішими в порівнянні з обчисленнями на класичному комп'ютері [10, 11].

Вважається, що двійкові системи класичного комп'ютера можуть бути побудовані на логічних елементах «NOT» та «AND». Насправді достатньо єдиного елемента «NAND = NOT AND», який при наявності на одному вході «1» виконує операцію NOT над зна-



ченням іншого входу.

Елемент «НЕ» («NOT») з одним входом в сучасних мікропроцесорах може бути побудованим на двох польових транзисторах (див.

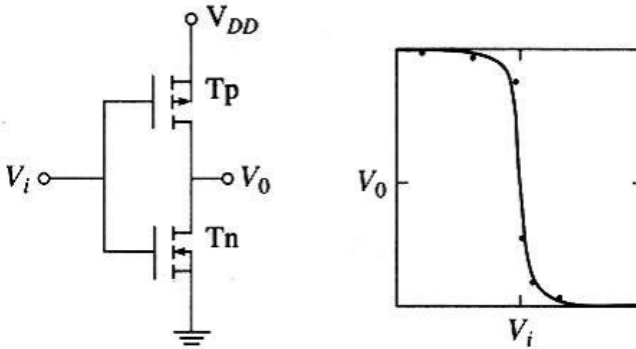


Рис. 2.2. Принципова схема логічного елемента NOT на польових транзисторах. Напруга живлення V_{DD} прикладена до послідовно сполучених р-канальному (відкритий, коли $V_i < 0$) і n-канальному (відкритий, коли $V_i > 0$) транзисторів

Рис.2.3. Нелінійна залежність вихідної напруги V_0 від вхідної V_i описує логічну операцію НЕ, якщо низьку напругу вважати логічним «0», і навпаки

рис. 2.2). Передаточна характеристика елемента (див. рис. 2.3) відповідає булевій функції «НЕ»: коли на вхідному електроді низька напруга («0»), на вихідному електроді висока напруга («1»), і навпаки.

Отже, підсумовуючи, можна сказати, що класичним регістром є сукупність деякого числа L бітів. Він має 2^L станів. В певний момент часу може реалізуватись лише один із цих станів.

Подібно до класичного комп'ютера доведено, що обчислення на квантовому комп'ютері зводяться до дії обмеженої кількості операторів над кубітами. Такі операції ще називаються гейтами (gates). Вважається, що достатньо лише трьох гейтів для здійснення квантових обчислень – двох однокубітних (NOT і Адамара) та двокубітного (контрольоване НЕ – CNOT). Про дію цих операторів на кубіти докладно розказано в розділі 3.

Щоб виконати необхідні операції на кубітах, на них, наприклад, діють імпульсами зовнішнього резонансного поля. Квантова еволюція стану кубіта $|\Psi\rangle$ здійснюється згідно рівнянню Шредінгера,



де $H_i(t) = -\mu \epsilon_0 \cos(\omega t + \varphi)$ – енергія взаємодії дипольного моменту μ кубіта і зовнішнього резонансного поля (наприклад, лазера). При цьому необхідно мати можливість впливати вибірково на будь-який обраний кубіт.

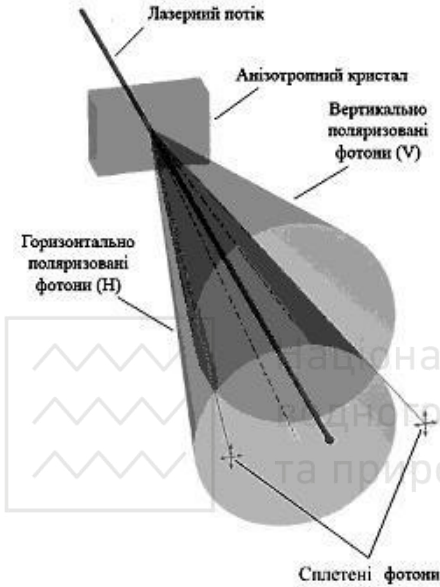


Рис. 2.4. Створення сплетених фотонів

фактично сплітають імпульси фотонів, це означає, що їх положення в реальному місці (координати), як показує детектор, також сплетені.

2.2. Принципи побудови та роботи ідеального квантового комп'ютера

При виборі конкретної схеми квантового комп'ютера, необхідно, *по-перше*, вибрати фізичну систему – елементну базу, яка забезпечить можливість створення в комп'ютері достатньої кількості керованих кубітів; *по-друге*, визначити фізичний механізм, який відповідає за взаємодію кубітів між собою і з оточенням; *по-третє*, ви-

Між кубітами квантового комп'ютера для реалізації двокубітний гейтів необхідно створити сплетеність. Співробітники Університету Рочестера (США) продемонстрували простий експериментальний метод створення сплетених кубітів (див. рис. 2.4), реалізованих на фотонах. У цьому експерименті ультрафіолетовий лазерний промінь падає на кристал з нелінійними оптичними властивостями (β -борат барію), який ділить ультрафіолетовий фотон на пару сплетених інфрачервоних фотонів. Кожен фотон попадає на 6 пікселів. Кожен піксел представляє один рівень стану кубіта. Рочестерські вчені

значити механізми вибіркового управління кубітами і вимірювання їх станів на виході. Все це разом і визначає так зване апаратне забезпечення квантового комп'ютера [9].

Схематично структура квантового комп'ютера показана на рис. 2.5.



Рис. 2.5. Квантовий комп'ютер складається з n кубітів і дозволяє проводити одно- і двокубітні операції над будь-яким з них (або будь-якою парою). Ці операції виконуються під впливом імпульсів зовнішнього поля, керованого класичним комп'ютером

Квантову частину комп'ютера складають n кубітів. Згідно принципу суперпозиції чистих станів вектор стану $|\Psi\rangle$ квантового регістра із n кубітів є розкладом по 2^n базисним станам регістра $|i_1 i_2 i_3 \dots i_n\rangle$, де $i_1, i_2, i_3 \dots i_n$ - одне з двох чисел (0 або 1):

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_n} a_{i_1 \dots i_n} |i_1 \dots i_n\rangle. \quad (2.1)$$

Тут коефіцієнти $a_{i_1 \dots i_n}$ – проекції вектора $|\Psi\rangle$ на відповідні орти $|i_1 \dots i_n\rangle$.

Ідеальний квантовий комп'ютер – це квантовий комп'ютер, у якого стани завжди когерентні. Це означає:

по-перше, відсутність взаємодії комп'ютера з оточенням, яке створює шуми і порушує когерентність вектора стану комп'ютера (декогеренція);

по-друге, в ідеальному квантовому комп'ютері зовнішні сигнали здійснюють абсолютно точне управління.



Запис (приготування початкового стану). До того як «запустити» обчислювальний процес на квантовому комп'ютері, зручно всі n кубітів привести у стан $|0\rangle$. Ця технічно складна процедура носить назву «ініціалізація» (обнулення). Наприклад, якщо в якості кубітів використовуються ядерні спіни, для приведення в стан $|0_1 0_2 0_3 \dots 0_n\rangle$ потрібне охолодження до температур порядку 1 мК . При введенні інформації в квантовий комп'ютер стан вхідного регістра, за допомогою відповідних імпульсних впливів перетворюється в когерентну суперпозицію базисних ортогональних станів $|\Psi_{\text{поч}}(0)\rangle$.

Обчислення. Вся інформація про систему зберігається у векторі стану $|\Psi\rangle$. Провести обчислення – це значить перетворити $|\Psi\rangle$ з якогось початкового $|\Psi_{\text{поч}}(0)\rangle$ стану в кінцевий $|\Psi_{\text{кін}}(t)\rangle$. Це здійснюється під керуванням класичного комп'ютера вмиканням генераторів полів і адресації їх випромінювання на певний кубіт квантового процесора у вигляді унітарних ($U^+ = U^{-1}$) перетворень кубітів (застосуванням однокубітних і двокубітних перетворень).

Математично процес обчислень можна розглядати як перетворення початкового вектора стану $|\Psi_{\text{поч}}\rangle$ в інший вектор $|\Psi_{\text{кін}}\rangle$ шляхом множення вектора $|\Psi_{\text{поч}}\rangle$ на унітарну матрицю U_f розміром $2^n \times 2^n$:

$$|\Psi_{\text{кін}}\rangle = U_f |\Psi_{\text{поч}}\rangle. \quad (2.2)$$

По завершенню алгоритму розв'язку в момент часу t результат обчислення буде записаний в кінцевому квантовому стані кубітів.

На рис. 2.5 така еволюція стану кубітів зображується уздовж горизонтальних ліній (вісь часу) у вигляді послідовності однокубітних і двокубітних гейтів.

Сукупність усіх можливих операцій на вході квантового комп'ютера, які формують вихідні стани, а також здійснюють унітарні локальні перетворення, відповідні алгоритму обчислення, способи подавлення декогеренції квантових станів і виправлення випадкових помилок, грають тут ту ж роль, що і «програмне забезпечення» (software) в класичному комп'ютері.



Виведення інформації. Після дії гейтів на кубіти необхідно провести вимірювання отриманих квантових станів. Квантові алгоритми розв'язку складних задач можуть складатися з великої кількості ($\sim 10^9$) гейтів, які виконуються на комп'ютерах, що містять 10^3 кубітів. Аналіз рівнянь 2.1 і 2.2 для квантового комп'ютера дозволяє встановити принципи роботи та управління квантовим комп'ютером. Оскільки в початковому стані комп'ютер ініціалізований, то вся інформація про алгоритм розв'язку і задачу, яка розв'язується, міститься в матриці перетворень U_f , яка здійснюється відповідними гейтами. Інформацію про розв'язок задачі містить кінцевий вектор стану

$$|\Psi_{\text{кін}}\rangle = \sum_{i_1 \dots i_n} a'_{i_1 \dots i_n} |i_1 \dots i_n\rangle. \quad (2.3)$$

Тут коефіцієнти $a'_{i_1 \dots i_n}$ – проєкції вектора $|\Psi_{\text{кін}}\rangle$ на відповідні орти $|i_1 \dots i_n\rangle$.

Отримати цю інформацію можна, помірявши в базисі $|0\rangle$ і $|1\rangle$ стан кожного із n кубітів комп'ютера в стані $|\Psi_{\text{кін}}\rangle$. Таке вимірювання результату обчислення зводиться до проєктування вектора $|\Psi_{\text{кін}}\rangle$ на всі вектори базисних станів $|i_1 i_2 i_3 \dots i_n\rangle$ і знаходження всіх коефіцієнтів $a'_{i_1 \dots i_n}$. В результаті ми отримаємо будь-яке значення

$$|i_1 i_2 i_3 \dots i_n\rangle = \{ |00 \dots 000\rangle, |00 \dots 001\rangle, |00 \dots 010\rangle, |00 \dots 011\rangle \dots |11 \dots 111\rangle \} \quad 3$$

імовірностями $|a'_{i_1 \dots i_n}|^2$. Тут проявляється одне із слабких місць квантового комп'ютера: число $|i_1 i_2 i_3 \dots i_n\rangle$ в процесі вимірювання випадіє випадковим чином відповідно до значення амплітуди цього члена суперпозиції. Як різні числа з множини $|i_1 i_2 i_3 \dots i_n\rangle$ можуть представляти розв'язок задачі, коли він повинен бути один? Дійсно, це так: тільки одне число з цієї множини є розв'язком. Для того, щоб ідея квантового комп'ютера мала сенс, квантовий алгоритм по-



винен приводити до такого стану $|\Psi_{кін}\rangle$, щоб імовірність P_m знаходження правильного розв'язку (певного стану $|m\rangle$ з масиву $|i_1 i_2 i_3 \dots i_n\rangle$) становила $P_m = |a'_m|^2 \approx 1$, тоді як сума імовірностей всіх помилкових рішень $\sum_{i_1 \dots i_n \neq m} |a'_{i_1 \dots i_n}|^2 \approx 0$. Всі запропоновані до

цього часу квантові алгоритми мають описану властивість.

Можливий і інший (статистичний) спосіб встановлення розв'язку задачі. Оскільки завдяки квантовому паралелізму розрахунки задачі проводяться надзвичайно швидко, є можливість їх проводити велику кількість разів з вимірюванням отриманого результату. Таке вимірювання n -ної кількості розрахунків встановить максимальну імовірність P_m правильного розв'язку (певного стану $|m\rangle$ з масиву $|i_1 i_2 i_3 \dots i_n\rangle$).

Отже, схематично, робота квантового комп'ютера може бути представлена як послідовність трьох операцій:

1. «ЗАПИС» (приготування) початкового стану;
2. «ОБЧИСЛЕННЯ» (унітарні перетворення початкових станів);
3. «ВИВЕДЕННЯ» результату (вимірювання, проектування кінцевого стану).

Також сюди слід віднести допоміжну операцію «СКИДАННЯ», що переводить регістр в стан $|0_1 0_2 0_3 \dots 0_n\rangle$.

Управління квантовим комп'ютером. В ході квантових обчислень відбувається перетворення початкового вектора стану $|\Psi_{поч}\rangle = \sum_{i_1 \dots i_n} a_{i_1 \dots i_n} |i_1 \dots i_n\rangle$ в кінцевий вектор $|\Psi_{кін}\rangle = \sum_{i_1 \dots i_n} a'_{i_1 \dots i_n} |i_1 \dots i_n\rangle$ через неперервний ряд станів. Оскільки базисний набір станів $|i_1 \dots i_n\rangle$ залишається при цьому незмінним, то динаміка зміни станів передається еволюцією відповідних коефіцієнтів (2.1) від $a_{i_1 \dots i_n}$ до $a'_{i_1 \dots i_n}$, тобто ці коефіцієнти залежать від часу – $a_{i_1 \dots i_n}(t)$. Таким чином, вони є аналоговими величинами, які



приймають неперервний ряд значень в інтервалі $0 \leq |a_{i_1 \dots i_n}| \leq 1$.

Управляти квантовим комп'ютером, - значить, управляти процесами $a_{i_1 \dots i_n}(t)$, тобто за способом управління квантовий комп'ютер є аналоговим комп'ютером. В цьому проявляється ще одна особливість квантового комп'ютера: він повинен поєднувати цифрову форму зберігання інформації, аналоговий спосіб управління і імовірнісний характер представлення цифрового розв'язку. При створенні класичних комп'ютерів аналогового типу аналогові змінні (струми та напруги) вдавалося контролювати з точністю 10^{-2} , що і призвело до витіснення їх цифровими ЕВМ. Розрахунки показують, що параметри керуючих кубітами сигналів (імпульсів) в квантовому комп'ютері повинні контролюватися з похибкою $10^{-5} - 10^{-4}$.

Розглянемо питання **ресурсів квантового комп'ютера**, які дають йому перевагу в порівнянні з класичним комп'ютером.

Суперпозиція $|\Psi\rangle$ з рівняння (2.1) містить 2^n доданків розкладу цього вектора по базисних станах $|00 \dots 000\rangle$, $|00 \dots 001\rangle$, $|00 \dots 010\rangle$, $|00 \dots 011\rangle$ і т.д. до $|11 \dots 111\rangle$. Обмежений фізичний ресурс, тобто невелика кількість $n \cong 10^3$ частинок (кубітів), створює експоненціально великий $2^n = 2^{1000} \cong 10^{300}$ математичний інформаційний ресурс квантового комп'ютера.

Наслідком принципу суперпозиції є також 2^n - кратний паралелізм обчислень. Дійсно, зміна стану лише одного кубіта перебудовує всю суперпозицію, оскільки набір базисних станів постійний, а змінюються всі коефіцієнти виразу (2.1).

Класичний же комп'ютер має набагато скромніші ресурси ніж квантовий. Класичний регістр із n бітів може знаходитись лише в одному із 2^n станів, оскільки він не підкоряється принципу суперпозиції. Зміна стану одного біта переводить регістр в інший одномірний (близький за значенням) стан.

Все ж, квантовий комп'ютер незважаючи на свою перспективність довго залишався б в області математичних абстракцій, якби не П. Шор, який в 1994 році створив новий алгоритм факторизації [10], розрахований саме на застосування на квантовому комп'ютері. Він показав, що застосовуючи новий алгоритм, квантовий комп'ютер здатний розв'язати цю задачу за кількість операцій, пропорційну n^3 ,



тобто злам RSA - 129 можна здійснити за декілька секунд. Коефіцієнт прискорення завдання при великих n може бути дуже великим. Таке ж прискорення має місце при розв'язуванні на квантовому комп'ютері задач квантової фізики [11]. Цей результат був сенсаційний, оскільки спростовував емпіричний **закон Чьорча - Тьюриंगा: всі комп'ютери еквівалентні в тому сенсі, що перехід від одного комп'ютера до іншого не змінює класу складності задачі**. Закон був сформований для множини класичних комп'ютерів і порушується при включенні в множину квантових комп'ютерів.

Загалом, крім цієї, можна вказати ще на декілька причин, які призвели до різкого зростання інтересу до квантового комп'ютера:

1. Розроблені квантові алгоритми пошуку в неструктурованій базі даних [12], швидких квантових перетворень Фур'є, виявлення періодичності дуже складних функцій та знаходження їх періодів, розпізнавання структур абстрактної алгебри та їх функцій.
2. Розроблена процедура корекції квантових помилок [13-16], без якої практично неможливі спроби створити квантовий комп'ютер.
3. Продемонстрована експериментально можливість квантових обчислень на основі алгоритму Гровера та ін. на рідинних ядерних магнітно - резонансних (ЯМР) квантових комп'ютерах.
4. Запропоновано реалістичні варіанти конструкцій квантових комп'ютерів на основі твердотільних елементів.

Все ж на даний час залишаються значні проблеми, які суттєво гальмують розвиток квантового комп'ютингу. Це в першу чергу:

1. Проблеми декогеренції (її наявність веде до необхідності використовувати алгоритми «корекції помилок»).
2. Як здійснювати сплетення кубітів контрольованим чином?
3. Як передати інформацію від однієї частини обчислювального пристрою до іншої? Що є квантово-механічним аналогом провідників і шин даних в класичних комп'ютерах?
4. Проблема квантових вимірювань. Як виконувати вимірювання без руйнування квантових станів? Необхідні алгоритми «корекції детектування» і читання даних.

Вважається, що при розробці квантового комп'ютера необхідно, перш за все, вибрати фізичну систему, тобто таку його основу, яка б відповідала вимогам так званих п'яти «критеріїв ДіВінченцо» [17]:

1. Фізична система, що є процесором квантового комп'ютера, повинна містити значне число ($N \approx 1000$) добре розпізнаваних кубі-



тів для виконання відповідних квантових операцій, бо лише у цьому випадку економічно виправдовуються витрати на його реалізацію порівняно з сучасними класичними комп'ютерами;

2. Необхідно забезпечити умову для приготування вхідної комірки пам'яті (регістра) у вихідному основному базисному стані. Тобто повинна існувати можливість ініціалізації регістра і переведення кубітів, що реалізуються, в початковий стан;

3. Необхідно обмежити процес спонтанної зміни квантових станів, зумовлений взаємодією системи кубітів з навколишнім середовищем, що призводить до руйнування суперпозицій квантових станів і робить неможливим виконання квантових алгоритмів (декогеренція). Час спонтанної зміни квантових станів повинен, принаймні, в 10^4 раз перевищувати час виконання основних квантових операцій (час такту). Для цього система кубітів повинна слабо взаємодіяти з оточенням;

4. Необхідно забезпечити за час такту виконання необхідної сукупності однокубітних та двокубітних квантових логічних операцій, що визначають унітарні перетворення.

5. Необхідно впливати на кожен кубіт окремо, а також мати можливість вимірювати стан квантової системи на виході, тобто при отриманні результату. Отже, вибір фізичної основи квантового процесора має бути узгоджений з досить простим пристроєм введення-виведення інформації.

Із перерахованих критеріїв на даний час технічно найбільш складно реалізувати третій критерій. Для його виконання, перш за все, потрібно ізолювати квантову систему від навколишнього середовища на деякий час, достатній для виконання розрахунку, оскільки кубіти комп'ютера працюють в умовах шумового впливу зовнішнього середовища. Як було показано вище елементарні стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ і їх суперпозиції – це когерентні стани. Будь-яка випадкова дія середовища на кубіт руйнує квантову когерентність. Так, флуктуації напруг на електродах, шумові струми, неточності виконання самих імпульсних впливів на кубіти в ході обчислювального процесу – все це вносить неконтрольовані похибки в фази і амплітуди станів кубітів. У нашому макросвіті когерентні суперпозиції станів можуть існувати обмежений, дуже короткий час. Це явище втрати квантовій когерентності називається **декогеренцією (decoherence)**.



Процес декогеренції має характерний часовий масштаб, залежний як від оточення, так і від властивостей самої системи [3]. Перебування кубіта на сфері Блоха (про це докладніше в розділі 3) може бути збурене двома різними способами. А саме, зміною кутів ϑ і φ , які, відповідно, характеризуються поздовжнім і поперечним часом t_ϑ і t_φ . Час дефазування t_φ визначає втрату кубітом фазової пам'яті, тобто руйнування певної фази між станами в суперпозиції. При цьому імовірності $|\alpha|^2$ і $|\beta|^2$ не змінюються. Час енергетичної релаксації t_g змінює числа заповнення станів.

Сумарний час декогеренції t визначається співвідношенням $t^{-1} = t_g^{-1} + t_\varphi^{-1}$. Після закінчення часу t системи кубітів, контрольований обчислювальний процес припиниться, еволюція квантового комп'ютера набуде випадковий (дифузійний) характер. Тому, квантове обчислення повинне бути проведеним за час менший, ніж t . Реалізація великих часів існування в системі когерентних суперпозиційних станів є основним завданням на шляху побудови квантового комп'ютера. Із збільшенням числа кубітів в регістрі і збільшення кількості гейтів (до 10^9) над ними вона стає все більш складною, а, на думку деяких учених – принципово не здійсненою. Це пов'язано з тим, що до процесів декогеренції є надзвичайно чутливими сплетені стани кубітів, оскільки одна-єдина дія на будь-якій з них може зруйнувати весь когерентний стан. Усунення проблеми декогеренції шукають як експериментально, так і розвитком алгоритмічних методів (квантова корекція помилок [17]).

Суть квантової корекції помилок полягає в наступному. Будь-яке унітарне перетворення можна реалізувати лише з деякою точністю. Крім того, систему кубітів не можна повністю захистити від взаємодії з навколишнім середовищем. Все це повинно приводити до похибок, які будуть накопичуватися в процесі обчислення. Через $L \sim \delta^{-1}$ кроків (де δ – точність кожного унітарного перетворення) імовірність помилки стане порядку одиниці. На щастя, ці труднощі можна подолати, використовуючи квантові коди, що виправляють помилки. Наприклад, вже у випадку одного кубіта можна вважати припустимими не всі його квантові стани. Сферу Блоха можна розбити на окремі ділянки, наприклад, апроксимуючи її правильним многогранником, і вважати припустимими лише квантові стани, які



представлені векторами, проведеними до центру граней. Якщо через зовнішні впливи вектор стану зміститься за деякий час (період контролю) зі свого припустимого положення, але залишиться у межах грані, то при періодичному контролі він може бути примусово повернутий у центр грані, що дозволяє підтримувати припустимий стан кубіта незмінним як завгодно довго.

У 1996 році П. Шор запропонував [14] схему корекції помилок в процесі квантового обчислення (fault-tolerant quantum computation), яка була незабаром вдосконалена. Остаточний результат полягає в наступному. Існує деяке порогове значення точності δ_0 , таке що при $\delta < \delta_0$ можливо яке завгодно довге квантове обчислення. Однак, при $\delta > \delta_0$ помилки накопичуються швидше, ніж їх вдається виправляти. Це означає, що операції квантової корекції помилок видаляють з комп'ютера більше помилок, ніж вносять. Цей висновок дуже важливий: по суті, він має силу однієї із теорем існування повномасштабного квантового комп'ютера: *кожний із унітарних операторів повинен бути реалізованим з точністю $\delta < \delta_0$* . За різними оцінками, δ_0 лежить в інтервалі від 10^{-2} до 10^{-6} (точне значення залежить від характеру збурень і використовуваної схеми корекції помилок).

Програма періодичного контролю, виявлення, діагностики та квантової корекції помилок має запускатись і працювати у фоновому режимі. Через необхідність надлишкового кодування значно зростає й сумарна кількість потрібних для квантових обчислень кубітів. Але завдяки цьому квантові обчислення стають можливими навіть за наявності декогеренції.

Реалізувати четвертий критерій теж надзвичайно складно. Основна складність в практичній реалізації квантових обчислень полягає в тому, що технічно дуже складно виконати двокубітні гейти, які грають принципову роль у таких обчисленнях. Для виконання двокубітних перетворень, повинне здійснюватись управління ступенем сплетеності частинок, яке визначається перекриттям просторових частин їх хвильових функцій. Однак, для проведення обчислень потрібно також і чітко розрізняти частинки, що можливо лише якщо перекриття хвильових функцій досить мале. Таким чином, наявна суперечливість вимог до фізичної реалізації квантових обчислень. Технічно двокубітні гейти здійснювати у всякому разі складніше, ніж однокубітні. Тому дослідниками [18] пропонується наступний підхід. Оскільки взаємодія частинок із зміною ступеня сплетеності



Національний університет

водного господарства
та природокористування

впливає з хвильового рівняння і підтверджується експериментально, то двокубітні гейти відбуваються в ході природної часової еволюції квантової системи. Керувати ж такою системою можна за допомогою тільки однокубітних гейтів, які набагато простіше контролювати. Отже, пропонується робити обчислення, впливаючи на систему тільки однокубітними імпульсами, а двокубітні перетворення будуть відбуватися у фоновому режимі, і управлятись не будуть. В цьому суть запропонованої моделі обчислень з однокубітним управлінням. Така модель є набагато більш реалістичною ніж абстрактна схема квантового комп'ютера, що передбачає управління двокубітною взаємодією.



Національний університет
водного господарства
та природокористування



3.1. Математичне представлення кубіта

У загальному випадку, стан квантової системи задається хвильовою функцією виду (1.26). У випадку однокубітної системи він набуває вигляду [19]:

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (3.1)$$

де α і β – комплексні коефіцієнти. При вимірюванні стану системи з хвильовою функцією (3.1), ймовірність виявити її в стані $|0\rangle$ згідно (1.29) дорівнює $|\alpha|^2$, а ймовірність виявити її в стані $|1\rangle$ дорівнює $|\beta|^2$. Сума цих ймовірностей очевидно дорівнює одиниці:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (3.2)$$

Нагадаємо, що стан (3.1) виражає принцип суперпозиції квантової механіки як лінійної теорії: якщо стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ є розв'язком рівняння Шредингера для системи, то будь-яка суперпозиція цих розв'язків також буде розв'язком цього рівняння.

Хвильову функцію $|\Psi\rangle$ будемо розглядати, як вектор в двовимірному гільбертовому просторі. При цьому хвильові функції $|0\rangle$ і $|1\rangle$ грають роль базису цього простору [20]. Поряд з вектором $|\Psi\rangle$, введемо ермітово-спряжений (комплексно спряжений та транспонований) вектор $\langle\Psi| \equiv |\Psi\rangle^+$. Скалярний добуток двох векторів $|\Psi_1\rangle$ і $|\Psi_2\rangle$ запишемо у вигляді $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$ і будемо вважати основні стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ ортонормованими:

$$\langle 0|0\rangle = 1, \quad \langle 1|1\rangle = 1, \quad \langle 0|1\rangle = 0, \quad \langle 1|0\rangle = 0. \quad (3.3)$$

Тоді умова нормування хвильового вектора кубіта $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ відразу перетворюється на умову (3.2) для коефіцієнтів α і β . Кубіт має геометричне зображення. Розглянемо спочатку випадок дійсних коефіцієнтів α і β . В такому разі зручно використовувати тригонометричне представлення:



$$\alpha = \cos \varphi, \quad \beta = \sin \varphi. \quad (3.4)$$

В цьому випадку умова (3.2) виконується автоматично. На площині (α, β) умова (3.2) задає одиничне коло з центром в початку координат (рис. 3.1).

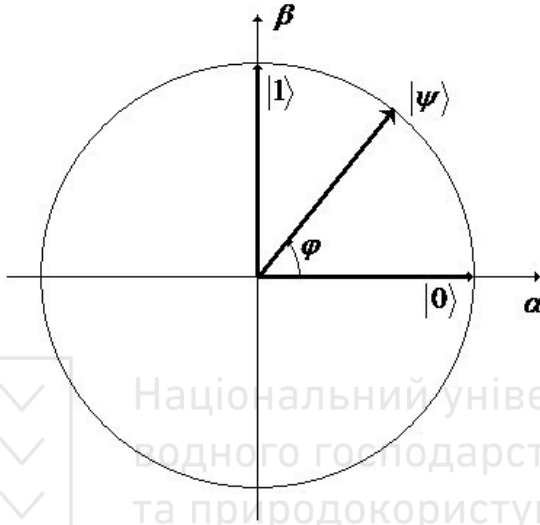


Рис. 3.1. Геометричне зображення кубіта $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ для дійсних коефіцієнтів α і β

Якщо $\varphi = 0$, відповідно до (3.1), (3.4) ми отримуємо $|\Psi\rangle = |0\rangle$, а при $\varphi = \pi/2$, $|\Psi\rangle = |1\rangle$.

У загальному випадку комплексних коефіцієнтів α і β , вони можуть бути подані у вигляді: $\alpha = e^{i\gamma} \cos \frac{\vartheta}{2}$, $\beta = e^{i\lambda} \sin \frac{\vartheta}{2}$.

Тоді кубіт (3.1) набуде вигляду: $|\Psi\rangle = e^{i\gamma} \cos \frac{\vartheta}{2} |0\rangle + e^{i\lambda} \sin \frac{\vartheta}{2} |1\rangle$

або
$$|\Psi\rangle = e^{i\gamma} \left(\cos \frac{\vartheta}{2} |0\rangle + e^{i(\lambda-\gamma)} \sin \frac{\vartheta}{2} |1\rangle \right)$$

Фазовий множник у багатьох випадках виявляється несуттєвим. Опускаючи цей множник і позначаючи $\phi = \lambda - \gamma$ подамо кубіт у вигляді:



$$|\Psi\rangle = \cos \frac{\mathcal{G}}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\mathcal{G}}{2} |1\rangle. \quad (3.5)$$

Таким чином, отримане уявлення кубіта має два параметри – \mathcal{G} і ϕ . Будемо інтерпретувати їх як кути сферичної системи координат (див. рис. 3.2).

Кубіт представляється вектором одиничної довжини в тривимірному просторі. Таке геометричне зображення кубіта називається його поданням на сфері Блоха (в деякій літературі зустрічається назва – сфера Пуанкаре). Відповідно до (3.5), при $\mathcal{G} = 0$ отримуємо базисний $|0\rangle$, а при $\mathcal{G} = \pi$, $|\Psi\rangle = |1\rangle$ (з точністю до фазового множника $e^{i\phi}$).

На сфері Блоха нескінченно багато точок. Відповідно, кубіт може знаходитися в одному з нескінченної кількості станів. Здавалося б, використовуючи один кубіт, можна зберігати нескінченно багато інформації. Однак, насправді це не так. При вимірюванні стану ку-

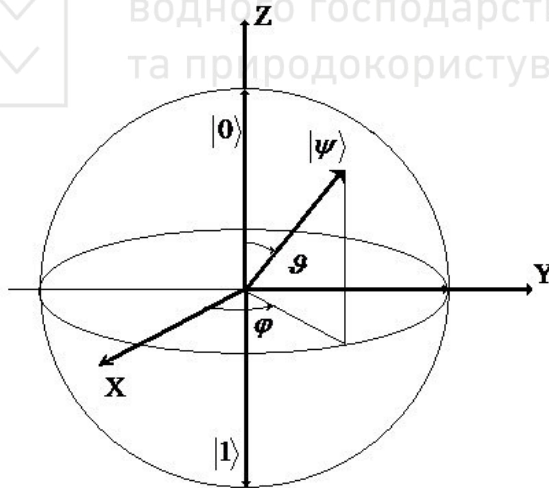


Рис. 3.2. Геометричне зображення кубіта $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ для випадку комплексних коефіцієнтів α і β – сфера Блоха

біта, він може бути знайдений в одному з двох можливих станів – $|0\rangle$ або $|1\rangle$.



Відповідно, ми можемо винести з кубіта один біт інформації. Якщо б ми могли отримати багато однакових копій певного кубіта і провести вимір стану кожної копії, то з ймовірністю α^2 ми б знайшли кубіт в стані $|0\rangle$, а з ймовірністю β^2 – в стані $|1\rangle$. Число α^2 може приймати нескінченно багато значень. Таким чином, ми отримали б нескінченно багато інформації, закодованої в одному кубіті.

Для цього ми повинні були б, спочатку, отримати скільки завгодно копій цього кубіта. Однак існує теорема про неможливість клонування кубіта в невідомому стані, яка буде наведена нижче. Таким чином, з одного кубіта можна отримати тільки один біт інформації.

3.2. Однокубітні логічні елементи

Квантове перетворення системи, стан якої задається згідно (3.1) хвильовим вектором $|\Psi\rangle$, переводить її в інший стан $|\tilde{\Psi}\rangle$:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \tilde{\alpha}|0\rangle + \tilde{\beta}|1\rangle. \quad (3.6)$$

У квантовій механіці, будь-який вплив на систему описується лінійним оператором \hat{U} , що діє на вектор стану системи:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \hat{U}|\Psi\rangle. \quad (3.7)$$

Лінійність оператора \hat{U} впливає з лінійності рівняння Шредінгера. Дійсно, нехай $|\Psi\rangle$ – залежний від часу вектор стану системи.

Згідно (1.39) рівняння Шредінгера з гамільтоніаном \hat{H} запишемо у вигляді:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi\rangle \quad (3.8)$$

Нехай, для простоти, гамільтоніан системи не залежить від часу. Тоді, розв'язок рівняння (3.8) з початковою умовою: $|\Psi\rangle|_{t=0} = |\psi\rangle$ може бути записаний у вигляді:

$$|\tilde{\psi}\rangle = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)|\psi\rangle. \quad (3.9)$$



Порівняння (3.9) з (3.7), дозволяє пов'язати лінійний оператор \hat{U} з гамільтоніаном \hat{H} , що описує зовнішній вплив на кубіт:

$$\hat{U} = \exp(-i\hat{H}t/\hbar). \quad (3.10)$$

Тут під виразом $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ розуміємо розклад в ряд Тейлора

$$\begin{aligned} \exp(-i\hat{H}t/\hbar) = & 1 - \frac{i\hat{H}t}{\hbar} - \frac{1}{2!} \left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar} \right)^2 - \\ & - \frac{1}{3!} \left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar} \right)^3 - \dots - \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar} \right)^n + \dots \end{aligned} \quad (3.11)$$

Оператор Гамільтона повинен бути ермітовим для того, щоб його власні числа – допустимі значення енергії системи, були дійсними. Тоді з (3.10) випливає, що оператор \hat{U} повинен бути унітарним:

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \exp(-i\hat{H}t/\hbar) \exp(-i\hat{H}^\dagger t/\hbar) = \hat{I}. \quad (3.12)$$

Унітарність оператора \hat{U} означає, що якщо початковий стан системи нормований

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad (3.13)$$

то і стан, в який система переходить після взаємодії, також є нормованим. Дійсно, згідно (3.7), (3.12) і (3.13), отримуємо

$$\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (3.14)$$

Унітарний оператор завжди оборотний:

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I} \Rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{U} \hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1} \Rightarrow \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \quad (3.15)$$

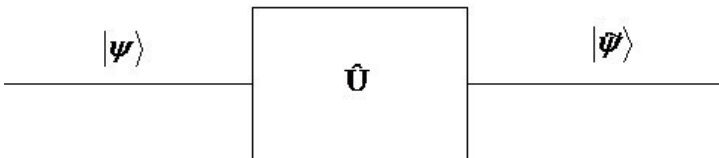


Рис. 3.3. Квантовий логічний елемент \hat{U} перетворює вектор $|\psi\rangle$
в вектор $|\tilde{\psi}\rangle$

Надалі, вплив на кубіт (або на систему кубітів) ми будемо розг-



глядати, як процес обчислення. В такому випадку вектор $|\psi\rangle$ відіграє роль вхідного сигналу, оператор \hat{U} визначає обчислювальний процес, а вектор $|\tilde{\psi}\rangle$ – результат обчислення (див. рис. 3.3).

Згідно (3.15) кожен квантовий обчислювальний процес оборотний. Тобто, якщо в результаті обчислювального процесу \hat{U} вхідний сигнал ψ був перетворений у вихідний сигнал $|\tilde{\psi}\rangle$, то існує оберне-

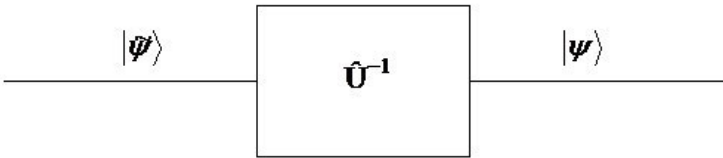


Рис. 3.4. Квантовий логічний елемент \hat{U}^{-1} перетворює вектор $|\tilde{\psi}\rangle$ в вектор $|\psi\rangle$

ний квантовий обчислювальний процес \hat{U}^{-1} , який здійснює обернене перетворення (див. рис. 3.4). Відзначимо, що класичні обчислювальні процеси не завжди оборотні.

Надалі ми будемо використовувати *матричне представлення операторів* \hat{U} . Опишемо відповідні конструкції. Розглянемо дію оператора на кубіт. На підставі лінійності оператора

$$\hat{U}|\psi\rangle = \hat{U}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha\hat{U}|0\rangle + \beta\hat{U}|1\rangle. \quad (3.16)$$

Таким чином, дія оператора на кубіт визначається його дією на базисні вектора, $|0\rangle$ і $|1\rangle$. Ці вектора утворюють ортонормований базис в двовимірному гільбертовому просторі. Це означає, що будь-який вектор цього простору може бути розкладений за базисними векторами.

Запишемо розклад векторів $\hat{U}|0\rangle$ і $\hat{U}|1\rangle$ в базисі $|0\rangle, |1\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{U}|0\rangle &= U_{00}|0\rangle + U_{10}|1\rangle, \\ \hat{U}|1\rangle &= U_{01}|0\rangle + U_{11}|1\rangle. \end{aligned} \quad (3.17)$$



Згідно (3.17), коефіцієнти розкладання U_{mn} можуть бути розраховані як

$$\begin{aligned} U_{00} &= \langle 0 | \hat{U} | 0 \rangle, & U_{10} &= \langle 1 | \hat{U} | 0 \rangle, \\ U_{01} &= \langle 0 | \hat{U} | 1 \rangle, & U_{11} &= \langle 1 | \hat{U} | 1 \rangle. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Підставляючи (3.17) в (3.16), одержуємо

$$\tilde{\alpha}|0\rangle + \tilde{\beta}|1\rangle = \alpha(U_{00}|0\rangle + U_{10}|1\rangle) + \beta(U_{01}|0\rangle + U_{11}|1\rangle)$$

або

$$|\tilde{\psi}\rangle = \tilde{\alpha}|0\rangle + \tilde{\beta}|1\rangle = (\alpha U_{00} + \beta U_{01})|0\rangle + (\alpha U_{10} + \beta U_{11})|1\rangle.$$

Таким чином, коефіцієнти розкладання вектора $|\tilde{\psi}\rangle$ виражені через коефіцієнти розкладання вихідного вектора $|\psi\rangle$ у вигляді:

$$\tilde{\alpha} = U_{00}\alpha + U_{01}\beta, \quad \tilde{\beta} = U_{10}\alpha + U_{11}\beta, \quad (3.19)$$

Введемо вектори

$$\psi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad \tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha} \\ \tilde{\beta} \end{pmatrix},$$

які відповідають початковому і кінцевому станам кубіта, та матрицю

$$U = \begin{pmatrix} U_{00} & U_{01} \\ U_{10} & U_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Тоді вираз (3.19), що пов'язує нові і старі компоненти векторів, можна записати у вигляді:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\alpha} \\ \tilde{\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{00} & U_{01} \\ U_{10} & U_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

або

$$\tilde{\psi} = U\psi. \quad (3.22)$$

Матриця U називається матричним представленням оператора \hat{U} . Властивість (3.12) унітарності оператора \hat{U} вимагає унітарність його матриці:



$$U^+U = \begin{pmatrix} U_{00}^* & U_{10}^* \\ U_{01}^* & U_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{00} & U_{01} \\ U_{10} & U_{11} \end{pmatrix} = I. \quad (3.23)$$

Звернувшись до сфери Блоха (рис.3.2), можна побачити геометричний зміст унітарних перетворень: усі унітарні перетворення мають геометричною інтерпретацією певний поворот вектора стану кубіта. Тому усі вони можуть бути зведені до комбінації лише двох видів перетворень, один з яких відповідає повороту вектора за азимутом на якийсь кут φ (від 0 до 2π), а другий – до зміни кута ϑ з віссю OZ . Множина унітарних перетворень нескінченна, а значить поворот вектора стану в будь-яке положення можна проводити нескінченною кількістю способів. Однак, з деяким наближенням, квантові перетворення над скінченною множиною кубітів можна представити елементами деякого універсального скінченного набору перетворень (вентилів, гейтів (gates)). В [20] описуються можливі набори квантових гейтів для різних застосувань. Таким чином, модель квантових обчислень представляється у вигляді набору квантових схем. Розглянемо деякі гейти із стандартного універсального набору «вентилів» [20], призначеного для апроксимації довільних унітарних операторів.

3.3. Приклади однокубітних елементів

1. Гейт NOT

Позначимо квантовий логічний елемент NOT через \hat{X} . Визначимо спочатку дію цього оператора на базисні вектори. Вимагатимемо, щоб він переводив $|0\rangle$ в $|1\rangle$, а $|1\rangle$ в $|0\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{X}|0\rangle &= |1\rangle, \\ \hat{X}|1\rangle &= |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Тим самим квантовий оператор NOT стає природним узагальненням класичного оператора NOT. Використовуючи лінійність оператора \hat{X} , визначимо дію оператора на довільний кубіт:

$$\hat{X}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha\hat{X}|0\rangle + \beta\hat{X}|1\rangle.$$

Використовуючи (3.24), отримуємо



$$\hat{X}(\psi) = \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle. \quad (3.25)$$

Таким чином, оператор \hat{X} міняє місцями коефіцієнти при базисних векторах $|0\rangle$ і $|1\rangle$.

Порівнюючи (3.24) з (3.17), знаходимо матричні елементи X_{mn} оператора \hat{X} :

$$\begin{aligned} X_{00} &= 0, & X_{10} &= 1, \\ X_{01} &= 1, & X_{11} &= 0. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Запишемо матрицю X оператора \hat{X} :

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Перевірка:

$$NOT|0\rangle = X|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle, \quad (3.28)$$

$$NOT|1\rangle = X|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle.$$

Відзначимо, що матрицю X можна отримати як суму зовнішніх добутоків станів $|0\rangle$ та $|1\rangle$:

$$\begin{aligned} |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = X. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Подіємо матрицею X на вектор вхідного кубіта. Тоді отримуємо вектор вихідного кубіта у вигляді:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\alpha} \\ \tilde{\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

відповідно до (3.25).

Отримана матриця X є унітарною. Дійсно,



$$X^+ X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = I. \quad (3.31)$$

Дія оператора \hat{X} на кубіт

$$\psi = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

для дійсних α і β легко інтерпретується геометрично. В дійсному випадку використовуємо тригонометричне представлення

$$\alpha = \cos \varphi, \quad \beta = \sin \varphi, \quad \tilde{\alpha} = \cos \tilde{\varphi}, \quad \tilde{\beta} = \sin \tilde{\varphi}. \quad (3.32)$$

Тоді, згідно (3.30), (3.32),

$$\tilde{\varphi} = \pi/2 - \varphi. \quad (3.35)$$

Таким чином, оператор \hat{X} перетворює одиничний вектор, який зображає кубіт на одиничному колі, «відбиваючи» його від бісектриси першого і третього координатних кутів (див. рис. 3.5).

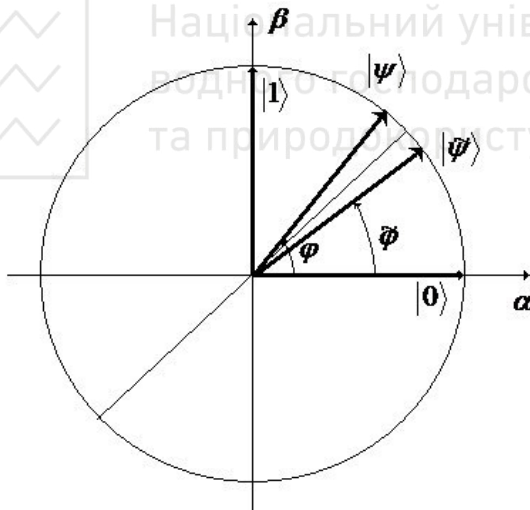


Рис. 3.5. Геометричне зображення перетворення NOT для випадку дійсних коефіцієнтів α і β

Знайдемо власні числа λ і власні вектори $|\psi\rangle_\lambda$ оператора \hat{X} :

$$\hat{X}|\psi\rangle_\lambda = \lambda|\psi\rangle_\lambda,$$

або, в матричному вигляді:



$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_\lambda = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_\lambda$$

Тоді:

$$\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_\lambda = 0.$$

Власні числа матриці X визначаються з рівняння

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0.$$

Звідси:

$$\lambda_{1,2} = \pm 1.$$

У свою чергу, власні вектори матриці X визначаються з умови:

$$-\lambda\alpha + \beta = 0,$$

або

Так як $\lambda_{1,2} = \pm 1$, маємо:

$$\beta_1 = \alpha_1, \beta_2 = -\alpha_2.$$

Вибираючи $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$, отримуємо $\beta_{1,2} = \pm 1$. Власні вектора мають вигляд:

$$|\psi\rangle_{1,2} = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix},$$

або, в нормованому вигляді:

$$|\psi\rangle_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Гейт NOT здійснює поворот вектора стану на кут $\theta = \frac{\pi}{2} - 2\varphi$ на сфері Блоха.

II. Гейт Адамара Н

Елемент Адамара (Hadamard) задається оператором \hat{H} , матриця якого



$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

де σ_x, σ_z – відповідні матриці Паулі (див. формули 1.78).

Подіємо цією матрицею на вектор вхідного кубіта. Тоді отримуємо вектор вихідного кубіта у вигляді:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\alpha} \\ \tilde{\beta} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \alpha + \beta \\ \alpha - \beta \end{pmatrix}. \quad (3.37)$$

Відповідний оператор \hat{H} діє на кубіт за правилом

$$\hat{H}|\psi\rangle = \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}}|1\rangle. \quad (3.38)$$

Дія гейта Адамара на базові стани $|0\rangle$ та $|1\rangle$ зводиться до дії множення матриці H на відповідний вектор:

$$\begin{aligned} H|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} H|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned}$$

Перетворення Адамара має велику кількість важливих застосувань. Діючи на $|0\rangle$, матриця H , згідно (3.38), створює стан суперпозиції. Застосовуючи до n кубітів окремо матрицю H , отримаємо суперпозицію всіх $2n$ можливих станів.

Матриця H є унітарною. Дійсно,

$$\begin{aligned} H^+H &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = I. \end{aligned}$$



З унітарності матриці оператора випливає унітарність самого оператора.

Знайдемо власні числа λ і власні вектори $|\psi\rangle_\lambda$ оператора \hat{H} :

$$\hat{H}|\psi\rangle_\lambda = \lambda|\psi\rangle_\lambda,$$

або, у матричному вигляді:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_\lambda = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_\lambda.$$

Тоді

$$\begin{pmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 1 & -1-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_\lambda = 0.$$

Власні числа матриці X визначаються з рівняння

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 1 & -1-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 2 = 0.$$

Звідси $\lambda_{1,2} = \pm 2$.

В свою чергу, власні вектора матриці H визначаються з умови

$$(1-\lambda)\alpha + \beta = 0,$$

або

$$\beta = (\lambda - 1)\alpha.$$

Враховуючи що, $\lambda_{1,2} = \pm 2$, маємо

$$\beta_1 = (\sqrt{2} - 1)\alpha_1, \quad \beta_2 = (-\sqrt{2} - 1)\alpha_2.$$

Надаючи значень $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$, отримуємо $\beta_{1,2} = \pm\sqrt{2} - 1$. Відповідні власні вектора мають вигляд:

$$|\psi\rangle_{1,2} = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\sqrt{2} - 1 \end{pmatrix},$$

або, в нормованому вигляді:

$$|\tilde{\psi}\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{4 - 2\sqrt{2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} - 1 \end{pmatrix},$$



$$|\tilde{\psi}\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2}-1 \end{pmatrix}.$$

3.4. Двокубітні стани та оператори

Розглянемо квантову систему, що складається з двох кубітів:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \alpha_1|0_1\rangle + \beta_1|1_1\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \alpha_2|0_2\rangle + \beta_2|1_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.40)$$

де $|0_1\rangle, |1_1\rangle, |0_2\rangle, |1_2\rangle$ – базисні стани першого та другого кубіта відповідно, $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2$ – комплексні числа. Як і раніше, у разі однокубітної системи, ймовірність виявити m -й кубіт ($m = 1, 2$) у стані $|0_m\rangle$ дорівнює $|\alpha_m|^2$, а ймовірність виявити його в стані $|1_m\rangle$ дорівнює $|\beta_m|^2$. Сума цих ймовірностей дорівнює одиниці:

$$|\alpha_m|^2 + |\beta_m|^2 = 1. \quad (3.41)$$

Поряд з вектором $|\psi_m\rangle$, введемо ермітово-спряжений вектор $\langle\psi_m| \equiv |\psi_m\rangle^+$. Тоді, скалярний добуток двох векторів $|\psi_m\rangle$ і $|\tilde{\psi}_m\rangle$ запишемо у вигляді $\langle\psi_m|\tilde{\psi}_m\rangle$. Будемо вважати основні стани $|0_m\rangle$ і $|1_m\rangle$ ортонормованими:

$$\langle 0_m|0_m\rangle = 1, \langle 1_m|1_m\rangle = 1, \langle 0_m|1_m\rangle = 0, \langle 1_m|0_m\rangle = 0. \quad (3.42)$$

Тоді з умови нормування хвильового вектора m -го кубіта $\langle\psi_m|\psi_m\rangle = 1$ відразу випливає вимога (3.41) для коефіцієнтів α_m і β_m . Відзначимо, що кубіти $|\psi_m\rangle$ і $|\tilde{\psi}_m\rangle$ (а також і відповідні базисні вектори $|0_1\rangle, |1_1\rangle, |0_2\rangle, |1_2\rangle$) відносяться до різних векторних просторів – назвемо їх H_1 і H_2 :

$$|\psi_1\rangle \in H_1, \quad |\psi_2\rangle \in H_2.$$

Побудуємо векторний простір, елементами якого є пари векторів, перший з яких належить простору H_1 , а другий – простору H_2 .



Такий простір називається тензорним добутком просторів H_1 і H_2 .

Він позначається $H_1 \otimes H_2$. Елементи його позначимо

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle.$$

Нехай у квантовому комп'ютері використовується реєстр із n – кубітів. Тоді такий реєстр кубітів знаходиться в просторі який є тензорним добутком відповідних просторів для кожного кубіта $H_1 \otimes H_2 \otimes H_3 \otimes \dots \otimes H_n$. В цьому випадку базисом такого простору буде $|i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes |i_3\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle$, де як і в попередніх випадках і дорівнює 0 або 1. Для векторів такого простору позначення Дірака допускають ще одне спрощення: вектори виду $|i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes |i_3\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle$ можна записувати як $|i_1\rangle |i_2\rangle |i_3\rangle \dots |i_n\rangle$ або навіть $|i_1 i_2 i_3 \dots i_n\rangle$. Тобто можна не ставити знак тензорного добутку в конструкцію $|\rangle$, якщо це не заважає читанню і не створює плутанину в розумінні, щодо якого простору відноситься (оскільки знак тензорного добутку не комутативний). В деяких випадках індекси в добутках розділяють комами $|i_1, i_2, i_3, \dots, i_n\rangle$.

Результатом тензорного добутку двох матриць A та B є блочна матриця, яка обчислюється за наступним правилом:

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11} & \vdots & a_{12} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{21} & \vdots & a_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{11}b_{13} & \vdots & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} & a_{12}b_{13} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{11}b_{23} & \vdots & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} & a_{12}b_{23} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{21}b_{13} & \vdots & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} & a_{22}b_{13} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{21}b_{23} & \vdots & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} & a_{22}b_{23} \end{pmatrix}.$$

Із сказаного вище зрозуміло, що базисні вектори тензорного простору – це тензорні добутки базисних векторів з просторів H_1 і H_2 :



$$\begin{aligned}
 |0\rangle \otimes |0\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |00\rangle, & |0\rangle \otimes |1\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |01\rangle, \\
 |1\rangle \otimes |0\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |10\rangle, & |1\rangle \otimes |1\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |11\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{3.43}$$

Ми будемо говорити, що двокубітна система знаходиться в стані $|00\rangle$, якщо її перший кубіт знаходиться в стані $|0_1\rangle$, а другий кубіт – в стані $|0_2\rangle$ і т.д. Спряжені вектори в тензорному добутку просторів є тензорним добутком спряжених векторів з просторів співмножників:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle. \tag{3.44}$$

Скалярний добуток визначається покомпонентно. Нехай

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle, \quad |\tilde{\psi}\rangle = |\tilde{\psi}_1\rangle \otimes |\tilde{\psi}_2\rangle.$$

Тоді скалярний добуток цих векторів в $H_1 \otimes H_2$ визначається як

$$\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle_{H_1 \otimes H_2} = \langle \psi_1 | \tilde{\psi}_1 \rangle_{H_1} \langle \psi_2 | \tilde{\psi}_2 \rangle_{H_2}. \tag{3.45}$$

Відповідно до (3.45), базисні вектора тензорного добутку просторів є ортонормованими:

$$\langle ij | mn \rangle = \langle i | m \rangle \langle j | n \rangle = \delta_{im} \delta_{jn}.$$

Розкладемо двокубітний стан за базисними векторами:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = (\alpha_1|0_1\rangle + \beta_1|1_1\rangle) \otimes (\alpha_2|0_2\rangle + \beta_2|1_2\rangle),$$

$$|\psi\rangle = \alpha_1\alpha_2|0_1\rangle|0_2\rangle + \alpha_1\beta_2|0_1\rangle|1_2\rangle + \beta_1\alpha_2|1_1\rangle|0_2\rangle + \beta_1\beta_2|1_1\rangle|1_2\rangle.$$

Остаточно

$$|\psi\rangle = \gamma_{00}|00\rangle + \gamma_{01}|01\rangle + \gamma_{10}|10\rangle + \gamma_{11}|11\rangle, \tag{3.46}$$

де $\gamma_{mn} = \langle mn | \psi \rangle$.



Як і у випадку одного кубіта, $|\gamma_{mn}|^2$ дорівнює ймовірності знайти двокубітну систему в стані $|mn\rangle$. Сума таких ймовірностей повинна дорівнювати одиниці:

$$|\gamma_{00}|^2 + |\gamma_{01}|^2 + |\gamma_{10}|^2 + |\gamma_{11}|^2 = 1 \quad (3.47)$$

Це твердження також випливає з нормування вектора $|\psi\rangle$:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

З (3.47) випливає, що система двох кубітів описується вектором одиничної довжини. У чотиривимірному комплексному просторі коефіцієнтів кінець вектора $|\psi\rangle$ лежить на одиничній сфері (3.46). Однак багатовимірність простору коефіцієнтів не дозволяють використовувати цю обставину для наочного представлення стану двох кубітів, за аналогією зі сферою Блоха. Оператори, визначені в H_1 і H_2 , діють в тензорному добутку просторів $H_1 \otimes H_2$ покомпонентно:

$$(\hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2)(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle) = (\hat{U}_1|\psi_1\rangle) \otimes (\hat{U}_2|\psi_2\rangle).$$

Дія однокубітного гейта n разів на вектор зводиться до тензорного множення n разів матриці перетворень на вектор. Нехай в регістрі квантового комп'ютера знаходиться n кубітів в стані ініціалізації. Для прикладу здійснимо перетворення Адамара над всіма кубітами регістра. Згідно 3.39:

$$\begin{aligned} & \hat{H}_n \otimes \hat{H}_{n-1} \otimes \dots \otimes \hat{H}_1 |0_1 0_2 \dots 0_n\rangle = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0\rangle_1 + |1\rangle_1) (|0\rangle_2 + |1\rangle_2) \dots (|0\rangle_n + |1\rangle_n) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle = |\tilde{\psi}\rangle. \end{aligned}$$

В результаті система перейде в стан суперпозиції з 2^n базисних станів з амплітудою $\frac{1}{\sqrt{2^n}}$. Кожний базисний стан є двійкове число



$$- \{|00\dots 000\rangle, |00\dots 001\rangle, |00\dots 010\rangle, |00\dots 011\rangle \dots |11\dots 111\rangle\}.$$

1. Гейт CNOT

Найважливішим двокубітним оператором в теорії квантового комп'ютера є CNOT, або керований NOT. Розглянемо базис тензорного добутку просторів $H_1 \otimes H_2$ (3.34)

$$|mn\rangle = |m\rangle \otimes |n\rangle,$$

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

У цьому базисі матриця оператора CNOT має вигляд:

$$U_{CN} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

Матрицю (3.48) можна отримати за допомогою операцій з базисними векторами. Skorиставшись (3.44), отримаємо:

$$\begin{aligned} CNOT &= |0\rangle \otimes \langle 0| \otimes I + |1\rangle \otimes \langle 1| \otimes X = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$



Розглянемо дію матриці CNOT на базисні вектори:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

або

$$\begin{aligned} U_{CN}|00\rangle &= |00\rangle, & U_{CN}|01\rangle &= |01\rangle, \\ U_{CN}|10\rangle &= |11\rangle, & U_{CN}|11\rangle &= |10\rangle. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Таким чином, якщо перший кубіт знаходиться в стані $|0\rangle$, а другий кубіт знаходиться в одному з базисних станів $|0\rangle$ або $|1\rangle$, то під дією оператора CNOT стан такої двохбітної системи не змінюється. Якщо ж перший кубіт знаходиться в стані $|1\rangle$, а другий – в одному з базисних станів, то оператор CNOT переводить другий кубіт в інший базисний стан. Стан ж першого кубіта не змінюється:

$$\begin{aligned} U_{CN}|0\rangle \otimes |0\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle, & U_{CN}|0\rangle \otimes |1\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle, \\ U_{CN}|1\rangle \otimes |0\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle, & U_{CN}|1\rangle \otimes |1\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Будемо зображувати оператор CNOT у вигляді квантової схеми

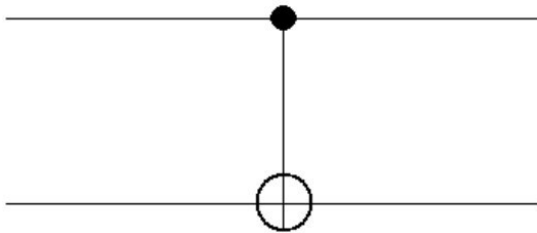


Рис. 3.6. Квантова схема, що зображає оператор CNOT



По двох провідниках, зліва направо, до схеми підводяться два кубіта. По двох правим провідникам, від схеми відводяться два кубіта – результат дії схеми. На рис. 3.7 – 3.10 показано дію схеми на базисні двокубітні стани, відповідно до (3.50).

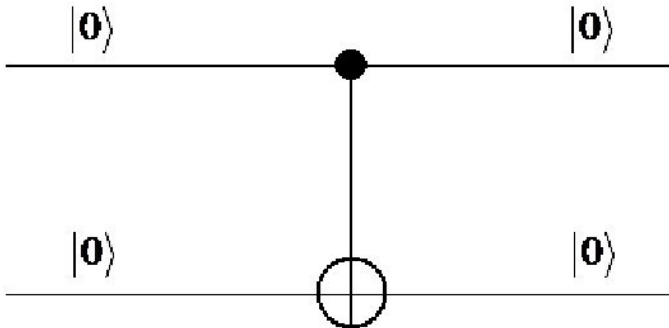


Рис. 3.7. Дія CNOT на базисний стан $U_{CN}|0\rangle \otimes |0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$

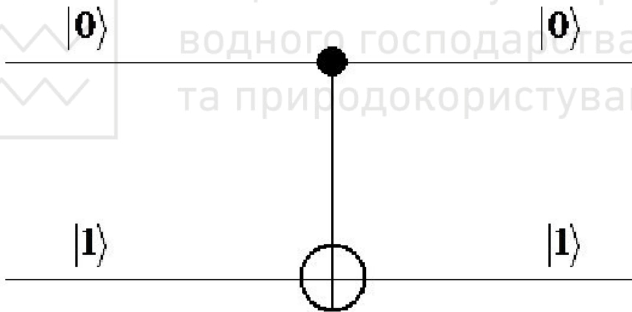


Рис. 3.8. Дія CNOT на базисний стан $U_{CN}|0\rangle \otimes |1\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$

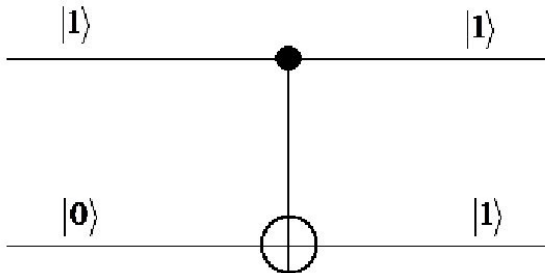


Рис. 3.9. Дія CNOT на базисний стан $U_{CN}|1\rangle \otimes |0\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle$

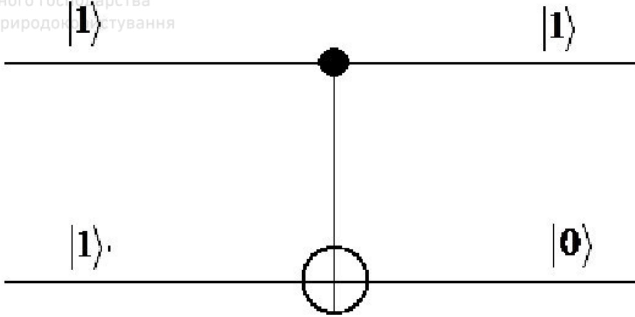


Рис. 3.10. Дія CNOT на базисний стан $U_{CN}|1\rangle \otimes |1\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle$

Відзначимо, що діючи на базисний стан, квантовий оператор поводить себе як класичний. Для CNOT класичним прототипом є оператор XOR. На вхід класичного оператора XOR надходять два біти – керуючий і керований. Якщо керуючий біт знаходиться в стані $|0\rangle$, то керований біт не змінюється. Якщо керуючий біт знаходиться в стані $|1\rangle$, то керований біт змінюється на протилежний: $|0\rangle$ перетворюється в $|1\rangle$, а $|1\rangle$ в $|0\rangle$. Керуючий біт у всіх випадках залишається незмінним. Таке перетворення можна представити у вигляді класичної схеми – див. рис. 3.11.

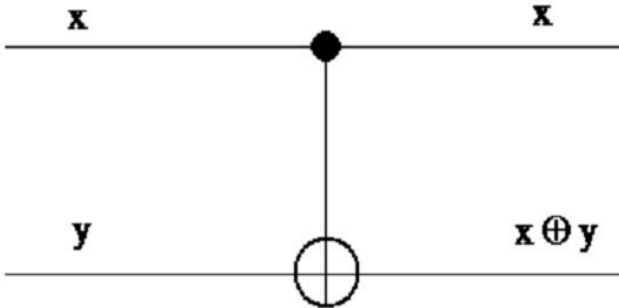


Рис. 3.11. Класичний елемент XOR

На вхід схеми подаються два біти x і y . На виході ми отримуємо незмінний керуючий біт x , керований ж біт перетвориться в $x \otimes y$ – тобто в суму по модулю 2 керуючого і керованого біта. Ця сума працює так:



$$0 \otimes 0 = 0, 0 \otimes 1 = 1, 1 \otimes 0 = 1, 1 \otimes 1 = 0. \quad (3.51)$$

Порівнюючи (3.51) з (3.50) бачимо, що квантовий елемент CNOT дійсно є узагальненням класичного елемента XOR. На базисних векторах CNOT поводить ся так само, як XOR.

Розглянемо двокубітний стан, в якому перший – керуючий кубіт, знаходиться в стані $|0_1\rangle$, а другий – керований кубіт – в довільному стані $\alpha|0_2\rangle + \beta|1_2\rangle$. Вектор, що описує такий стан, має вигляд:

$$|\psi\rangle = |0_1\rangle \otimes (\alpha|0_2\rangle + \beta|1_2\rangle) = \alpha|0_1\rangle \otimes |0_2\rangle + \beta|0_1\rangle \otimes |1_2\rangle,$$

або

$$|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + 0|10\rangle + 0|11\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Діючи оператором CNOT на такий вектор стану, отримуємо

$$|\tilde{\psi}\rangle = U_{CN}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|\tilde{\psi}\rangle = |0_1\rangle \otimes (\alpha|0_2\rangle + \beta|1_2\rangle) = |\psi\rangle.$$

Таким чином, якщо керуючий кубіт дорівнює $|0_1\rangle$, то який би не був керований кубіт, він залишається незмінним (разом з керованим кубітом) під дією оператора CNOT.

Розглянемо тепер двокубітний стан, в якому перший – керуючий кубіт, знаходиться в стані $|1_1\rangle$, а другий – керований кубіт – в довільному стані $\alpha|0_2\rangle + \beta|1_2\rangle$. Вектор, що описує такий стан, має вигляд:

$$|\psi\rangle = |1_1\rangle \otimes (\alpha|0_2\rangle + \beta|1_2\rangle) = \alpha|1_1\rangle \otimes |0_2\rangle + \beta|1_1\rangle \otimes |1_2\rangle,$$

або



$$|\psi\rangle = 0|00\rangle + 0|01\rangle + \alpha|10\rangle + \beta|11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Діючи оператором CNOT на такий вектор стану, отримуємо

$$|\tilde{\psi}\rangle = U_{CN}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \beta \\ \alpha \end{pmatrix},$$

$$|\tilde{\psi}\rangle = |1_1\rangle \otimes (\beta|0_2\rangle + \alpha|1_2\rangle) = |\psi\rangle.$$

Таким чином, якщо керуючий кубіт дорівнює $|1_1\rangle$, то дія оператора CNOT на керований кубіт еквівалентно дії оператора NOT. Саме ця властивість дозволяє називати розглянутий оператор керованим оператором NOT.

Отже, коротко можна записати результат дії гейта CNOT у вигляді:

$$\begin{aligned} |00\rangle &\xrightarrow{\text{CNOT}} |00\rangle \\ |01\rangle &\xrightarrow{\text{CNOT}} |01\rangle \\ |10\rangle &\xrightarrow{\text{CNOT}} |11\rangle \\ |11\rangle &\xrightarrow{\text{CNOT}} |10\rangle. \end{aligned} \quad (3.52)$$

За допомогою гейтів Адамара та CNOT можна робити сплетення кубітів. Наприклад, нехай в початковий момент часу двокубітна система знаходилась в базисних станах $|0\rangle$. Тоді загальна хвильова функція запишеться як добуток станів двох кубітів:

$$|\Psi^{\text{почат}}\rangle = |0_1\rangle|0_2\rangle. \quad (3.53)$$

Подіємо на перший кубіт гейтом Адамара. Згідно (3.39):

$$|0_1\rangle|0_2\rangle \xrightarrow{H_1} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle + |1_1\rangle)|0_2\rangle. \quad (3.54)$$



А тепер подіємо гейтом CNOT на двокубітну систему:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle + |1_1\rangle)|0_2\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} \frac{1}{2}(|0_1\rangle|0_2\rangle + |1_1\rangle|1_2\rangle) \equiv |\Psi^{\text{кінц}}\rangle. \quad (3.55)$$

Кінцевий стан $|\Psi^{\text{кінц}}\rangle = \frac{1}{2}(|0_1\rangle|0_2\rangle + |1_1\rangle|1_2\rangle)$ сплетений, оскільки не існує таких $\Psi_1 = \alpha_1|0_1\rangle + \beta_1|1_1\rangle$ і $\Psi_2 = \alpha_2|0_2\rangle + \beta_2|1_2\rangle$, щоб можна було подати:

$$|\Psi_{12}^{\text{кінц}}\rangle = |\Psi_1\rangle|\Psi_2\rangle.$$

Дійсно:

$$\begin{aligned} |\Psi_{12}^{\text{кінц}}\rangle &= |\Psi_1\rangle|\Psi_2\rangle = (\alpha_1|0_1\rangle + \beta_1|1_1\rangle)(\alpha_2|0_2\rangle + \beta_2|1_2\rangle) = \\ &= \alpha_1\alpha_2|0_1\rangle|0_2\rangle + \alpha_1\beta_2|0_1\rangle|1_2\rangle + \alpha_2\beta_1|1_1\rangle|0_2\rangle + \beta_1\beta_2|1_1\rangle|1_2\rangle. \end{aligned}$$

Звідси



$$\left\{ \begin{aligned} \alpha_1\alpha_2 &= \beta_1\beta_2 = \frac{1}{2}, \\ \alpha_1\beta_2 &= 0, \\ \beta_1\alpha_2 &= 0 \end{aligned} \right.$$

що не можливо.

3.5. Спроба копіювання невідомого кубіта за допомогою двокубітного квантового елемента CNOT

Покажемо, що класичний елемент CNOT (XOR) можна використовувати для копіювання невідомого біта. Для цього подамо на керуючий вхід невідомий біт x , а на керований вхід подамо 0. Тоді, відповідно до рис. 3.11, керуючий біт не зміниться, а керований перетвориться в $x \otimes 0$. Використовуючи властивості додавання за модулем 2, бачимо, що

$$x \otimes 0 = x.$$

Отже, керуючий біт став дорівнює копії керованого біта (див. рис.3.12).

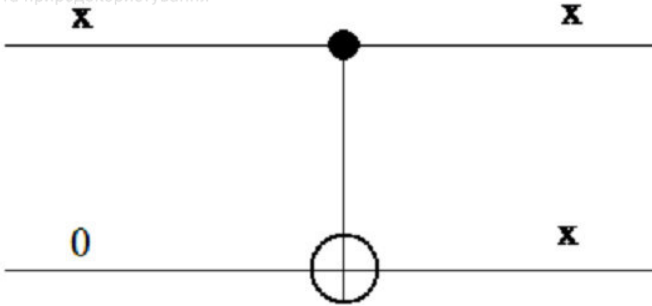


Рис. 3.12. Копіювання невідомого біта за допомогою класичного елемента CNOT

Спробуємо тепер використовувати квантовий оператор CNOT для копіювання кубіта. Для цього на керуючий вхід подамо кубіт

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

а на керований вхід подамо нульовий базисний вектор $|0\rangle$. Розрахуємо вхідний двокубітний стан:

$$|\psi\rangle = (\alpha|0_1\rangle + \beta|1_1\rangle) \otimes |0_2\rangle,$$

або

$$|\psi\rangle = \alpha|0_1\rangle \otimes |0_2\rangle + \beta|1_1\rangle \otimes |0_2\rangle = \alpha|00\rangle + 0|01\rangle + \beta|10\rangle + 0|11\rangle.$$

Таким чином, в базисі (3.43), вхідний вектор може бути представлений у вигляді стовпця коефіцієнтів

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ \beta \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Тоді вихідний вектор $|\tilde{\psi}\rangle = U_{CN}|\psi\rangle$

$$|\tilde{\psi}\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ \beta \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ 0 \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (3.56)$$

Для того, щоб CNOT копіював кубіт, на виході у нього повинно



було б бути дві копії вхідного кубіта. Тоді двокубітний вихідний стан мав би вигляд:

$$|\tilde{\psi}\rangle = (\alpha|0_1\rangle + \beta|1_1\rangle) \otimes (\alpha|0_2\rangle + \beta|1_2\rangle),$$

або

$$|\tilde{\psi}\rangle = \alpha^2|0_1\rangle \otimes |0_2\rangle + \alpha\beta|0_1\rangle \otimes |1_2\rangle + \alpha\beta|1_1\rangle \otimes |0_2\rangle + \beta^2|1_1\rangle \otimes |1_2\rangle,$$

$$|\tilde{\psi}\rangle = \alpha^2|00\rangle + \alpha\beta|01\rangle + \alpha\beta|10\rangle + \beta^2|11\rangle.$$

Подамо $|\tilde{\psi}\rangle$ у векторній формі

$$|\tilde{\psi}\rangle = \begin{pmatrix} \alpha^2 \\ \alpha\beta \\ \alpha\beta \\ \beta^2 \end{pmatrix}. \quad (3.57)$$

Прирівнюючи (3.56) і (3.57), отримуємо умови копіювання кубіта у вигляді системи рівнянь

$$\begin{cases} \alpha^2 = \alpha, \\ \alpha\beta = 0, \\ \beta^2 = \beta. \end{cases} \quad (3.58)$$

У системи (3.58) є три можливі розв'язки –

- 1) $\alpha = 0, \beta = 0,$
 - 2) $\alpha = 1, \beta = 0,$
 - 3) $\alpha = 0, \beta = 1.$
- (3.59)

Таким чином, на відміну від біта копіювання кубіта, в загальному вигляді, за допомогою оператора CNOT неможливе. Отримані випадки (3.59), в яких копіювання можливе, відповідають класичним станам. Неможливість копіювання (як кажуть, клонування) невідомого кубіта доведена для довільного унітарного оператора. Як уже зазначалося вище, багаторазове копіювання кубіта (якби воно було можливим) дозволило б отримати з одного кубіта як завгодно багато інформації за допомогою багаторазових вимірювань стану



Доказ неможливості клонування кубітів вперше було отримано Вуттерсом і Зуреком [Wootters і Zurek]. Цілком очевидно, що клонування неможливе і при використанні вимірювання, оскільки воно є імовірнісним і деструктивне для станів, які не є базисними векторами вимірювального пристрою.

Вкрай важливо зрозуміти, який вид клонування допускається, а який ні. Клонувати невідомого квантового стану неможливе. Проте відомий квантовий стан в принципі можна клонувати. Привести n частинок в заплутаний стан $\alpha|00 \dots 0\rangle + \beta|11 \dots 1\rangle$ з невідомих станів цілком можливо. Кожна з цих частинок буде вести себе однаково при вимірюванні в стандартному базисі ($|00 \dots 0\rangle, |00 \dots 01\rangle, \dots, |11 \dots 1\rangle$), чого не можна було б сказати, якби вимірювання проводилися в якомусь іншому базисі.

3.6. Кубіт в гільбертовому векторному просторі станів

Вище наведені приклади вибору двох ортонормованих станів різних квантових систем в якості базисних станів $|0\rangle$ і $|1\rangle$ кубіта. За цим базисом можна розкласти будь-який стан $|\Psi\rangle$ кубіта згідно (3.1):

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (3.60)$$

Стан (3.60) виражає принцип суперпозиції квантової механіки як лінійної теорії: якщо стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ є розв'язками рівняння Шредінгера для системи, то будь-яка суперпозиція цих розв'язків також є розв'язком рівняння.

Сукупність векторів станів $|\Psi\rangle$ утворює двовимірний векторний гільбертів простір кубіта. Компоненти двовимірних векторів $|0\rangle, |1\rangle, |\Psi\rangle$ записуються у вигляді стовпців:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\Psi\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ є ортами в двовимірному Гільбертовому просторі



кубіта. Проекції $|\Psi\rangle$ на орти дорівнюють амплітудам α і β в суперпозиції:

$$\langle 0|\Psi\rangle = \alpha, \quad \langle 1|\Psi\rangle = \beta.$$

В загальному випадку як показано в розділі 3.1 амплітуди α і β є комплексними числами:

$$\alpha = |\alpha| \exp(i\varphi_\alpha), \quad \beta = |\beta| \exp(i\varphi_\beta).$$

Тоді,

$$|\Psi\rangle = \exp(i\varphi_\alpha) [|\alpha| |0\rangle + |\beta| \exp(i(\varphi_\beta - \varphi_\alpha)) |1\rangle].$$

Загальний фазовий множник $\exp(i\varphi_\alpha)$ не впливає на результати вимірювань стану кубіта, і фаза φ_α може мати довільне значення. Звідси випливає, що вектор $|\Psi\rangle$ визначається двома дійсними параметрами, наприклад $|\alpha|$ і $(\varphi_\alpha - \varphi_\beta)$. Значення $|\alpha|^2$ і $|\beta|^2 = 1 - |\alpha|^2$ визначаються шляхом багаторазового вимірювання в базисі $|0\rangle$, $|1\rangle$ кубітів із ансамблю, приготованого в стані $|\Psi\rangle$, як ймовірності результатів вимірювань:

$$p(|0\rangle) = |\alpha|^2, \quad p(|1\rangle) = |\beta|^2.$$

Різниця фаз $(\varphi_\alpha - \varphi_\beta)$ амплітуд може бути визначена із експериментів інтерференційного типу (див. нижче).

Перетворення вектора

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

на вектор

$$|\Psi'\rangle = \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix}$$

є однокубітними квантовими операціями в квантових обчисленнях. Геометрично таке перетворення є обертанням вектора

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$



$$|\Psi'\rangle = \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix}$$

Оператор обертання \hat{U} в матричному представленні є унітарною матрицею другого порядку 2×2 :

$$\begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Із загального виду матриці

$$U = \begin{pmatrix} c \exp(-ia) & -t \exp(ib) \\ t \exp(-ib) & c \exp(ia) \end{pmatrix},$$

де c, t, a, b – дійсні числа, впливає її унітарність, якщо $c^2 + t^2 = 1$.

Обертання вектора в просторі Гільберта неперервне: при своєму обертанні на скінчений кут вектор $|\Psi\rangle$ проходить через неперервну послідовність проміжних положень. Матриця повороту на скінчений кут – це впорядкований добуток матриць поворотів на нескінченно малі кути [21]. Неперервність переходів є принциповою відмінністю квантової механіки, покладеною в основу її аксіоматичного формулювання [22].

Кубіт «живе» одночасно в абстрактному двовимірному векторному просторі Гільберта і в тривимірному просторі Евкліда [5]. (Аналогічне твердження справедливе й щодо квантового комп'ютера як сукупності кубітів). Обчислювальні операції здійснюються в гільбертовому просторі як перетворення вектора стану:

$$|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle.$$

Одночасно, фізичні процеси в квантовій системі, обраної в якості кубіта, описуються в тривимірному евклідовому просторі. Ми повинні вміти виконувати фізичні операції в лабораторній системі координат $OXYZ$, що призводять до необхідного перетворенню U вектора стану кубіта в гільбертовому просторі. Цю задачу розв'язує наступне твердження [21]:

Матриця довільного унітарного перетворення кубіта U в гільбертовому просторі може бути представлена як добуток трьох матриць, що описують обертання вектора стану:



$$U = \exp(i\tilde{\alpha})\mathbf{R}_n(\tilde{\beta})\mathbf{R}_m(\tilde{\gamma})\mathbf{R}_n(\tilde{\delta}),$$

де \mathbf{n}, \mathbf{m} – два непаралельних одиничних вектора в системі координат $OXYZ$, а $\mathbf{R}_n(\theta)$ – матриця (оператор) обертання навколо вектора \mathbf{n} на кут θ . В умовах реального експерименту вектори \vec{n}, \vec{m} зручно поєднати з осями системи координат $OXYZ$. Тоді можливі zy - і xy -розклади [21]:

$$\begin{aligned} U &= \exp(i\tilde{\alpha})\mathbf{R}_z(\tilde{\beta})\mathbf{R}_y(\tilde{\gamma})\mathbf{R}_z(\tilde{\delta}) \quad (zy - \text{розклад}), \\ U &= \exp(i\tilde{\alpha})\mathbf{R}_x(\tilde{\beta})\mathbf{R}_y(\tilde{\gamma})\mathbf{R}_x(\tilde{\delta}) \quad (xy - \text{розклад}). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Матриці обертань навколо осей x, y, z мають вигляд [21]

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_x(\theta) &= \begin{pmatrix} c & -is \\ -is & c \end{pmatrix}, \\ \mathbf{R}_y(\theta) &= \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix}, \\ \mathbf{R}_z(\theta) &= \begin{pmatrix} c + is & 0 \\ 0 & c - is \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.63)$$

де $c = \cos(\theta/2)$, $s = \sin(\theta/2)$. Підставляючи в zy -розклад матриці обертань $\mathbf{R}_y, \mathbf{R}_z$ і перемноживши ці матриці, отримуємо

$$U = \exp(i\tilde{\alpha}) \begin{pmatrix} \cos \frac{\tilde{\gamma}}{2} \exp\left(-i \frac{\tilde{\beta} + \tilde{\delta}}{2}\right) & -\sin \frac{\tilde{\gamma}}{2} \exp\left(-i \frac{\tilde{\beta} - \tilde{\delta}}{2}\right) \\ \sin \frac{\tilde{\gamma}}{2} \exp\left(i \frac{\tilde{\beta} - \tilde{\delta}}{2}\right) & \cos \frac{\tilde{\gamma}}{2} \exp\left(i \frac{\tilde{\beta} + \tilde{\delta}}{2}\right) \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Якщо задати перетворення U в гільбертовому просторі матрицею

$$U = \exp(i\tilde{\alpha}) \begin{pmatrix} \alpha \exp(-iu) & -\beta \exp(iv) \\ \beta \exp(-iv) & \alpha \exp(iu) \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

і вимагати тотожності матриць (3.64) і (3.65),

$$\alpha = \cos \frac{\tilde{\gamma}}{2}, \quad \beta = \sin \frac{\tilde{\gamma}}{2}, \quad \tilde{\delta} = \frac{u+v}{2}, \quad \tilde{\beta} = \frac{u-v}{2}. \quad (3.66)$$



Таким чином, довільне перетворення вектора стану кубіта з параметрами згідно (3.65) може бути виконане як послідовні обертання цього вектора навколо осей x, y, z лабораторної системи координат на кути $\tilde{\delta}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}$ згідно (3.66).

Обертання $\mathbf{R}_x(\theta), \mathbf{R}_y(\theta), \mathbf{R}_z(\theta)$ вектора стану $|\Psi\rangle$ кубіта розглядаються як елементарні однокубітні обчислювальні операції. Їх необхідно пов'язати з параметрами фізичних полів, керуючих динамікою квантової системи, обраної в якості кубіта. Наприклад, у випадку кубіта - спина $I = 1/2$ обертання його вектора стану в магнітному полі

$$\vec{B} = B_0 \vec{n}_z + B_1 \vec{n}_x \cos(\omega t)$$

($\tilde{\gamma} B_0 \equiv \omega_0, \tilde{\gamma} B_1 = \Omega$) описується рівнянням [15]

$$|\Psi(\vec{r}, t)\rangle = \exp\left[i\left(\frac{\omega - \omega_0}{2} \sigma_z + \Omega \sigma_x\right)t\right] |\Psi(\vec{r}, 0)\rangle. \quad (3.67)$$

Тут σ_x, σ_z - матриці Паулі, \vec{n}_x, \vec{n}_z орти вздовж осей OX, OZ , системи координат $OXYZ$.

Рівняння (3.67) відповідає обертанню $|\Psi\rangle$ навколо осі, заданої вектором \vec{n} :

$$\vec{n} = \frac{\vec{n}_z + \lambda \vec{n}_x}{(1 + \lambda^2)^{1/2}}$$

Цей поворот здійснюється на кут

$$\theta = \Omega t \left(1 + \frac{1}{\lambda^2}\right)^{1/2}, \quad \lambda = \frac{2\Omega}{\omega_0 - \omega}.$$

При точному резонансі ($\omega = \omega_0$) вісь обертання \vec{n} вектора $|\Psi\rangle$ збігається з віссю OX , а кутова швидкість обертання, з так званою частотою Рабі Ω :

$$\vec{n} = \vec{n}_x, \theta = \Omega t.$$

В якості стандартних однокубітних операцій в квантових обчисленнях часто використовують перетворення вектора стану, які виражаються матрицями Паулі ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$):



$$\begin{aligned}\mathbf{R}_x(\pi) &\equiv X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x, \\ \mathbf{R}_y(\pi) &\equiv Y = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, (\sigma_y = iY) \\ \mathbf{R}_z(\pi) &\equiv Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z.\end{aligned}\quad (3.68)$$

Матриця перетворення із зміною фази вектора стану (фазовий вентиль, фазовий гейт) має вигляд

$$U(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\varphi) \end{pmatrix}, \quad (3.69)$$

а матриця перетворення Адамара

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (X + Z). \quad (3.70)$$

Легко перевірити, що

$$X \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = NOT \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad Z \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix},$$

$$U(\varphi) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \exp(i\varphi) \end{pmatrix},$$

$$H|0\rangle = H \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle),$$

$$H|1\rangle = H \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle).$$

З точністю до загального фазового множника $X = NOT = \mathbf{R}_x(\pi)$: операція заперечення НЕ (NOT) виконується обертанням (поворотом) вектора стану кубіта навколо осі x на кут π .

Згідно визначення скалярного добутку векторів

$$|\psi_i\rangle = \alpha_i|0\rangle + \beta_i|1\rangle \text{ і } |\psi_j\rangle = \alpha_j|0\rangle + \beta_j|1\rangle:$$

$$\langle \psi_j | \psi_i \rangle = \alpha_j^* \alpha_i + \beta_j^* \beta_i.$$



Геометрично він визначає «кут» θ між векторами:

$$\cos \theta = \langle \psi_j | \psi_i \rangle.$$

Стан кубіта $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ може бути відображений в точку на поверхні тривимірної одиничної сфери Блоха в евклідовому просторі. Сферичні координати $\tilde{\theta}, \tilde{\varphi}$ точки на поверхні сфери пов'язані з амплітудами α, β видання рівностями

$$\cos \frac{\tilde{\theta}}{2} = \alpha, \quad \exp(i\tilde{\varphi}) \sin \frac{\tilde{\theta}}{2} = \beta$$

(амплітуду α можна вважати дійсним числом зважаючи на неспотережуваність загальної фази). Така взаємно однозначна відповідність означає ізоморфізм груп обертань у двовимірному гільбертовому та тривимірному евклідовому просторах.





Розділ 4. Фізичні основи реалізації квантового комп'ютера

Основні роботи над апаратним забезпеченням квантового комп'ютера просуваються в наступних напрямках:

1. Створення квантового процесора;
2. Створення пристроїв для зберігання квантової інформації (квантова пам'ять);
3. Розробка квантової шини для обміну інформацією.

Слід відзначити, що це лише аналоги відповідних пристроїв класичного комп'ютера, які істотно від них відрізнятимуться.

4.1. Квантовий процесор

Найбільші зусилля і технічні засоби в даний час направлені на створення квантового процесора. Ведуться роботи над наступними основними варіантами фізичної основи квантового процесора:

1. Використання в якості квантового процесора *посудини з органічною рідиною* [23], де кубітами є ядра окремих атомів зі спінами $1/2$, пов'язаних непрямыми спін-спіновими взаємодіями (наприклад, розчин хлороформу $^{13}\text{CHCl}_3$ в дейтерієвому ацетоні $(\text{CD}_3)_2\text{CO}$ або 2,3-дибромотиофен $\text{SCH}:(\text{CBr})_2:\text{CH}$. Оскільки кубіти реалізуються на ядрах, то це є мікроскопічною реалізацією кубітів.

Всі молекули такої органічної рідини в пробірці поведуться як одна молекула, тобто – однаково. Таким чином, з'являється можливість застосувати до макроскопічних об'ємів рідини відпрацьованих методик і техніки ядерного магнітного резонансу (ЯМР). Індивідуальне звернення до окремих кубітів замінюється зверненням до відповідних кубітів одночасно у всіх молекулах.

В такому квантовому комп'ютері кубітами виступають спіни ядер водню (протонів) і вуглецю ^{13}C в молекулах рідини. Так, в молекулі трихлоретилену спіни ядер двох атомів ^{13}C і одного протона утворюють три кубіта (див. рис. 4.1).

Два атома ^{13}C (на рис. 4.1 А і В) хімічно нееквівалентні і тому мають різні частоти ядерного магнітного резонансу ω_A і ω_B в заданому зовнішньому постійному магнітному полі B_0 . Протон (^1H) в цьому полі буде мати третю резонансну частоту ω_C . Подаючи імпульси зовнішнього змінного магнітного поля на одній з цих частот можна селективно керувати квантовою еволюцією будь-якого з цих



спінів (виконуються однокубітні гейти). Між спінами ядер, розділених одним хімічним зв'язком ^1H - ^{13}C і ^{13}C - ^{13}C , існує магнітна контактна взаємодія, що дозволяє побудувати двокубітні гейти.

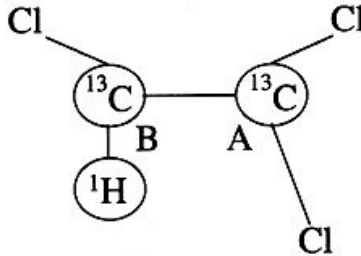


Рис. 4.1. Трьохкубітна молекула трихлоретилену

Гейти над кубітами (за допомогою радіочастотних імпульсів) і виведення результату здійснюється стандартними методами ЯМР. Комп'ютер такого виду отримав назву *ансамблевого квантового комп'ютера* (англ.: *bulk-ensemble quantum computer*). Він може працювати при кімнатній температурі. Час самовільної зміни квантових станів ядер внаслідок взаємодії з навколишнім середовищем у такої системи складає декілька секунд. Цього достатньо для проведення обчислювальних операцій. На даний час реалізовано семикубітний процесор на основі органічних рідин.

Макроскопічно велике число ($\sim 10^{20}$) молекул в пробірці імпульсного ЯМР - спектрометра, запрограмованого на виконання квантового алгоритму на трьохкубітному комп'ютері є ансамблем працюючих паралельно квантових комп'ютерів. «Ансамблеві» комп'ютери в даній ситуації дозволяють розв'язувати складні проблеми ініціалізації комп'ютера (тобто приведення всіх кубітів в стан $|0\rangle$ перед обчисленнями) і вимірювати стани кубітів після завершення процесу обчислень. Стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ деякого кубіта в кінцевому стані визначаються шляхом спостереження знака (фази) лінії резонансного поглинання: у разі $|0\rangle$ спостерігається, наприклад, лінія поглинання, а при $|1\rangle$ – випромінювання.

На даний час на спінових дво- та трьохкубітних ансамблевих квантових комп'ютерах виконано модельний квантовий алгоритм Дойча - Іозса для визначення типу дискретної функції від дискрет-



ного аргументу [24], алгоритму Гровера пошуку в базі даних [25], алгоритму з квантової корекцією помилок [26].

Переваги. До переваг мікроскопічних кубітів відносяться ідентичність кубітів, можливість хорошої ізоляції від зовнішнього оточення (низький рівень декогеренції). У той же час інтеграція великого числа кубітів, а також реалізація 4 і 5 критеріїв ДіВінченцо є дуже складним завданням.

Недоліки. Потенціал квантового процесора в «пробірці» практично вичерпаний, оскільки вимірюваний на виході сигнал експоненціально зменшується із зростанням числа кубітів (гранична кількість – 10-13 кубітів).

Фізичні обмеження такого комп'ютера полягають в наступному: непряма спін-спінова взаємодія, яка необхідна для організації основних логічних операцій, сама по собі дуже слабка. В результаті час виконання логічних операцій виявляється надзвичайно великим, а створюваний комп'ютер має невелику швидкодію [27].

В цьому випадку перспективнішими виявляються твердотільні квантові комп'ютери на основі ядерного магнітного резонансу (ЯМР). Молекула такого комп'ютера (5 атомів фтору і 2 атомів вуглецю) показана на рис. 4.2, а його технічна реалізація на рис. 4.3. Ця молекула синтезована на фірмі ІВМ і працює як 7 - кубітний регістр. Атоми можуть знаходитись в станах «спін вверх» і «спін вниз». Управління спінами здійснюється за допомогою радіочастотних імпульсів. На такому процесорі успішно реалізований алгоритм Шора для факторизації числа 15 ($15 = 3 \times 5$).

Твердотільний ЯМР квантовий комп'ютер має ряд важливих переваг [23]:

- Ядерні спіни самі по собі є кубітами.
- При низьких температурах вони характеризуються дуже великими часом релаксації (і відповідно – часом декогеренції) в порівнянні з електронними спінами.
- Технологічні структури нанометрового масштабу в напівпровідникових ЯМР - квантових комп'ютерах призначені не для створення самих кубітів, як у випадку надпровідникових пристроїв, а лише для завдань управління кубітами і вимірювання їх станів.
- Диполь-дипольна взаємодія ядерних спінів в декілька тисяч разів сильніша за непряму спін-спінову взаємодію.

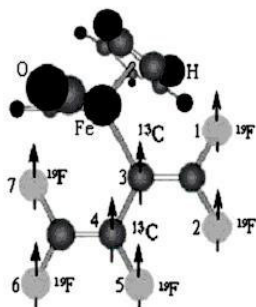


Рис. 4.2 Молекула ЯМР квантового комп'ютера, синтезована на фірмі IBM



Рис. 4.3 ЯМР – спектрометр високої роздільної здатності фірми Bruker, який використовується для виконання багатьох видів квантових операцій на ансамблях органічних молекул

2. Використання в якості кубітів рівнів енергії **іонів, захоплених іонними пастками (пастка Пауля)** в умовах лазерного охолодження пасток (для зменшення амплітуди коливального руху іонів) до температур в декілька мікротемператур (див. рис. 4.4). В пастках Пауля реалізується стан речовини, який називається одноірним іонним кристалом [28]. В них ланцюжок іонів утримується разом зовнішніми статичними і змінними електричними полями від розбігання, зумовленого кулонівським відштовхуванням іонів, на відстані ~ 20 нм один від одного. Взаємодія між зарядженими іонами в одновимірному ланцюжку цих пасток здійснюється за допомогою збудження їх колективного руху, а індивідуальне управління ними — за допомогою пари лазерів інфрачервоного діапазону. Кожен іон локалізований в області набагато меншій, ніж довжина хвилі використовуваного випромінювання. Будь-який імпульс, переданий одному іону лазером, поширюється на весь ланцюжок. Також лазери можуть змінювати просторову орієнтацію спінів іонів, в якій закодовані дані: наприклад, повертаючи спін іона «вгору», ми передаємо йому значення «1», обертаючи його «вниз», ми передаємо «0».

Управління іонами в пастці Пауля може відбуватись, наприклад,

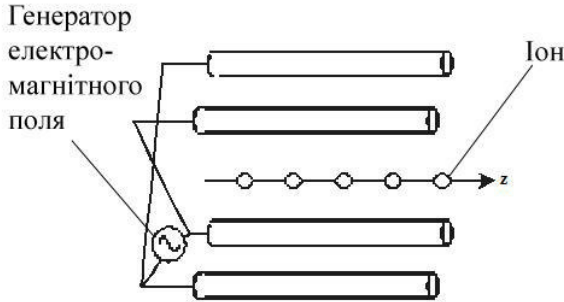


Рис. 4.4. Іонна пастка як квантовий процесор

наступним чином. Якщо положення спіна крайнього іона «вгору», лазер «перемикає» його і приводить в рух весь ланцюжок. Інший лазер «перемикає» іон на іншому кінці ланцюжка тільки в тому випадку, якщо він знаходиться в русі. Потім інший лазер «перемикає» перший іон (і зупиняє рух), якщо він (іон) рухається. Іони на обох кінцях ланцюжка сплетені і можуть утворити логічний елемент у квантових обчисленнях.

Основними недоліками цього типу квантових комп'ютерів є необхідність створення наднизьких температур, забезпечення стійкості станів іонів в ланцюжку, а також обмеженість можливого числа кубітів значенням $N < 40$. Збільшення кількості іонів в ланцюжку до 35-40, є досить складним завданням. Чим довший ланцюжок іонів, тим більш складно його контролювати, оскільки колективні коливання інтерферують, ланцюжки «згортаються» тощо.

На сьогоднішній день встановлений практично повний контроль над квантовим станом одиничного іона в пастці, проводиться експерименти над системи, що складаються з декількох іонів з контрольованими взаємодіями між ними.

Нещодавно [29] було запропоновано модифікувати пастку Пауля таким чином, щоб у ній було лише кілька досить коротких ланцюжків, що взаємодіють один з одним. Наприклад, їх частини або окремі іони могли б переміщатися з «квантового процесора» в «квантову пам'ять» (див. рис. 4.5).

В такій пастці Пауля з великою кількістю кубітів використовується схема «квантового ПЗЗ» (квантовий пристрій з зарядовим зв'язком), архітектура якого містить велику кількість іонних зон, які



перетинаються. Змінюючи напругу в зоні, можна пересувати по ній кілька іонів. На рис. 4.5 показано схему подібного пристрою.

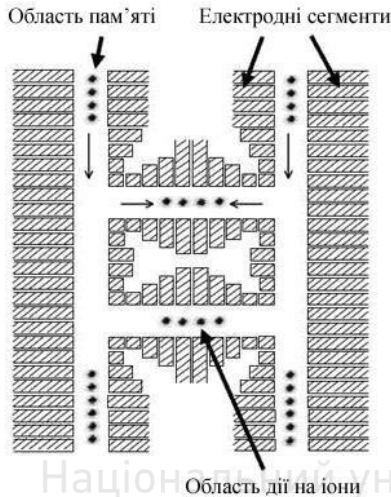


Рис. 4.5. Будова пастки Пауля з рухомими кубітами

Іони в пастках, які несуть квантову інформацію, утримуються в зоні пам'яті. Для виконання гейта пересуваємо вибрані іони в зону перетину шляхом подачі напруги на електродні сегменти. В зоні перетину іони групуються. Лазери фокусуються крізь зону для управління елементом. Після цього іони рухаються знову для виконання наступної операції.

Пастки і транспортні потенціали можна організувати комбінуванням радіочастотних та статичних електричних полів. На рис. 4.5 показані лише електроди, які створюють статичні поля. Варіюючи напруги на цих електродах, можна відправляти іони в певну область пастки або транспортувати їх уздовж цієї області. Два інших шари електродів, за допомогою яких подаються радіочастотні імпульси, розташовуються під і над першими електродами. За допомогою них створюються електричні поля певної форми, які, власне, і створюють можливість стабільного транспортування.

У даній пастці логічні операції можна розділити на два простих кроки [29]:

- Іони-носії квантової інформації розташовуються в певній просторовій комбінації в пастках, доки лазерні промені вимкнені.
- Всі лазери включаються одночасно, після чого окремі кубіти



або їх пари транспортуються крізь лазерні промені для здійснення однокубітних та двокубітних гейтів, а також вимірювань. Нарешті, лазерні промені одночасно вимикаються.

Кроки а) і б) виконуються по чергово, доки обчислення не будуть завершені (див. рис. 4.6).

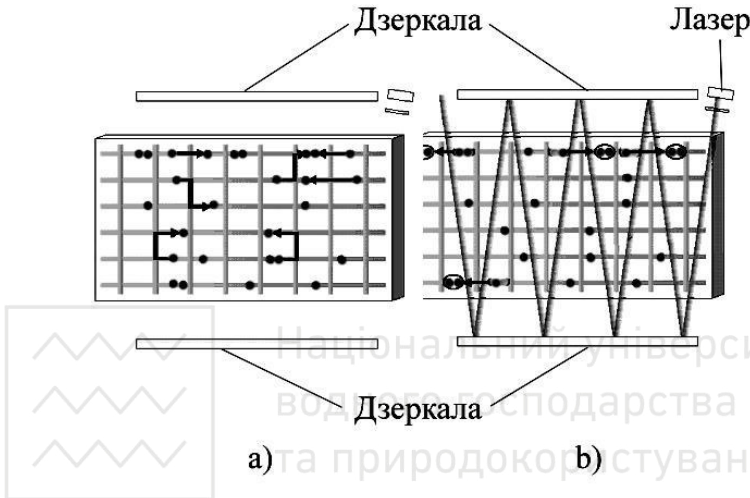


Рис. 4.6. Схема управління рухомими кубітами в пастці Пауля. Стрілками показано рух іонів через зони дії лазерного променя

На даний час реалізована двозонна пастка з електродами на основі GaAs і іонами Cd. Дослідники з компанії NIST реалізували нову схему, в якій іони розташовуються над плоскою поверхнею з електродами. На таких схемах були побудовані моделі з іонами Sr і Mg. Типові зонні відстані в досліджах були наступні: віддаленість від іонів до найближчого електрода становила 150 $\mu\text{м}$, а середній час виконання операції – 200 $\mu\text{с}$.

3. Використання в якості кубітів зарядових станів куперівських пар в квантових точках. Квантові точки містять єдиний додатковий електрон, що і дає можливість зберігати цілі лінійні послідовності з логічних „0” або „1”. На такий електрон захоплений групою атомів, діє лазерний промінь певної частоти. Ця дія переводить електрон в збуджений стан. Збуджений стан можна розглядати як $|1\rangle$, а основний – як $|0\rangle$.



Історично першими квантовими точками були мікрочастинки селеніду кадмію CdSe. Електрон в такому мікрочастинці поводить себе як електрон в тривимірній потенціальній ямі.

Подібні квантові точки дуже нестабільні – щонайменші коливання магнітного поля, що випромінюється атомним ядром, можуть змусити кубіт втратити збережені дані. Це пов'язано з тим, що в більшості відповідних напівпровідникових матеріалів (наприклад, арсеніт іридію) відбувається сильна взаємодія вільних електронів з атомами речовини. Час життя інформації в кубіті не перевищував декількох мільярдних часток секунди. Такої нестабільності можна уникнути використовуючи лазерне випромінювання. Лазерним променем можна заблокувати вплив зовнішніх магнітних полів на квантову точку. Його дія змушує електрон підніматися на вищий енергетичний рівень, залишаючи після себе позитивно заряджену „дірку”. „Дірка” володіє власним магнітним полем, яке врівноважує дію ядра атома і дозволяє зберігати систему надалі без зовнішнього впливу лазерного випромінювання. Лазерна стабілізація магнітного поля кубіта значно продовжує час його стабільного стану (до тисячі разів).

Передбачається, що перспективність цього напрямку полягає в можливості створювати електронні квантові пристрої високого ступеню інтеграції на одному кристалі, при цьому для управління кубітами не будуть потрібні громіздкі лазерні або ЯМР-установки.

4. У напівпровідникових кристалах безспінового моноізопопного **кремнію** ^{28}Si , в якому атоми фосфору ^{31}P (кубіти) розташовані в лінійному ланцюжку (модель Кейна) на деякій відстані (близько 20 нм) від ізолятора [30,31]. Як варіант також використовуються **епітаксіальні гетероструктури** $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ з тими ж атомами фосфору [32]. В цих роботах в якості прообразу квантового комп'ютера запропоновані нанометрові транзисторні структури, з використанням технологій наноелектроніки.

Важливою вимогою при створенні такого квантового комп'ютера є ізоляція кубітів від будь-яких ступенів вільності, які можуть привести до декогеренції. Якщо кубітами є спіни донорної домішки напівпровідника, ядерні спіни атомів матриці кристалу можуть взаємодіяти зі спінами донорних домішок. Тому матриця повинна містити ядра зі спіном $I = 0$. Ця вимога виключає більшість напівпровідників з числа кандидатів на матрицю, так як ні одна зі



складових їх елементів не має стабільних ізотопів з нульовим спіном. Для кремнію такий ізотоп існує: ^{28}Si . Крім того, для кремнію найбільш розвинена технологія отримання матеріалу, є великий досвід у створенні нанооб'єктів, і тому він найкраще підходить на роль напівпровідникової матриці. Єдиною невеликою за атомними розмірами донорною домішкою у Si зі спіном $I = 1/2$ є ^{31}P .

На рис. 4.7 схематично зображено чотири комірки Кейна в кремнієвій матриці з ядерними спінами-кубітами донорних атомів фосфору. При температурах менших $0,1\text{K}$ ядерні спіни мають дуже великий час (до 10^{18}c) збереження вихідних квантових станів.

Спіни ядер домішкових атомів фосфору сплitalись із спінами електронів. Значення спінів ядер атомів і електронів виступали в ролі кубітів. При охолодженні до температури 3K і опроміненні радіохвилями, можна досягнути сплетення 10 мільярдів кубітів.

У квантового комп'ютера на структурах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ на кремнієвій основі нарощується буферний шар твердого розчину Si/Ge, на якому послідовно розміщуються ще п'ять робочих шарів, склад і товщина яких визначається необхідною енергетичною діаграмою (рис. 4.8 а) і вимогами по ефективній дії управляючих затворів. Основ-

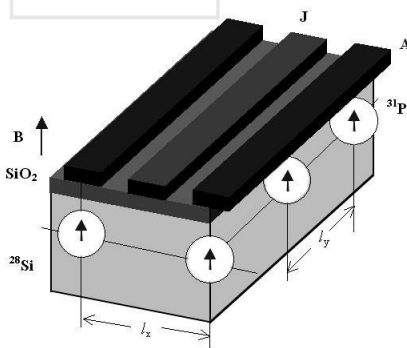


Рис. 4.7. Схематичне зображення чотирьох комірок Кейна

ними шарами, в яких проходять квантові обчислення, є шари D2 (другий донорний шар) і «налаштовувальний» (tuning) шар T (див. рис. 4.8 б). У шарі D2 розміщуються регулярним чином донорні атоми з ядерним спіном ^{31}P з достатньою точністю під «своїм» управляючим металевим затвором (затвор A) на відстані $l_x = 20\text{нм}$ один від одного. Пов'язані з цими атомами електрони і виконують роль кубітів. Шари

D2 і T знаходяться між двома бар'єрними шарами B, які обмежують переміщення електрона у вертикальному напрямі. Це обмеження визначаються розривами зони провідності між шарами D2 і B, і T і B, які дорівнюють 20меВ . Обмеження бар'єром відіграє важливу



роль. Воно зберігає кубітні донорні електрони впродовж довгого часу, не допускаючи втрат як носіїв, так і квантової інформації.

За допомогою електричного поля, що створюється потенціалом затворів А, можна змінювати розподіл електронної густини поблизу ядра в основному стані, змінюючи резонансну частоту кожного ядерного спіну. Ця частота визначається надтонкою взаємодією ядерного спіну з електронним спіном. Таким чином, здійснюється індивідуальне управління квантовими операціями шляхом селективної дії резонансних радіочастотних імпульсів на ядерні спіни певних донорів.

Затвором J (див. рис. 4.7), який розташований між затворами А, керують величиною непрямой взаємодії між ядерними спінами сусідніх донорів, яка забезпечує виконання двокубітних операцій. Це можливо, якщо характерні розміри напівпровідникової структури

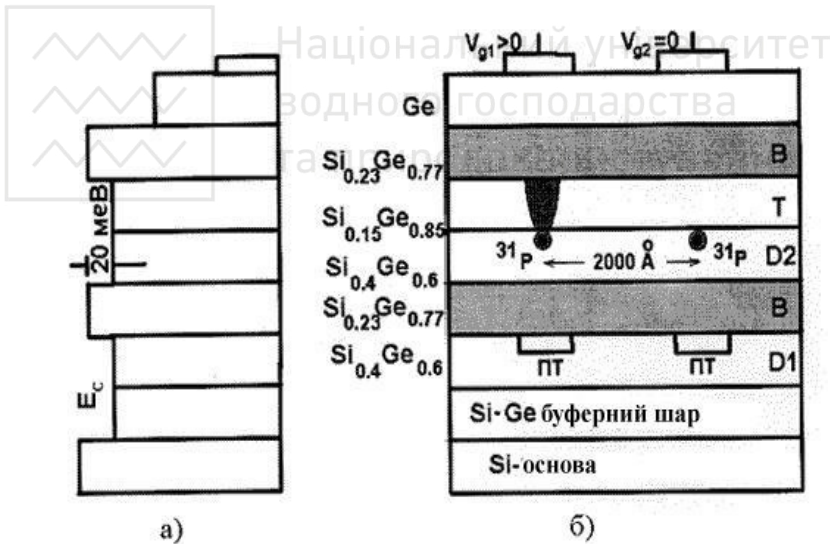


Рис. 4.8. а) енергетична діаграма шарів комірки Кейна; б) будова комірки Кейна квантового комп'ютера

знаходяться в нанометровій області.

У шарі D1(перший донорний шар) перпендикулярно площині малюнка розміщені канали МДН – транзисторів, які служать для рестрації сигналу наприкінці обчислень і просторово розташовані під



Структура з одним атомом, вбудованим в задану точку під електродом, віддалено нагадує структуру польового транзистора. Затвор останнього управляє рухом електронів провідності від витоку до стоку. У разі кубіта напруги на затворі управляють рухом електрона всередині атома, поляризують атом і змінюють резонансну частоту кубіта, пов'язаного зі спіном його ядра [33].

Розвиток цього напрямку, що визнається надзвичайно перспективним, визначається швидкістю розвитку нанотехнологічних розробок, необхідних для створення структур з потрібними параметрами.

5. Кубіти на надпровідникових мезоструктурах. Серед твердотільних реалізацій кубітів виділяються **надпровідні кубіти**, побудовані **на квантових надпровідних ланцюгах**, що містять джозефсонівські контакти [3, 27].

За певних умов (низькі температури, малі розміри) системи з джозефсонівськими контактами є макроскопічними квантовими дворівневими системами, тобто вони можуть бути використані в якості надпровідних кубітів. Проте дворівневими їх можна вважати, якщо існує достатньо великий енергетичний зазор Δ , що відокремлює основний і перший збуджений енергетичні стани від всіх інших. Базисними станами такого кубіта будуть стани надпровідного контакту зі струмом, циркулюючим або за годинниковою стрілкою, або проти неї. Стан джозефсонівських кубітів керується ззовні магнітним потоком Φ .

Основною перевагою джозефсонівських кубітів є масштабованість, можливість нарощування їх числа (що необхідно для реально діючого квантового комп'ютера) з використанням існуючого високого рівня технології створення інтегральних мікросхем. Перевагою цих кубітів в порівнянні з мікроскопічними кубітами (спінами, іонами) є і розвиненість контролюючих засобів. Надпровідні структури можуть забезпечувати мінімальний рівень декогеренції таких кубітів.

Джозефсонівські кубіти виконуються у вигляді інтегральних схем (електричних кіл), що містять джозефсонівські контакти. Для того щоб поведінка кола була квантовомеханічною, необхідно виконання ряду умов:

1. Відсутність дисипації, тобто всі металеві частини кола повинні складатися з надпровідників (реально використовуються ніо-



бій або алюміній). При цьому в надпровіднику повинні бути «заморожені» квазічастинкові збудження, тобто коло повинне знаходитися при температурі меншій T_c .

2. Енергія теплових флуктуацій kT повинна бути мала в порівнянні з відстанню між рівнями енергії станів кубіта $|0\rangle$ і $|1\rangle$. Для надпровідних кубітів величина частоти переходу між цими рівнями ω становить порядку 10ГГц , що складає $\sim 0,5K$. Робоча температура (включаючи «електромагнітну» температуру зовнішніх наводок) у результаті повинна складати $\sim 10^{-3} - 10^{-2}K$.

3. Нелінійна індуктивність. Для реалізації кубіта необхідно виділення двох близько розташованих енергетичних рівнів, для того щоб рештою вище розташованими рівнями можна було б знехтувати. Це досягається за рахунок істотної нелінійності джозефсонівської індуктивності L_j .

Джозефсонівські кубіти вже експериментально реалізовані і активно вивчаються.

В квантовій механіці відоме співвідношення Вейля-Гейзенберга, з якого і із співвідношення комутації для операторів фази і кількості куперівських пар (1.88) випливає, що

$$[\Delta\hat{\phi}, \Delta\hat{N}] \geq 1. \quad (4.1)$$

З нього видно, що може існувати два граничних випадки: добре визначене число куперівських пар $\Delta N \ll N$ і добре визначена фаза переходу $\Delta\phi \ll \phi$. Перший граничний випадок здійснюється, коли зарядова енергія набагато більша джозефсонівської енергії ($E_c \gg E_j$). При цьому ми можемо контролювати динаміку куперівських пар, тобто заряд надпровідника $Q = 2eN$. В другому граничному випадку $E_j \gg E_c$ ми добре контролюємо фазу переходу (магнітний потік). Звідси слідує, що при реалізації кубітів на джозефсонівських переходах можливі два варіанти:

1. *квантова інформація кодується числом куперівських пар в квантовій точці («квантовому ящику»);*

Тут кубіти реалізовані як невеликі (менше 100нм) надпровідні острівці S_i («ящики для куперівських пар, англ.: the single Cooper pair box»), приєднані до масивних надпровідних електродів G_i (рис. 4.9). Заряд на такому острівці, відокремленому від надпровідного резервуару (дуже масивного надпровідника S) джозефсонівським контактом малої ємності, використовується в кубіті як квантова

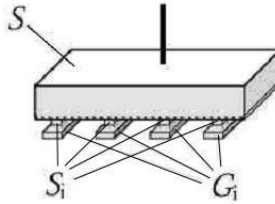


Рис. 4.9. Структура зарядових джозефсонівських кубітів (S_1 – електрично ізолювані надпровідні острівці; G_1 – електроди для зміни та зчитування стану кубітів, S – резервуар електронів)

ступінь вільності. Базисні стани – це різне число n куперівських пар на острівці. На острівці може знаходитись лише ціле число надлишкових куперівських пар електронів ($0, 1, 2, \dots$), і кожному числу пар відповідає своя енергія переходу і свій квантовий стан острівця. Такі структури називають «зарядовими» кубітами. Звичайно за «0» та «1» приймають найнижчі енергетичні стани – з 0 та 1 надлишковою куперівською парою на острівці. Зчитувати стан зарядового кубіта можна, вимірюючи потенціал металевого електрода G_1 . А змінювати цей стан можна, подаючи на цей електрод імпульс додатньої чи від'ємної напруги V . Заряд на контакті складається з дискретного



Рис. 4.10. Енергетичний спектр зарядового кубіта квантового числа $2en$, який дорівнює сумі надлишкового числа ку-



перівських пар на островці помноженому на $2e$ і неперервного заряду $Q_g = C_g V$ (C_g – ємність контакту «електрод – острівець»).

На рис. 4.10 показаний енергетичний спектр зарядового кубіта. Хвилясті лінії, позначені $0, 1, 2, 3 \dots n$ відповідають рівням енергії з

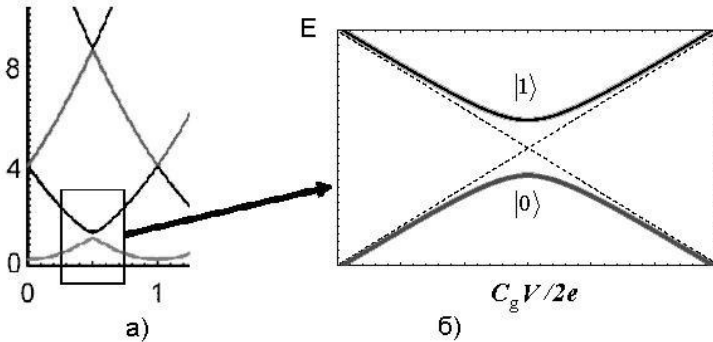


Рис. 4.11 а) Розщеплення рівнів енергії; б) Базисні стани кубіта $|0\rangle$ і $|1\rangle$

відповідним надлишковим числом куперівських пар на островці.

Джоузефсонівська енергія E_J (мала в порівнянні з зарядовою енергією E_C) знімає виродження в точках перетину рівнів (рис. 4.11, а); величина розщеплення $\sim E_J$. В результаті, обмежуючись двома найнижчими рівнями, маємо дворівневу квантову систему, тобто кубіт (мал. 4.11, б).

На рис. 4.12 показане зроблене на електронному мікроскопі фото

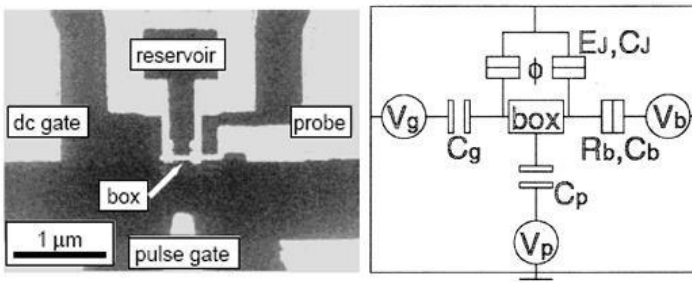


Рис. 4.12. Фото зарядового кубіта, здійснене на електронному мікроскопі, та його еквівалентна схема [34]

зарядового кубіта, реалізованого в лабораторії NEC (Японія). Вказаний масштаб дає уявлення про можливості сучасної технології



(нагадаємо, що товщина людської волосини $\sim 50\mu\text{м}$).

Центральний острівець (box) з'єднаний тунельними джозефсонівськими контактами з резервуаром (reservoir), виготовленим у вигляді алюмінієвого кільця. Вимірювальний зонд (probe) приєднаний до острівця через «товстий» шар окислу. Опір цього контакту роблять дуже великим ($\sim 2\text{МОм}$), для того щоб вносити малі збурення в стан острівця. А сам острівець і є власне кубітом з двома станами – наявністю ($|1\rangle$) або відсутністю ($|0\rangle$) на ньому надлишкової куперівської пари. Те, що це саме квантовий біт, а не просто біт, означає можливість існування змішаних станів, коли на острівці знаходиться неціле число куперівських пар. При подачі короткого імпульсу напруги на електрод (pulse gate), більшого ніж потенціал на затворі (dc gate), відбувається перехід з початкового стану $|1\rangle$ в стан $|0\rangle$. Пропорції змішування цих станів визначаються тривалістю імпульсу. Діагностування змішаного стану проводилося за допомогою вимірювання струму через зонд. При цьому час виходу куперівської пари в контакт становило всього 1нс (за оцінками). У відсутність вимірювального електрода, який не потрібен для роботи кубіта, час життя стану на острівці оцінюється в десятки і сотні секунд.

2. *квантова інформація кодується напрямом надпровідного струму в сквіді.*

Кубіт реалізований таким чином називають ще фазовим або потоковим кубітом (flux qubit). Один або декілька контактів вбудовуються в надпровідне кільце діаметром близько $8\mu\text{м}$, при цьому різниці фаз на контактах пов'язані з магнітним потоком Φ в кільці. Площа переходу Джозефсона тут набагато більша ніж у попередній «зарядовій» реалізації, щоб виконувалась необхідна умова $E_j \gg E_c$, таким чином зменшується на декілька порядків критичне значення I_c надпровідного струму.

Для кільця з одним контактом різниця фаз берегів контакту:

$$\varphi = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (4.2)$$

де Φ_0 – квант магнітного потоку.

Оскільки струм в кільці за співвідношенням (1.93) періодично залежить від фази, система в цілому екстремально чутлива до магнітного потоку а, отже, й до магнітного поля.

На рис. 4.13, а зображено надпровідне кільце з джозефсонівсь-



ким контактом в зовнішньому магнітному полі. Прикладений потік Φ_e наводить в кільці струм I , магнітне поле якого в сумі з прикладеним зовнішнім полем визначає сумарний потік Φ поля через кільце:

$$\Phi = \Phi_e - LI = \Phi_e - LI_c \sin\left(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right). \quad (4.3)$$

При $\beta \equiv 2\pi LI_c / \Phi_0 \geq 1$ залежність Φ від Φ_e стає неоднозначною, в системі виникає набір метастабільних струмових станів.

На рис. 4.13 б зображена залежність енергії системи (магнітній + джозефсонівський) як функції потоку в кільці Φ у разі, коли прикладений потік Φ_e точно дорівнює половині кванта потоку Φ_0 . Вона має вигляд потенціалу з двома мінімумами, які визначають два стабільні стани кільця «потік Φ_1 , струм за годинниковою стрілкою» і «потік Φ_2 , струм проти годинникової стрілки». Квантовомеханічне тунелювання куперівських пар призводить до встановлення двох дискретних квантових рівнів $|0\rangle$ і $|1\rangle$, які відрізняються енергією

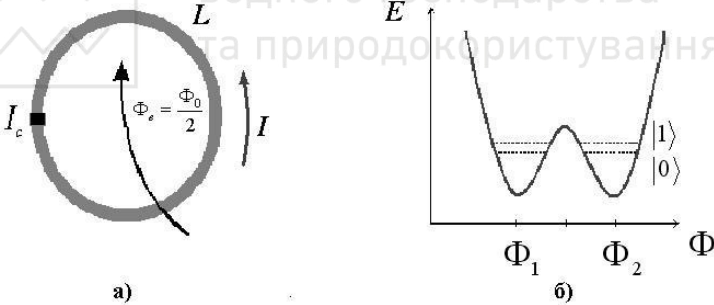


Рис. 4.13. а) Надпровідне кільце з джозефсонівським контактом. L - індуктивність кільця, Φ_e - прикладений магнітний потік, Φ_0 - квант потоку, I - сила струму в кільці; б) Енергія кільця як функція повного потоку Φ

($E = \hbar\omega_{10}$) базисних станів кубіта. Стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ є когерентними суперпозиціями станів з струмами, що протікають за годинниковою стрілкою і проти неї. Керувати станами кубітів можна за допомогою мікрохвильових імпульсів з частотою ω_{10} .

Фазовий (потіковий) кубіт був вперше реалізований і активно вивчається в лабораторії J. E. Mooij (Делфт, Нідерланди). На



рис. 4.14 показана схема кубіта (що складається з трьох джозефсонівських контактів) та його фотографія [35].

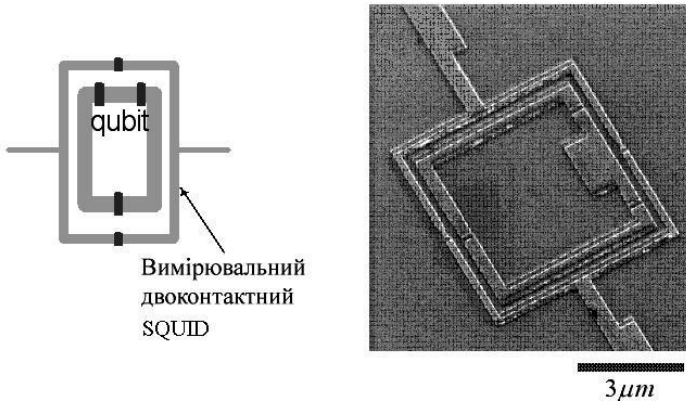


Рис. 4.14. Схема і фотографія трьохконтактного потокового кубіта. Кубіт розміщений в двоконтактний SQUID, який вимірює стан кубіта

На відміну від кільця з одним контактом, в разі трьох джозефсонівських контактів бістабільні стани кубіта (рис. 4.14 а, б) виникають при як завгодно малій індуктивності L кільця, що дозволяє зменшити вплив на кубіт зовнішніх електромагнітних шумів. Двоконттактний SQUID на цьому рисунку призначений для детектування магнітних полів, які генеруються кубітом, тобто для вимірювання стану кубіта.

Поряд з розглянутими вище основними типами джозефсонівських кубітів існують інші варіанти надпровідних кубітів. До них відносяться т. з. d -хвильові кубіти [36] – кубіти на основі високотемпературних надпровідників, які мають незвичайну симетрію надпровідного параметра порядку [37]. У спільних дослідженнях німецьких (м. Йена) та харківських (ФТІНТ НАН України) учених експериментально і теоретично вивчається комбінований зарядово-потоковий кубіт, що поєднує переваги двох основних типів кубітів [38,39]. В роботі [40] було запропоновано кубіт, заснований на багатотермінальних джозефсонівських структурах.

6. Двомірний електронний кристал в потенціальній пастці (ямі) поблизу поверхні рідкого гелію [41]. Американські фізики Р.М. Platzman і М.І. Dykman розробили будову квантового комп'ютера на електронах, що плавають на поверхні рідкого надте-



кучого гелію. Як відомо, електрони, що знаходяться поблизу границі рідкого гелію і вакууму, потрапляють до потенціальної ями і створюють двовимірний електронний газ. Найнижчий і перший збуджений стан електрона в цій ямі можуть служити станами кубіта.

Локалізація електронів в площині двовимірного електронного газу забезпечується окремими електродами, розміщеними під шаром рідкого гелію. Причому, електрони, розсіпані по поверхні гелію, самі скочуються до цих електродів, їх не треба спеціально розміщувати над ними. Операції над окремими кубітами виконуються за допомогою електромагнітних імпульсів, що переводять електрони з нижнього на верхній рівень і навпаки. Доступ до окремих кубітів здійснюється подачею напруги на електрод, яка змінює енергетичний зазор між рівнями в даному кубіті, іншими словами, або вводить в резонанс з електромагнітної хвилею, або виводить з резонансу. Взаємодія сусідніх кубітів забезпечується кулонівськими силами між електронами.

Дуже цікаво задуманий процес зчитування результату. При цьому треба було визначити, у якому стані знаходиться той чи інший кубіт, тобто дізнатися, на якому рівні знаходиться електрон, на нижньому або на верхньому. Це можна зробити, якщо розмістити над електроном електрод і подати на нього позитивний потенціал. Електрон з верхнього рівня набагато швидше протунелює на цей електрод, ніж електрон з нижнього рівня.

7. Кубіти на одиничних атомах в мікрорезонаторах. Дворівнева система (атом-кубіт), пов'язана з осцилятором-фотонем в одній з мод коливань резонатора. Цей метод передбачається використати при розробці способів транспортування атомних і фотонних кубітів, а також при передачі квантової інформації від атомних кубітів до фотонних і в зворотному напрямку (атом-фотонний квантовий інтерфейс).

8. За допомогою лінійних оптичних елементів (оптичний квантовий комп'ютер).

Крім вище означених і реалізованих існує також низка перспективних ідей:

1. Двовірвна атомна решітка в оптичній пастці, утвореній стоячою хвилею інтерферуючих лазерних пучків [42].
2. Аніони в двовірвному електронному газі в напівпровідниках



в умовах дробового квантового ефекту Холла [43].

3. Квантові клітинні автомати у феромагнітних (антиферомагнітних) структурах в кристалах [44].
4. Квантові комп'ютери на електронних хвилях.

4.2. Фізична реалізація гейтів на іонах пастки Пауля

Серед запропонованих технічних реалізацій квантових комп'ютерів однією з найкращих розвинена теорія і практика виконання квантових логічних операцій для іонів в пастці Пауля (див. рис. 4.15).

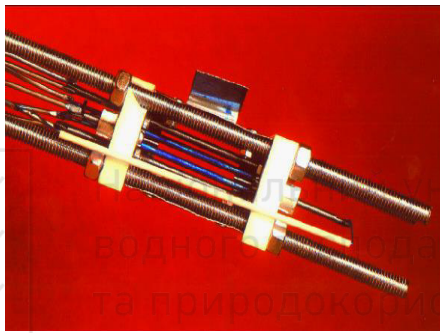


Рис. 4.15. Технічна реалізація пастки Пауля

Метод квантових обчислень, який базується на використанні іонів в іонних пастках запропонований Дж. Ціраком і П. Цоллером [45]. Дія гейтів в такому квантовому комп'ютері базується на квантовій сплетеності внутрішніх ступенів свободи іонів (електронні збудження) і колективного руху (коливального збудження) замкнених у пастці іонів. Розглянемо приклад реалізації гейтів на атомах в пастці Пауля, запропонований Ціраком і Цоллером.

Отже [46]:

1. Будемо вважати, що кубіт – це іон з двома енергетичними рівнями. Ці рівні мають бути довгоживучими, що дасть можливість нехтувати процесами спонтанного випромінювання – одним з основних чинників, що призводять до декогеренції.
2. Іони знаходяться в лінійній пастці, що обмежує їх поступальний рух (див. рис. 4.4).
3. Припустимо, що до кожного іона є доступ за допомогою сфокусованого лазерного випромінювання (див. рис. 4.16).



4. Завдяки кулонівській взаємодії (відштовхуванню), спрямованій уздовж осі пастки, виникає колективний рух іонів. Це призводить до того, що іони можуть взаємодіяти між собою за допомогою таких коливань (інколи називають «коливальною шиною даних»).

5. Читання кінцевого стану такого регістра іонів здійснюється за допомогою інших лазерів.

Вважатимемо, що іони в пастці мають принаймні один довгоживучий (вузький) рівень. Такий рівень може опинитися в мікрохвильовому діапазоні (наприклад, завдяки переходу в надтонку структуру), або в оптичному діапазоні (переходи в метастабільний збуджений стан). Наприклад, використовуються іони берилія ${}^9\text{Be}^+$ з переходом в УФ діапазоні на довжині хвилі 313нм (перехід ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_3$).

Отже, припустимо, що іони, завдяки конфігурації пастки, рухаються в гармонічному потенціалі з частотами

$$\omega_z \gg \omega_x, \omega_y. \quad (4.4)$$

Це співвідношення означає, що іони локалізовані вздовж осі z і

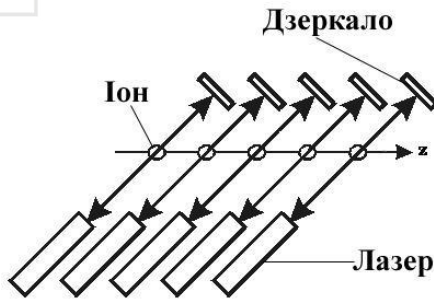


Рис. 4.16. Схема індивідуального доступу до кожного іона в пастці

їх поперечним рухом можна знехтувати.

Припустимо, що іони охолоджені до температур порядку 10^{-6} K , тому коливальні рухи вздовж осі z відбуваються так, що всі іони знаходяться в основному стані, тобто в стані рівноваги. В такому випадку рух іонів можна розглядати як рух не зв'язаних осциляторів. Згідно (1.67) енергія таких осциляторів квантується і нижній збуджений стан коливань є збудженим станом руху центру мас N



Проведення квантових обчислень за допомогою будь-яких фізичних систем зводиться до можливості побудови одно- та двокубітних гейтів на них. Однокубітні гейти в системі «іон (атом) + поле» створити досить просто. Для цього існує техніка переходів Рабі, яка дозволяє управляти внутрішнім станом кубіта. Однокубітні переходи і, отже, гейти, як було показано в розділі 3 пов'язані тільки з обертанням вектора стану окремого іона (вектора Блоха) без зміни його переміщення.

Позначимо енергетичні стани іона, які відповідають основному та збудженому рівням і які ми будемо використовувати для проведення обчислень, як $|g\rangle$ і $|e\rangle$. Також введемо допоміжний рівень $|e'\rangle$, який для простоти будемо вважати невиродженим до $|e\rangle$. Структура рівнів іонів показана на рис. 4.17. Також ми будемо вважати, що електромагнітне поле лазера безпосередньо знаходиться в резонансі з відповідними парами рівнів, а отже частота лазера збігається з борівською частотою переходу між $|g\rangle$ і одним із збуджених $|e\rangle$ станів атома. Згідно теорії атом під дією лазерного імпульсу переходить в певний стан $|\psi\rangle$. У загальному випадку ($\omega \neq \omega_0$) ймовірність переходу під дією зовнішнього монохроматичного поля дається формулою Рабі:

$$P = \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}} \sin(\tilde{\Omega}t/2), \quad (4.5)$$

де $\Omega = |\vec{\mu}\vec{\epsilon}_0|/(2\hbar)$ – частота Рабі, $\tilde{\Omega} = \sqrt{\Omega^2 + (\omega - \omega_0)^2}$ – узагальнена частота Рабі, $\vec{\mu}$ – дипольний момент атома, $\vec{\epsilon}_0$ – амплітуда напруженості електричного поля, ω – частота лазерного випромінювання, ω_0 – резонансна частота переходу з $|g\rangle$ в $|e\rangle$ – стан ($\omega_0 = \frac{Ee - Eg}{\hbar}$).

Ця формула показує, що квантова система під дією резонансного збурення ($\omega \rightarrow \omega_0$, $\tilde{\Omega} \rightarrow \Omega$) періодично переходить з нижнього вня на верхній і навпаки. Час переходу із *min* в *max* складає



$$\frac{t\Omega}{2} = \frac{\pi}{2} \rightarrow t_{\pi} = \frac{\pi}{\Omega} = \frac{\pi\hbar}{\mu\varepsilon_0}$$

На рис. 4.17 другий символ, що позначає стан, відноситься до коливального руху ЦМ (зовнішня ступінь вільності), а перший – до внутрішньої ступеня вільності іона (електронні збудження). Символи $|0\rangle$ і $|1\rangle$ в станах $|g,0\rangle \cdots |e,1\rangle$ позначають основні і збуджені стани коливальних ЦМ, які не будуть використовуватися при обчисленнях, і є допоміжними.

Якщо лазер налаштований на частоту ω_0 , то в резонансі виявляється пара рівнів $|g,p\rangle$ і $|e,p\rangle$. Тут символ $|p\rangle$ означає або $|0\rangle$, або $|1\rangle$. Осциляції ЦМ при такому налаштуванні лазера не виникають. Якщо лазер налаштований на частоту, $\omega_0 - \omega_z$, то в резонансі виявляється пара рівнів $|g,1\rangle$ і $|e,0\rangle$ і якщо ж лазер налаштований на частоту $\omega' - \omega_z$, то в резонансі буде пара $|g,1\rangle$ і $|e',0\rangle$.

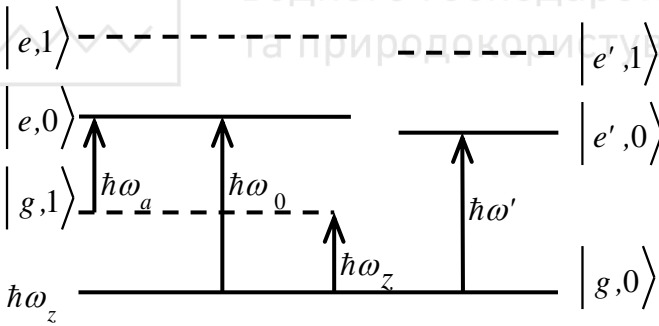


Рис. 4.17. Схема рівнів в невідродженій моделі Дж. Цірака і П. Цоллера

Взаємодія системи «дворівневий атом – поле» описана в теорії Джейнса-Каммінгса. В цій теорії розглядається дворівневий атом, який поміщений в центр ідеального резонатора. В цьому ж резонаторі рухаються електромагнітні хвилі, які відбиваються від його стінок. В наслідок такого відбиття відбувається інтерференція цих хвиль, в результаті чого одні хвилі гасяться, а інші підсилюються. Теорія показує, що в резонаторі «виживають» лише хвилі певних



частот, які називаються модами резонатора. Для спрощення розглянемо один атом, що має основний $|g\rangle$ і збуджений $|e\rangle$ стани і взаємодіє лише з однією модою електромагнітного поля. Гамільтоніан такої взаємодії має вигляд:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (4.6)$$

$$\text{де } \hat{H}_0 = \hat{H}'_0 + \hat{H}''_0 = \hbar\omega_0 \frac{|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|}{2} + \hbar\omega a^+ a, \quad (4.7)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2} \hbar\Omega |e\rangle\langle g| a e^{i\phi} + \frac{1}{2} \hbar\Omega |g\rangle\langle e| a^+ e^{-i\phi} \quad (4.8).$$

Тут $\hat{H}'_0 = \hbar\omega_0 \frac{|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|}{2}$ – гамільтоніан вільного дворівневого атома, $\hat{H}''_0 = \hbar\omega a^+ a$ – гамільтоніан вільного електромагнітного поля, \hat{H}_1 – гамільтоніан взаємодії.

Перший член \hat{H}_0 описує незвазодіючий атом, який знаходиться або в збудженому, або в основному стані і моду частоти ω . Член H_1 описує переходи зі збудженого стану в основний і навпаки з народженням і поглинанням фотона. Тут $\omega_0 = (E_e - E_g) / \hbar$ – частота переходу між рівнями атома, ϕ – фаза поля в центрі атома, a і a^+ – оператори породження і знищення фотона (див. 1.24), Ω – частота Рабі.

Розглянемо оператор

$$\hat{S} = a^+ a + |e\rangle\langle e|. \quad (4.9)$$

Він описує випадок коли фотони виникають і зникають без взаємодії з атомом, який може існувати в збудженому стані. Цей оператор комує з гамільтоніаном.

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0. \quad (4.10)$$

Це означає що гільбертовий простір станів розділяється на два ортогональні підпростори.

Підпростір з власним значенням оператора $\hat{S} : s=0$, дає основний стан атома і відсутність фотонів $|g, 0\rangle$. Тут символ $|0\rangle$ показує відсутність фотонів. Цей стан будемо розглядати як основний стан си-



$$\hat{H}|g,0\rangle = 0. \quad (4.11)$$

Підпростір з кількістю фотонів більшою ніж 1 ($s \geq 1$) охоплює стани $|g,s\rangle$ і $|e,s-1\rangle$.

Рівняння Шредінгера для цього випадку запишеться у вигляді

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi_s\rangle}{\partial t} = \hat{H}_1 |\Psi_s\rangle, \quad (4.12)$$

Нехай для $s \geq 1$ — $|\Psi_s\rangle = c_{gs}|g,s\rangle + c_{es}|e,s-1\rangle$.

З рівняння Шредінгера можна знайти коефіцієнти c_{gs} і c_{es} .

Якщо частота лазерного випромінювання ω точно співпадає з частотою переходу ω_0 між двома рівнями, то розв'язок рівняння Шредінгера дає власні функції, що мають вигляд сплєтених станів атома та електромагнітного поля.

$$|\Psi_s \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|g,s\rangle \pm e^{-i\phi} |e,s-1\rangle). \quad (4.13)$$

Іншими словами, стан системи описується суперпозицією двох можливостей: атом в основному стані плюс фотони; атом у збудженому стані, фотонів на один менше.

Матриця унітарного перетворення для підпростору $s \geq 1$ має вигляд:

$$V_s(\Omega t, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\sqrt{s}}{2} \Omega t & ie^{-i\phi} \sin \frac{\sqrt{s}}{2} \Omega t \\ ie^{i\phi} \sin \frac{\sqrt{s}}{2} \Omega t & \cos \frac{\sqrt{s}}{2} \Omega t \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Математично матриця $V_s(\Omega t, \phi)$ описує поворот вектора стану від осі z до полярної осі заданої кутами Ωt та ϕ .

Розглянемо випадок одного фотона ($s=1$). Для $\Omega t = \pi$ отримаємо:

$$V_1(\pi, \phi) = \begin{pmatrix} 0 & ie^{-i\phi} \\ ie^{i\phi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Якщо фаза лазера дорівнює $\phi = \pi/2$, то отримаємо перетворення:



$$V_1(\pi, \pi/2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

тобто $|g,1\rangle \rightarrow -|e,0\rangle$ і $|e,0\rangle \rightarrow |g,1\rangle$, або, іншими словами, стан атома змінюється на протилежний. Такий імпульс поля називається **π - імпульсом**. **π - імпульс електромагнітного поля здійснює над одиничним атомом в пастці Пауля однокубітний гейт NOT.**

Якщо виконується співвідношення $\Omega t = 2\pi$, то матриця унітарного перетворення прийме вигляд:

$$V_1(2\pi, \phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

для будь-яких значень фази ϕ поля!

Нехай тепер виконується співвідношення $\Omega t = \pi/2$. Матриця унітарного перетворення прийме вигляд:

$$V_1(\pi/2, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -ie^{i\phi} \\ -ie^{-i\phi} & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Якщо в початковий момент часу стан системи був $|e,0\rangle$, тобто атом знаходився в збудженому стані, а фотонів не було, то після взаємодії фотона з атомом стан системи стає сплутаним:

$$|e,0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|e,0\rangle - ie^{-i\phi} |g,1\rangle). \quad (4.19)$$

Така дія електромагнітного випромінювання називається **$\pi/2$ - імпульсом**.

Важливим для однокубітних перетворень є частковий випадок $V(\pi/2, \phi)$ - перетворення, коли $\phi = \pi/2$. Воно прийме вигляд:

$$V_1(\pi/2, \pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = R. \quad (4.20)$$

Це окремий випадок $\pi/2$ -імпульсу, коли фаза електромагнітного поля в центрі атома дорівнює $\phi = \pi/2$. **$\pi/2$ - імпульс електромагнітного поля здійснює над одиничним атомом в пастці Пауля однокубітний гейт Адамара.**

Розглянуті випадки однокубітних гейтів реалізуються на іонах в резонаторах з дією на них лазерного випромінювання. Подібним



чином в методі ядерного магнітного резонансу до іонів прикладаються аналогічні імпульси магнітного поля.

В техніці магнітного резонансу гейт NOT реалізується дією на квантову частинку (кубіт) імпульсом магнітного поля ззовні, який переводить кубіт з одного стану в інший. Гейт NOT відповідає перевертання спіна $I_z \leftrightarrow -I_z$ під дією імпульсу $Y(\pi)$ (обертання вектора намагнічення навколо осі Y на кут π).

Гейт Адамара здійснюється магнітними імпульсами $\pi/2$. Так гейт

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \text{ здійснюється } \pi/2\text{-імпульсом } Y\left(\frac{\pi}{2}\right) I_z \rightarrow I_x, \text{ а}$$

гейт $\hat{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ – $\pi/2$ - імпульсом $Y\left(\frac{\pi}{2}\right) - I_z \rightarrow -I_x$. Тут I – спін іона з відповідними проекціями на осі координат.

Змодельюємо **гейт CNOT**, реалізований на основі будь-якої пари іонів, що знаходяться в пастці Пауля.

Нагадаємо, що цей двокубітний гейт виконує операцію:



$$\begin{aligned} |00\rangle &\xrightarrow{CNOT} |00\rangle \\ |01\rangle &\xrightarrow{CNOT} |01\rangle \\ |10\rangle &\xrightarrow{CNOT} |11\rangle \\ |11\rangle &\xrightarrow{CNOT} |10\rangle \end{aligned} \quad (4.21)$$

Цей запис означає, що стан контролюючого кубіта зберігається, а стан контрольованого не змінюється при стані контролюючого $|0\rangle$ і змінюється на протилежний при стані контролюючого $|1\rangle$.

Нехай перший іон буде контролюючий, а другий – контрольований. Тоді перший може знаходитись в станах $|g_1\rangle = |0\rangle$ і $|e_1\rangle = |1\rangle$, а другий $|g_2\rangle = |0\rangle$ і $|e_2\rangle = |1\rangle$. Тоді операція CNOT буде зводиться до:

$$CNOT = R_2(CSF)_{12} R_2^{-1}, \quad (4.22)$$

де оператор R_2 – це виведений вище оператор R для іона 2, а так званий оператор CSF (англ.: control sign flip) діє на іони 1 і 2 за правилом:



$$\begin{aligned} |g_1, g_2, 0\rangle &\rightarrow |g_1, g_2, 0\rangle \\ |g_1, e_2, 0\rangle &\rightarrow |g_1, e_2, 0\rangle \\ |e_1, g_2, 0\rangle &\rightarrow |e_1, g_2, 0\rangle \\ |e_1, e_2, 0\rangle &\rightarrow -|e_1, e_2, 0\rangle. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Тут зліва виписані всі можливі комбінації станів двох дворівневих іонів 1 і 2, що знаходяться в основному коливальному стані ЦМ $|0\rangle$ (третій символ у векторах). Як бачимо операція CSF нічого не змінює в перших трьох станах і лише коли обидва атоми знаходяться в збудженому стані змінює напрямок вектора стану.

Розглянемо, яким чином можна здійснити ці операції в рамках нашої системи.

Оператор R. Для виконання цієї операції ми подаємо $\pi/2$ - імпульс на іон 2 за допомогою відповідним чином сфазованого і налаштованого за частотою лазера.

Оператор CSF. Він задається дією операторів:

$$CSF_{12} = U_1(\pi, 0) W_2(2\pi, 0) U_1(\pi, 0). \quad (4.24)$$

Тут $U_1(\pi, 0)$ - це π -імпульс, що подається на перший іон, з фазою $\phi=0$, коли частота лазера налаштована на перехід $\omega_a = \omega_0 - \omega_z$ (така операція залишає стан іона 2 без зміни!) і приводить до наступних перетворень:

$$\begin{aligned} (1) |g_1, p_2, 0\rangle &\rightarrow |g_1, p_2, 0\rangle \\ (2) |g_1, p_2, 1\rangle &\rightarrow |e_1, p_2, 0\rangle \\ (3) |e_1, p_2, 0\rangle &\rightarrow -|g_1, p_2, 1\rangle \\ (4) |e_1, p_2, 1\rangle &\rightarrow |e_1, p_2, 1\rangle \end{aligned} \quad (4.25)$$

Як і раніше, символ $|p_2\rangle$ позначає будь-який стан (другого) іона, але третій символ ($|0\rangle$ і $|1\rangle$) показують наявність або відсутність фотона.

Оператор $W_2(2\pi, 0)$ описує дію 2π -імпульсу з фазою $\phi=0$, коли частота лазера налаштована на перехід $\omega' - \omega_z$. При цьому всі стани залишаються без зміни, за винятком



$$\begin{aligned} (1) |p_1, g_2, 1\rangle &\rightarrow -|p_1, g_2, 1\rangle \\ (2) |p_1, e'_2, 0\rangle &\rightarrow -|p_1, e'_2, 0\rangle \end{aligned} \quad (4.26)$$

згідно формули 4.17.

З урахуванням правил дії операторів (4.25, 4.26) отримуємо необхідні перетворення:

$$\begin{aligned} |g_1, g_2, 0\rangle &\xrightarrow{4.25(1)} |g_1, g_2, 0\rangle \xrightarrow{4.26(\text{незмін})} |g_1, g_2, 0\rangle \xrightarrow{4.25(1)} |g_1, g_2, 0\rangle, \\ |g_1, e_2, 0\rangle &\xrightarrow{4.25(1)} |g_1, e_2, 0\rangle \xrightarrow{4.26(\text{незмін})} |g_1, e_2, 0\rangle \xrightarrow{4.25(1)} |g_1, e_2, 0\rangle, \\ |e_1, g_2, 0\rangle &\xrightarrow{4.25(3)} -|g_1, g_2, 1\rangle \xrightarrow{4.26(1)} |g_1, g_2, 1\rangle \xrightarrow{4.25(2)} |e_1, g_2, 0\rangle, \\ |e_1, e_2, 0\rangle &\xrightarrow{4.25(3)} -|g_1, e_2, 1\rangle \xrightarrow{4.26(\text{незмін})} -|g_1, e_2, 1\rangle \xrightarrow{4.25(2)} -|e_1, e_2, 0\rangle. \end{aligned}$$

Ми отримали в підсумку результат, що співпадає з (4.23). *Зуважимо, що кінцевим результатом еволюції буде зміна знака, але лише в тому випадку, якщо обидва іона знаходяться в збудженому (внутрішньому) стані $|e\rangle$. І до, і після логічної операції CNOT мода ЦМ знаходиться в вакуумному (не збудженому) стані $|0\rangle$.*

В техніці магнітного резонансу гейт CNOT виконується на двох спінах зі значеннями $1/2$ (спін I_j контролює спін I_i) з гамільтоніаном:

$$\hat{H} = \hbar\omega_i \hat{I}_{zi} + A_{ij} \hat{I}_{zi} \hat{I}_{zj} + \hat{H}'_{\text{імпульс}}(t). \quad (4.27)$$

Тут член $A_{ij} \hat{I}_{zi} \hat{I}_{zj}$ описує взаємодію, наприклад, між спінами ядер в молекулі. Це можливо коли ядра i та j розділені одним хімічним зв'язком. Член $\hat{H}'_{\text{імпульс}}(t)$ описує вплив на систему імпульсного магнітного поля. Перетворення CNOT проводиться за три кроки:

1. здійснюється імпульс $Y_i(\pi/2)$;
2. відбувається вільна прецесія за час $\tau = \pi/A_{ij}$;
3. здійснюється імпульс $X_i(\pi/2)$.

Якщо $I_{zj}=1/2$ (контролюючий кубіт в стані $|0\rangle$), то при вказаних впливах контрольований кубіт здійснює переходи $I_{zj} \rightarrow I_{xj} \rightarrow I_{yj} \rightarrow I_{zj}$ (або $-I_{zj} \rightarrow -I_{xj} \rightarrow -I_{yj} \rightarrow -I_{zj}$). Якщо ж $I_{zj}=-1/2$ (контролюючий кубіт в



стані $|1\rangle$), то результат еволюції контрольованого кубіта буде іншим: $I_{zj} \rightarrow I_{xj} \rightarrow I_{yj} \rightarrow I_{zj}$ (або $-I_{zj} \rightarrow -I_{xj} \rightarrow I_{yj} \rightarrow I_{zj}$). Отже спін I_i еволюціонує по різному при $I_{zj}=1/2$ і $I_{zj}=-1/2$: $|00\rangle \rightarrow |00\rangle$, $|01\rangle \rightarrow |01\rangle$, $|10\rangle \rightarrow |11\rangle$, $|11\rangle \rightarrow |10\rangle$; тут в $|i_1 i_2\rangle$ i_1 – стан контролюючого кубіта.

Реалізація всього протоколу обчислень на системі іонів в пастці Пауля (ми розглянули лише гейт CNOT) дуже складна. Лише окремі її компоненти були продемонстровані на даний час, а саме коливальний рух центру мас системи, що складається з семи іонів.

4.3. Операції читання в деяких реалізаціях квантового комп'ютера

1. Реєстрація внутрішнього стану іонів в пастках Пауля здійснюється за допомогою найбільш поширеного так званого методу «розміщення» електронів.

Ця процедура може бути виконана при використанні ще одного енергетичного рівня атома (наприклад, $|n\rangle$), окрім основного $|0\rangle$ і збудженого $|1\rangle$, а також лазера, налаштованого на частоту переходу між $|n\rangle$ і $|0\rangle$. Якщо такий перехід дозволений, то процес буде супроводжуватися резонансним флуоресцентним випромінюванням, коли система знаходиться в стані $|0\rangle$ і розсіюванням у випадку, коли система знаходиться в стані $|1\rangle$. Нехай основний стан $|0\rangle$ на деякий час зв'язується зі збудженим $|1\rangle$, наприклад, при дії $\pi/2$ -імпульсу. Тоді іон потрапляє в стан суперпозиції $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Якщо потім здійснити перехід між двома станами $|0\rangle$ та $|n\rangle$ (дозволений перехід з малим часом життя в стані $|n\rangle$), то стан збудиться, а потім розпадеться з випусканням фотона (спонтанне випромінювання). Це відбудеться тільки, якщо система перебувала у стані $|0\rangle$! Таким чином, реєстрація фотонів, випущених в процесі такого розпаду і є непрямою ознакою того, що система перебувала у стані $|0\rangle$. Вимі-



рювання таких фотонів буде відбуватися з імовірністю $|\alpha^2|$, оскільки це і є ймовірністю знаходження системи в стані $|0\rangle$. Навіть якщо ефективність детектування фотона при одиничному розпаді дуже мала (в експерименті вона становить десятки частки відсотка), то можна повторити збудження багато разів і збільшити число «розсіяних» фотонів. Тим самим буде однозначно зареєстровано, що система перебувала у стані $|0\rangle$. Якщо ж система розміщується в метастабільному стані $|1\rangle$, то фотони випромінюватися не будуть. Після усереднення по багатьом експериментам, кількість випробувань, в яких спостерігалися фотони, виявиться пропорційною $|\alpha^2|$.

На практиці цей метод продемонстровано на прикладі іона ^{2+}Ca в пастці Пауля (див. рис. 4.18). За стан $|0\rangle$ в нього вибрано $|4^2 S_{1/2}\rangle$, за стан $|1\rangle$ – $|3^2 D_{5/2}\rangle$. Стан $|1\rangle$ є стабільним, спонтанний перехід із нього можливий за час 1с . «Опитування» іона про стан його кубіта здійснюється лазерним випромінюванням з довжиною хвилі $\lambda=397\text{нм}$, яке збуджує переходи $4^2 S_{1/2} \rightarrow 4^2 P_{1/2}$. Якщо кубіт був в стані $|0\rangle = |4^2 S_{1/2}\rangle$, то під дією променя лазера він переходить в стан $|2\rangle = |4^2 P_{1/2}\rangle$. При переході кубіта в стан $|0\rangle$ (спонтанний перехід) відбувається випромінювання фотона, що і дає інформацію про те, що кубіт до початку вимірювання знаходився у стані $|0\rangle$. Якщо до вимірювання іон знаходився в стані $|1\rangle = |3^2 D_{5/2}\rangle$, випромінювання фотона не буде. Недоліком такої квантової системи є те, що може спонтанно відбуватись перехід $4^2 P_{1/2} \rightarrow 3^2 D_{3/2}$ з часом переходу 94нс . Цей недолік усувається дією ще одного лазерного променя з $\lambda=866\text{нм}$, для здійснення переходів $3^2 D_{3/2} \rightarrow 4^2 P_{1/2}$, яка запобігає збільшенню заселеності рівня $3^2 D_{3/2}$.

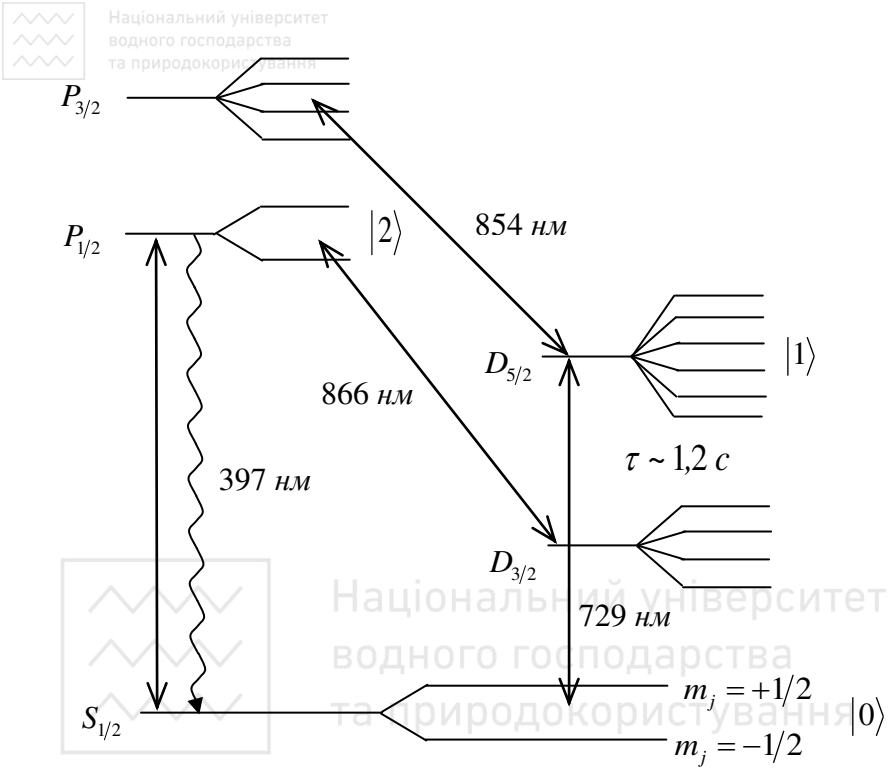


Рис. 4.18. Схема рівнів іона $^{40}\text{Ca}^+$, з підструктурою Зеемана і необхідних довжин хвиль лазера для маніпуляцій з іонами кальцію. Час життя метастабільного D-рівня порядку секунди, що дозволяє протягом довгого часу забезпечувати когерентність кубітів (Wineland et al., 1998; Morigi et al., 1999)

Детектори фотонного випромінювання мають малі кутові розміри і, відповідно, ефективність реєстрації одиничного фотона η набагато менша одиниці. Якщо в результаті переходів $|0\rangle \rightarrow |2\rangle$ і $|2\rangle \rightarrow |0\rangle$ випромінюється N фотонів, то детектор зареєструє в середньому $n=\eta N$ фотонів. Імовірність того, що із N фотонів ні один не буде зафіксований детектором дорівнює

$$p = (1 - \eta)^N = e^{-n}. \quad (4.28)$$



При $n=10$ імовірність $p \approx 10^{-5}$, тобто стає несуттєвою.

Якщо кубіт на початку вимірювання знаходився в стані суперпозиції $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, то в вимірюванні буде працювати заселеність $|\alpha|^2$ стану $|0\rangle$. Заселеність $|\beta|^2$ стану $|1\rangle$ захоплена метастабільним рівнем і «не активна».

2. Для спінів в твердому тілі (**комірки Кейна**), тобто для спінів $I = 1/2$ ядер фосфору ^{31}P в безспіновому монокристалі кремнію ^{28}Si запропоновані багатостадійні методи вимірювання ядерного спіна на основі підсилення в квантовому вимірюванні. Суть такого квантового підсилення полягає в наступному: інформація про стан ядерного спіна I передається спіну S електрона атома ^{31}P ; від останнього залежить орбітальна хвильова функція; знаючи орбітальну хвильову функцію, можна організувати передачу зарядів (іонізацію); присутність або відсутність одиничного заряду електрона в околі нанотранзистора детектується вимірюванням струму через нього [47, 48]. Хоча кожна з перерахованих стадій розрахункової «естафети» й може бути виконана принципово, проте всі стадії разом ще не були продемонстровані.

3. Вимірювання стану кубітів на **надпровідних мезоструктурах** («квантові ящики» з куперівськими парами та SQUID з надпровідними струмами) зводяться до електричних вимірювань з накопиченням сигналу [27]. Так, наприклад, при реалізації квантового комп'ютера на SQUID метод вимірювання стану кубіта наступний: на кільце подається імпульс магнітного потоку, при цьому вид двоямного потенціалу стає не симетричним, висота потенціального бар'єру знижується, і система отримує можливість протунелювати зі стану $|1\rangle$ у новий стан із захопленням одного кванта магнітного потоку (див. рис. 4.19). Для нижнього стану $|0\rangle$ бар'єр залишається досить високим, щоб виключити можливість такого тунелювання. Факт захоплення додаткового кванта магнітного потоку реєструється за допомогою SQUID. Зрозуміло, що одноразове вимірювання не дозволяє визначити стан кубіта. Потрібні багаторазові вимірювання і накопичення статистики. Оскільки вимірювання руйнує стан кубіта, то кожного разу після його проведення систему знову потрібно привести в початковий стан і відрахувати потрібний час. Щоб до-

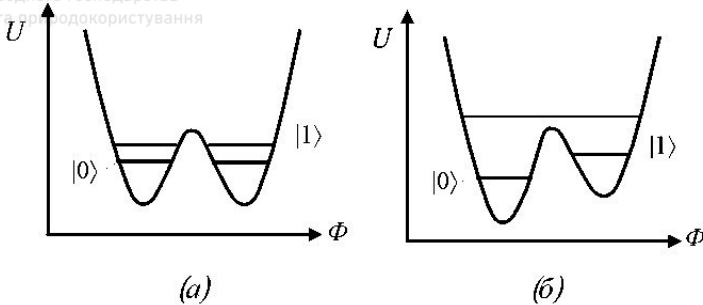


Рис. 4.19. Викривлення потенціальної ями джозефсонівського кубіта під дією магнітного потоку

сильно чітко простежити еволюцію кубіта, проводиться до 100000 вимірювань. В результаті можна отримати ймовірність перебування системи в стані $|1\rangle$ у залежності від часу.

Отже проблема вимірювання стану окремих кубітів – одна із найскладніших з точки зору фізичної реалізації квантового комп'ютера.

4.4. Квантова пам'ять

Квантові комп'ютери не можуть працювати без засобів зберігання інформації – квантової пам'яті. Вона використовується для зберігання інформації при проведенні квантових обчислень.

Як вже було показано вище, в якості квантової пам'яті можна використовувати рухомі іони в пастках Пауля, зосереджених в областях пам'яті (див. рис. 4.5). Проте вважається, що найбільш зручними для використання кубітами квантової пам'яті є фотони. Привабливість фотонів як кубітів квантової пам'яті полягає, по-перше, в можливості легко ізолювати їх від навколишнього середовища і домогтися унітарності еволюції квантового стану. По-друге, поширюючись зі швидкістю світла, електромагнітне поле ідеально підходить для передачі інформації на великі відстані. Нарешті, фотони відносно дешеві. Якщо остання властивість – безперечна перевага, то перші два зручні частково – для передачі квантової інформації. Через швидке поширення, електромагнітне поле слабо підходить для довготривалого зберігання квантової інформації. Довгі лінії затримки призводять до декогеренції, а значить, до втрати квантової



інформації. Фотони, як носії інформації, зараз переважно використовуються в квантовій криптографії.

Існування ідеальної системи зберігання квантової інформації забезпечується наявністю внутрішніх довгоживучих ступенів вільності атомів. Завдання створення квантової пам'яті зводиться до реалізації ефективного квантового інтерфейсу між світлом і речовиною. Проблема в тому, що наскільки просто ізолювати фотони від навколишнього середовища, настільки ж складно організувати досить ефективну взаємодію електромагнітного поля і речовини. Це може бути реалізованим, наприклад, при пропусканні лазерних імпульсів через оптично щільні домішкові кристали, що стають непрозорими під дією випромінювання лазера. Зчитування інформації можна здійснювати за допомогою явища електромагнітно - наведеної прозорості.

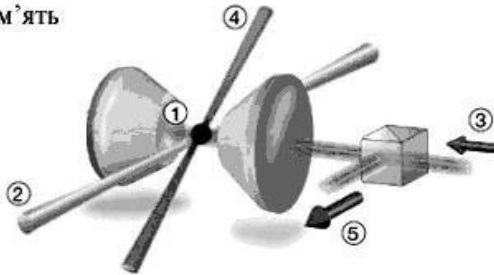
Використання цього явища дозволило значно знизити швидкість поширення світла у середовищі. В деяких випадках світло залишалося на місці чекаючи відновлення відповідних умов для продовження руху. На даний час розроблено методика зупинки світла в газовому середовищі, а також в твердому тілі — кристалі силікату ітрію (Y_2SiO_5), збагаченому атомами празеодиму. Ключову роль в зберіганні інформації тут відігравали домішки в кристалі – іони празеодима, фізичні властивості яких дозволяють тривалий час зберігати визначений квантовий стан. Це дозволяє реалізувати когерентність оптичної пам'яті.

Оскільки більшість електронних компонентів комп'ютера є твердотільними пристроями, цей метод може використовуватись при створенні квантових пристроїв зберігання інформації.

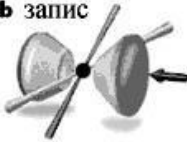
Слід зауважити, що при тривалій подорожі фотонів у середовищі стан їх кубіта може поступово деградувати, тобто відбувається декогеренція їх стану. Щоб уникнути втрат інформації застосовують квантові ретранслятори, які «ловлять» згасаючий сигнал, розшифровують його і знову випускають. Короткочасне зберігання і повторне випускання фотона якраз і відбувається в квантовій пам'яті.



а квантова пам'ять



б запис



в зберігання



д зчитування



● – ІОН

Національний університет

Рис. 4.20. Ілюстрація роботи одноатомної квантової пам'яті:

1. атом ^{87}Rb , захоплений в оптичний резонатор, який формується двома конічними дзеркалами;
2. дипольна пастка;
3. поглинається фотон;
4. π -поляризований лазерний промінь;
5. випромінений фотон.

Конструкції квантової пам'яті, що існували до цього часу, передбачали роботу при дуже низьких температурах. Крім того, вони були придатні лише для вузького інтервалу довжин хвиль фотонів і утримували їх нетривалий час. У 2004 році була створена квантова пам'ять, яка функціонує при температурі близькій до кімнатної. Основним компонентом приладу була скляна посудина з парами спінополяризованих атомів цезію. Атоми цезію опромінювались лазером, у яких інформація була закодована у фізичних властивостях фотонів. В результаті дії фотонів на атоми стани кубіта зберігалися в спінах електронів і ядер атомів. При потребі повторно лазерне опромінювання (з іншими характеристиками) дозволяло отримати інформацію у вигляді фотонів, що генерувалися атомами цезію і передати на фотоприймач.

Зараз в якості квантової пам'яті пропонується також одноатомна



квантова пам'ять, для реалізації якої розміщують єдиний атом в дуже високоякісному резонаторі і таким чином домагаються ефективного обміну квантовими станами між атомом і фотонами (див. рис. 4.20 а) [49]. При цьому інформація спочатку «переписується» з

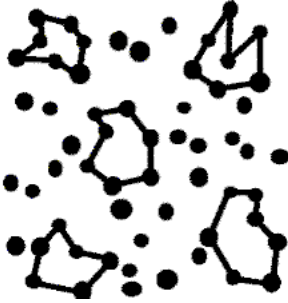


Рис. 4.21. Поширення світла через середовище з неоднорідним показником заломлення

поглиненого фотона в когерентну суперпозицію атомних станів (рис. 4.20 б), зберігається (рис. 4.20 с), а потім передається іншому фотону при його випромінюванні (рис. 4.20 д). Потрапивши в атом, «летючий кубіт» зберігає когерентність протягом ≈ 2 мс. Одноатомну пам'ять можна використовувати, зокрема, для сплетення віддалених один від одного атомних кубітів.

Німецьким вченим нещодавно вдалося продемонструвати ефект, коли світло, що йде крізь оптично неоднорідне середовище, надовго «застрягає» в ньому, потрапляючи на замкнуті орбіти руху (див. рис. 4.21). Для спостереження описаного ефекту потрібно приготувати таке середовище, в якому розподіл коефіцієнта заломлення був би максимально хаотичним (іншими словами, довжина вільного пробігу молекул не перевищувала б довжини хвилі світла) і відсутнє поглинання світла. Таким середовищем може бути, наприклад, суспензія TiO_2 (діоксид титану). Затримані фотони можуть довго кружляти всередині зразка TiO_2 по замкнутих орбітах, перш ніж вийти із середовища. При виготовленні речовини з дуже дрібними зернами діоксиду титану можливий ефект повної локалізації світла.

Вважається, що для розвитку квантових обчислювальних систем є важливим досягнення 50%-го рівня ефективності зберігання інформації, тоді як на даний момент найвищий показник складає 45%. Розробники квантової пам'яті на основі монокристалу Y_2SiO_5 показали, що ефективність розробленого ними пристрою становить 69% і може бути в подальшому збільшена за рахунок зміни геометричних розмірів цього кристалу.



Ще одним необхідним пристроєм квантового комп'ютера є квантова шина для обміну інформацією. «Віртуальна шина», по якій курсують біти інформації, може стати наріжним каменем в архітектурі квантових комп'ютерів. У працюючому комп'ютері жоден кубіт не відокремлений. Кубіти пам'яті повинні взаємодіяти один з одним, а також з блоками пам'яті, управління і вводу/виведення. Для полегшення зв'язку між ними пропонують замість квантової шини використовувати «літаючі» кубіти, що курсують всередині комп'ютера і зближуються для обміну інформацією. Модель перетворення стаціонарних кубітів в «літаючі», (найімовірніше – це фотони) може бути ще одним можливим вирішенням проблеми. Проте розробка необхідного з'єднання між речовиною і фотонами, або стаціонарними і «літаючими» кубітами пов'язана з багатьма труднощами.

Поки що неясно, який спосіб побудови квантового комп'ютера виявиться кращим. Сучасний етап досліджень характеризується пошуком можливостей їх побудови, використовуючи різноманітні області фізики. Оптимісти вважають, що серед різноманітних пропозицій можуть знайтися «проривні» ідеї, які наблизять день побудови повномасштабного квантового комп'ютера.

На думку багатьох учених, що працюють в області розробки квантового комп'ютера, результати наукових розробок наблизяться до стадії комерційного використання приблизно в 2020 році. До цього ж часу буде досягнута межа в існуючій напівпровідниковій технології, на якій базуються класичні комп'ютери. Відомо, що сьогодні доріжки, по яких в процесорі поширюється електричний сигнал, мають ширину близько сотні атомів. Подальше їх звуження можливе лише до певної межі.

Починають з'являтися фірми (наприклад, D-Wave), які планують пов'язати свою основну діяльність з квантовими комп'ютерами. Квантові комп'ютери цієї фірми представлені в таблиці 7.

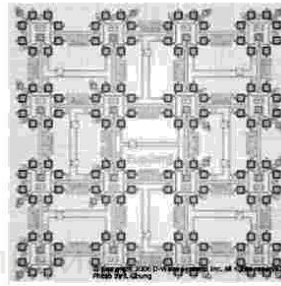
Таблиця 7

Квантові комп'ютери компанії D-Wave systems

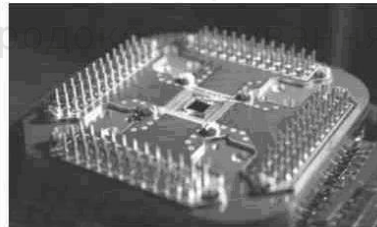
Назва	Кількість кубітів	Дата
Orion	16	13.02.2007
Leda	28	7.11.2008
D-Wave I	128	11.05.2011



Квантовий комп'ютер Orion (див. рис. 4.22) – це перша практична реалізація технології, що дозволяє здійснювати одночасно до 65536 обчислювальних потоків. Найновіший комп'ютер D-Wave I побудований на кремнієвому чипі містить 128 кубітів [50]. Кубіти в D - Wave I виконані у вигляді надпровідних джозефсонівських контактів (SQUID). В якості надпровідника використовується ніобій, охолоджений до декількох мілікельвінів, розміщений в котушці індуктивності. Електричний струм, що протікає по котушці, генерує



(а)



(б)

Рис. 4.22. Елементи квантового комп'ютера компанії D-Wave:(а). Мікрофотографія 16-кубітного квантового процесора «Оріон» (б). Надпровідна частина комп'ютера у зборі. Ліворуч – процесор, закріплений на криогенному носії

магнітне поле, а воно, у свою чергу, викликає зміну стану кубіта. Оскільки відомо, як ніобій реагує на магнітні поля, і параметри магнітних полів можна легко виміряти, то їх зміни, викликані ніобієм, можуть бути переведені в результат, який і є розв'язком задачі.

За своїм геометричним характеристикам D-Wave I є шафою, яка



вільно розміщується в добре екранованій кімнаті розмірами 10 м^2 . Основну частину цього об'єму займає система охолодження. Як впливає з табл. 7, реєстр комп'ютера D-Wave I містить 128 кубітів (див. рис. 4.23). Щоб точніше уявити собі його можливості, оцінімо обсяг пам'яті реєстра D-Wave I. Сто двадцять вісім кубітів квантового реєстра можуть містити 2^{128} різних 128-розрядних двійкових чисел ($2^{128} \approx 3,4 \times 10^{38}$). Одне 128-розрядне число записується у 16 байтах оперативної пам'яті (ОП) класичного комп'ютера. Тоді, якщо використати ОП класичного комп'ютера, для зберігання 2^{128} таких чисел знадобиться:

$$16 \times 3,4 \times 10^{38} = 5,44 \times 10^{39} \text{ байт} = 5,44 \times 10^{36} \text{ Кб}.$$

Таким чином, ємність квантового реєстра комп'ютера D-Wave I в $2,72 \times 10^{25}$ разів більша, ніж ємність ОП сучасного суперкомп'ютера, такого, наприклад, як Roadrunner (IBM). Його ОП складає приблизно 200 ТБ ($2 \times 10^{14} \text{ байт}$). Підкреслимо, що вартість

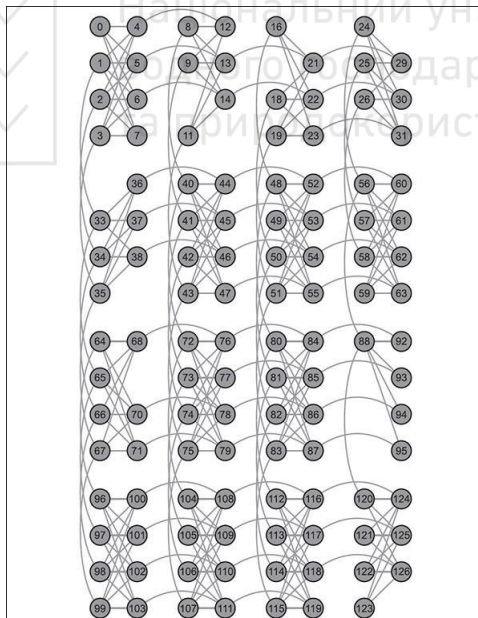


Рис. 4.23. Схема зв'язку надпровідних кубітів в процесорі D-Wave I, об'єднаних в 16 груп по 8 кубітів у кожній

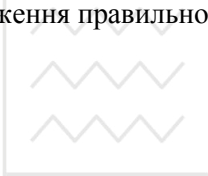
суперкомп'ютера Roadrunner перевищує \$110 млн., тоді як вартість



D-Wave I - \$10 млн. При цьому Roadrunner займає площу порівнянну з площею баскетбольного майданчика і споживає стільки електроенергії, скільки споживає невелике місто з населенням 10-20 тис. чоловік.

В 2012 році співробітники фірми D-Wave провели перевірку роботи квантового комп'ютера D-Wave I. В якості перевіркової обчислювальної задачі була вибрана задача побудови двокольорового графа чисел Рамсея. Розв'язок цієї задачі для комп'ютера є неймовірно складним завданням з точки зору ресурсів та обчислювальної потужності. На виконання цього завдання звичайному комп'ютеру середньої потужності знадобилося б **10^{250} років**.

Для розв'язку задачі Рамсея в обчисленнях було задіяно 28 кубітів комп'ютера D-Wave I, 56 кубітів використовувалися для пошуку і усунення помилок. І оскільки задача Рамсея була розв'язана математиками раніше іншими методами, видані комп'ютером результати збіглися з одним з восьми правильних розв'язків. Процес знаходження правильного розв'язку зайняв **270 мілісекунд**.





Bit – один розряд двійкового коду (двійкова цифра). Може приймати тільки два взаємно виключених значення: так/ні, 1/0, ввімкнено/вимкнено тощо. В електроніці одному двійковому розряду відповідає тригер, який має два стійких стани.

Бра-кет нотація – спеціальна зручна система позначень квантових станів, запроваджена Полем Діраком.

Вектор стану – сукупність характеристик, що однозначно визначають стан квантової системи. Поняття вектора стану є узагальненням поняття хвильової функції. Конкретний вигляд вектора стану залежить від представлення, яке використовується для опису квантової системи. Для запису векторів стану часто використовується бра-кет нотація.

Хвильова функція (хвильовий вектор) – окремий випадок вектора стану, одне з координатних його виражень, коли в якості базису переважно вибираються просторово-часові координати.

Гамільтоніан в квантовій теорії – це оператор повної енергії системи. Його спектр визначає усі можливі значення енергії квантової системи, які можна отримати при вимірюванні. Для більшості формалізмів квантової механіки (зокрема, картини Шредінгера, Гейзенберга та інші) гамільтоніан грає ключову роль, оскільки він безпосередньо пов'язаний із еволюцією квантової системи.

Гільбертів простір станів – узагальнення евклідового простору, яке допускає нескінченну розмірність, сукупність всіх потенційно можливих станів системи.

Декогеренція – процес втрати когерентності квантових станів. Фізичний процес, при якому порушується нелокальність і зменшується квантова сплетеність між складовими частинами системи в результаті її взаємодії з оточенням. При цьому підсистеми «проявляються» з нелокального стану у вигляді окремих самостійних елементів, вони обособлюються, відокремлюються одна від одної, набуваючи видимих локальних форм.

Дифракція – (від лат. diffractus – заломлений), в початковому розумінні – огинання хвилями перешкод, в сучасному ширшому – будь-яке відхилення при поширенні хвиль від законів геометричної оптики. При такому загальному тлумаченні дифракція хвиль переплітається з явищами поширення та розсіювання хвиль у неоднорідному середовищі.



рідних середовищах. Завдяки дифракції хвилі можуть потрапляти в область геометричної тіні: огинати перешкоди, стелитися вздовж поверхонь, проникати через невеликі отвори в екранах тощо. Наприклад, звук може бути почутий за рогом будинку, радіохвиля може проникнути за горизонт навіть без відбиття від іоносфери.

Енергія – відповідно до фундаментального визначення цього поняття в термінах станів, це функція стану системи. Функція в прямому математичному змісті, тобто відповідність між множиною станів і множиною дійсних чисел, коли кожному стану ставиться у відповідність одне (і тільки одне) значення енергії.

Завадостійкість – термін, що використовується для позначення максимального рівня сигналу «шуму», який будучи доданим до логічного сигналу за найнесприятливіших умов, не призводитиме до помилкової роботи схеми. Для ТТЛ - пристроїв завадостійкість складає приблизно 0,4 В.

Закон Мура – емпіричне спостереження, згідно якого починаючи з 1959 року кількість транзисторів в кристалі однієї інтегральної схеми протягом перших 15 років подвоювалася кожен рік, а після цього таке подвоєння відбувається за 1,5 року.

Змішаний стан – такий стан системи, який не можна описати вектором стану, а лише можна формалізувати матрицею густини. Характеризує відкриті квантові системи (такі, що взаємодіють з оточенням).

Інтерференція – одне з найбільш широко відомих проявів суперпозиції станів (наприклад, в оптиці). Це накладання когерентних хвиль, в результаті якого відбувається перерозподіл їх інтенсивності в просторі.

Квантовий комп'ютер – це обчислювальний прилад, який базується на використанні для обчислень таких квантовомеханічних явищ як суперпозиція та сплетення станів для перетворення вхідних даних у вихідні.

Квантовий паралелізм – принцип, що лежить в основі роботи квантового комп'ютера. В основі квантового паралелізму лежить використання при обчисленнях суперпозицій базових станів, що дозволяє одночасно проводити велику кількість обчислень з різними вихідними даними.

Квантовий прилад – прилад, принцип дії якого ґрунтується на законах квантової механіки. Управління приладом ззовні



(зовнішнім полем) відбувається також згідно рівнянню Шредінгера.

Квантова система – це словосполучення вказує не на розміри системи, а на *спосіб опису*: на те, що система описується методами квантової теорії в термінах станів.

Квантовий стан – повний набір даних (фізичних величин), які визначають властивості системи. Які саме дані визначають цей стан залежить від конкретної системи. В квантовій теорії закладений рецепт визначення такого набору даних.

Квантова теорія – це опис будь-якої системи в термінах *станів*, незалежно від того, велика ця система чи мала. Такий опис є на даний момент найбільш повним з усіх інших відомих описів фізичної реальності, тому висновки, отримані квантовою теорією, мають фундаментальне значення і формують сучасну концепцію природознавства в цілому.

Квантова точка – фрагмент провідника або напівпровідника, носії заряду (наприклад, електрони, дірки) якого обмежені в просторі по всіх трьох координатах.

Квантове число – індекс, який приписується стану квантової системи для його ідентифікації. Здебільшого квантові числа мають додаткове фізичне значення. Фізичний стан може характеризуватися не одним, а декількома квантовими числами.

Когерентні стани (когерентна суперпозиція) – суперпозиція чистих станів, тобто «накладення» окремих станів, у яких може перебувати замкнута система. Когерентність означає узгодженість поведінки окремих складових частин системи за допомогою нелокальної кореляції між ними.

Критерії ДіВінченцо – п'ять критеріїв - вимог до фізичних систем, на основі яких можливе створення квантового комп'ютера.

Кубіт (квантовий біт) – одиниця квантової інформації. На відміну від біта (одиниці класичної інформації), який приймає тільки два можливих значення (0 і 1), квантовий біт може перебувати в суперпозиції цих станів.

Логічний елемент – пристрій, призначений для обробки інформації в цифровій формі (послідовності сигналів високого - «1» і низького - «0» рівнів в двійковій логіці). Фізично логічні елементи можуть бути виконані механічними, електромеханічними (на електромагнітних реле), електронними (на діодах і транзисторах) тощо.

Логічна операція – в програмуванні операція над виразами логі-



чного (булевого) типу. Логічні вирази можуть приймати одне з двох значень - «істинно» чи «хибно». Логічні операції служать для отри-мання складних логічних виразів із простіших. У свою чергу, логіч-ні вирази зазвичай використовуються як умови для управління послідовністю виконання програми.

Магнітний момент – основна величина, яка характеризує маг-нітні властивості речовини. Джерелом магнетизму, згідно з класич-ною теорією електромагнітних явищ, є електричні макро- і мікро-струми. Магнітним моментом володіють елементарні частинки, атомні ядра, електронні оболонки атомів і молекул. Магнітний мо-мент елементарних частинок (електронів, протонів, нейтронів та інших) зумовлений існуванням власного моменту – спіна. У випад-ку плоского контура зі струмом магнітний момент обчислюється як $\vec{P} = IS\vec{n}$, де I – сила струму в контурі, S – площа контура, \vec{n} – век-тор нормалі до площі контура.

Матриця густини – матриця, за допомогою якої можна опису-вати як чисті стани (замкнуті системи), так і змішані, тобто відкриті системи, що взаємодіють зі своїм оточенням.

Мезоскопічна система – система, яка відрізняється від звичай-ної макроскопічної насамперед тим, що її розміри хоч і великі (за-звичай, одиниці мікрон), але недостатньо великі для того, щоб забу-ти її «квантове походження», - тобто в її поведінці істотні квантова інтерференція і дискретність складових системи частинок.

Моди резонатора – види коливань електромагнітної хвилі в об'ємному резонаторі.

Надпровідність – явище відсутності (рівності нулю) опору пос-тійному струму деяких матеріалів при температурі нижчій певної критичної, що супроводжується виштовхуванням слабкого (менше критичного) магнітного поля з об'єму матеріалу при переході його в надпровідний стан (ефект Мейснера-Оксенфельда).

Нелокальність – особливість сплєтених станів, яким неможливо поставити у відповідність локальні елементи реальності. Не має відношення до хвиль, полів, до класичних енергій будь-якого виду і типу. Квантова нелокальність не має класичного аналога і не може бути пояснена в рамках класичної фізики.

Нелокальні кореляції (квантові кореляції) – специфічний ефект квантової сплєтеності, який полягає в узгодженій поведінці окремих частин системи. Такий «надприродний» контакт віддалених



об'єктів класичною фізикою не пояснюється. На відміну від звичайних взаємодій, обмежених, наприклад, швидкістю світла, нелокальні кореляції діють миттєво, тобто зміна однієї частини системи в той же момент часу позначається на інших її частинах незалежно від відстані між ними. Квантова фізика розкрила механізм цього зв'язку, навчилася кількісно описувати її закони і поступово починає використовувати в технічних пристроях.

Обчислення – це процес, в ході якого відбувається визначена для кожної логічної операції (ЛО) нелінійна взаємодія потоків інформації один з одним і їх перетворення. Залежно від типу ЛО певним чином змінюється стан логічного елементу (ЛЕ), а інформація, що поступає на його входи, або передається далі, або якось перетворюється. Управління або перетворення відбувається під впливом зовнішніх сигналів. Це, наприклад, перемикання або інверсія («0» → «1», «1» → «0»), запис, скидання. На фізичному рівні носій інформації називається сигналом.

Прецесія – явище, при якому момент імпульсу тіла змінює свій напрям в просторі під дією моменту зовнішньої сили. Спостерігати прецесію можна, наприклад, за допомогою дзиги. Якщо її запустити, то спочатку вісь обертання дзиги буде вертикальною. Потім верхня точка дзиги поступово опускається і рухається по спіралі, яка розходиться. Це і є прецесія осі дзиги.

Принцип суперпозиції станів – якщо система може перебувати в різних станах, то вона може знаходитися в станах, які отримуються одночасним «накладанням» двох або більшої кількості станів з цього набору.

ПЗЗ – прилад із зарядовим зв'язком - відображає спосіб зчитування електричного потенціалу методом зсуву заряду від електрода до електрода.

Резонатор об'ємний електромагнітний – замкнута або майже замкнута порожнина з добре провідними стінками, всередині якої можуть існувати слабозатухаючі електромагнітні коливання. Найпростішою моделлю, яка описує спектральні властивості однорізного резонатора, є ідеальний інтерферометр Фабрі - Перо, що складається з двох нескінченних провідних пластин, між якими, послідовно відбиваючись, рухається плоска електромагнітна хвиля.

Рекогеренція – процес, зворотний декогеренції, який відновлює квантову сплетеність між складовими частинами системи.



Система – сукупність елементів множини *будь-якої природи*,
підсистема – підмножина вихідної системи.

Стан системи – реалізація за даних умов окремих потенціальних можливостей системи. Характеризується набором величин, які можуть бути вимірні спостерігачем. Задається вектором стану або матрицею густини.

Спін – власний момент імпульсу елементарних частинок, має квантову природу і не пов'язаний з переміщенням частинки як цілого. Спіном називають також власний момент імпульсу атомного ядра або атома; в цьому випадку спін визначається як векторна сума (обчислена за правилами додавання моментів в квантовій механіці) спінів елементарних частинок, що утворюють систему, і орбітальних моментів цих частинок, обумовлених їх рухом всередині системи. Спін вимірюється в одиницях \hbar (постійна Дірака) і дорівнює $\hbar I$, де I – характерне для кожного сорту частинок ціле (у тому числі нульове) або напівціле додатне число – так зване спінове квантове число, яке зазвичай називають просто спіном (одне з квантових чисел).

Сплетеність (англ.: entanglement) або **сепарабельність** – це особлива властивість квантових систем, яка проявляється в тому, що вони певним чином пов'язані між собою, навіть знаходячись на значній відстані одна від одної. Якщо стан однієї з систем змінюється, то одночасно змінюється і стан іншої. Ця особливість дозволяє спостерігачеві визначати стан сплетених систем, проводячи виміри лише для однієї з них.

Суперпозиція станів – див. принцип суперпозиції станів.

Тунелювання – фізичне явище, яке полягає в подоланні мікроскопічною потенціального бар'єру у випадку, коли її повна енергія (яка залишається при тунелюванні незмінною) менша висоти цього бар'єру.

Унітарне перетворення – дія на вектор унітарного оператора. Як приклад у п. можна привести обертання вектора на сфері Блоха. Такі обертання не змінюють довжини векторів і кут між двома векторами.

Унітарний оператор – обмежений лінійний оператор U на гільбертовому просторі H , який задовольняє співвідношенню: $U^*U = UU^* = I$, де U^* – ермітовоспряжений до U оператор, I – одиничний оператор. U зберігає скалярний добуток в гільбертовому



просторі. Так для будь яких векторів $|x\rangle$ і $|y\rangle$ справедливо

$$\langle Ux|Uy\rangle = \langle x|y\rangle.$$

Флуктуація (від лат. fluctuatio – коливання) – термін, що характеризує будь-яке коливання або будь-яку періодичну зміну. У квантовій механіці – випадкові відхилення від середнього значення фізичних величин, що характеризують систему великої кількості частинок; викликаються тепловим рухом частинок або квантовомеханічними ефектами.

Чистий стан (замкнута система) – такий стан системи, який може бути описаний як вектором стану так і матрицею густини.

Швидкодія комп'ютера (обчислювальна потужність комп'ютера) – кількісна характеристика швидкості виконання певних операцій комп'ютером. Одиниця вимірювання швидкодії MIPS (Million Instructions Per Second). MIPS – величина, яка показує скільки мільйонів інструкцій за секунду виконує процесор в деякому синтетичному тексті. Швидкодія суперкомп'ютерів вимірюється в **флопсах** (кількість операцій з плаваючою комою за секунду), а також похідних від неї.





1. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики [Текст] / П. А. М. Дирак. – М.: "Наука", 1979. – 408 с.
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка [Текст] / І. О. Вакарчук. – Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2004. – 784 с.
3. Омелянчук А. Н. Квантовые компьютеры и джозефсоновские кубиты [Текст] / А. Н. Омелянчук, М. А. Оболенский // Университеты: наука и просвещение / Харьковский национальный университет. – Харьков: Имперіал. – 2005. – № 2 (22) – С. 10–17; № 3 (23). – С. 12–19.
4. Валиев К. А. Квантовые компьютеры: можно ли их сделать «большими»? [Текст] / К. А. Валиев // УФН. – 1999. – т. 169, №6. – С. 691–694.
5. Валиев К. А. Квантовые компьютеры и квантовые вычисления [Текст] / К. А. Валиев // УФН. – 2005. – т. 175, №1. – С. 3–39.
6. Манин Ю. И. Вычислимое и невычислимое [Текст] / Ю. И. Манин. – М.: Сов. Радио. 1980. – 128 с.
7. Feynman R. Simulating physics with computers [Text] / R. Feynman // International Journal of Theoretical Physics. –1982. – Vol. 21, No. 6/7. – P. 467–488.
8. Feynman R. Quantum mechanical computers [Text] / R. Feynman // Foundations of Physics. – 1986. – Vol. 16, P. 507–531. (Originally appeared in Optics News, February 1985.)
9. Валиев К. А. От кванта к квантовым компьютерам [Текст] / К. А. Валиев, А. А. Кокин // «Природа», 2002. – №12. – С. 28–36.
10. Шор П. Полиномиальные по времени алгоритмы разложения числа на простые множители и нахождение дискретного алгоритма для квантового компьютера [Текст] / П. Шор // Сборник: «Квантовый компьютер и квантовые вычисления» вып.2. Ижевск. – 1999. – сС 200–247.
11. Zalka C. Simulating quantum systems on a quantum computer [Text] / C. Zalka // Proc. Roy. Soc. London. – 1998. – P. 313–322.
12. Гровер Л. К. Квантовая механика помогает найти иголку в стоге сена [Текст] / Л. К. Гровер // Сборник: «Квантовый компьютер и квантовые вычисления» вып.2. Ижевск. – 1999. – С. 101–109.
13. Preskill J. Reliable Quantum Computer [Text] / J. Preskill // Proc.Roy.Soc.London. – 1998. – v.A454, N1969, P. 385–410.



14. Shor P. Fault Tolerant Quantum Computation [Text] / P. Shor. – LANL, E-print quant-ph/9605011, 1996. – 11 p.
15. Китаев А. Ю. Квантовые вычисления: алгоритмы и исправление ошибок [Текст] / А. Ю. Китаев // УМН. – 1996. – т.52, вып.6 (318). – С. 54–111.
16. Steane A. Multiple particle interference and quantum error correction [Text] / A. Steane // Proc. Roy. Soc. London. – 1996. – P. 2551–2577
17. Loss D. [Text] / D. Loss, D. P. Di Vincenzo // Phys. Rev. – 1998. – A57. – P. 120.
18. Ожигов Ю. И. Квантовые вычисления. Учебно-методическое пособие [Текст] / Ю. И. Ожигов. – М.: МГУ, 2003. – 104 с.
19. Кронберг Д. А. Квантовая информатика и квантовый компьютер [Текст] / Д. А. Кронберг, Ю. И. Ожигов, А. Ю. Чернявский. – М.: МГУ, 2011. – 65 с.
20. Чивилихин С. А. Квантовая информатика Учебное пособие [Текст] / С. А. Чивилихин. – С.-Пб.: СПбГУИТМО, 2009. – 80 с.
21. Nielsen M. A. Quantum Computation and Quantum Information [Text] / M. A. Nielsen, I. L. Chuang. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000.
22. Hardy L. [Text] / L. Hardy // quant-ph/0101012; de Muynch W. M. quant-ph/0307235.
23. Кокин А. А. Твердотельные квантовые компьютеры на ядерных спинах [Текст] / А. А. Кокин. – М.: АНО «Институт компьютерных исследований», 2004. – 204 с.
24. Chuang I. L. Experimental realization of a Quantum algorithm [Text] / I. L. Chuang et al. // Nature. – 1998. – V. 393. – P. 143–146.
25. Jones J. A. Implementation of a Quantum search algorithm on a quantum computer [Text] / J. A. Jones, M. Mosca, R. S. Haasen // Nature, 1998. – V. 393. –P. 344–346.
26. Cory D.G. Experimental Quantum Error Correction [Text] / D.G. Cory et al. // quant-ph/9802018. – 1998. –6 Feb.
27. Войтович І.Д. Перспективи квантових обчислень з використанням надпровідності [Текст] / І. Д. Войтович, В. М. Корсунський // Математичні машини і системи. – 2008. – №4. – С. 23–56.
28. Wineland D. J. [Text] / D. J. Wineland et al. // Rev. Mod. Phys. 71 253 (1999).
29. Leibfried D. Transport quantum logic gates for trapped ions

[Text] / D. Leibfried E. Knill, C. Ospelkaus D. J. Wineland // Phys.Rev. – 2007. – A **76**, 032324.

30. Kane B. E. [Text] / B. E. Kane // Nature (London) 393 133 (1998)/

31. Валиев К. А. Квантовые компьютеры. Надежды и реальность [Текст] / К. А. Валиев, А. А. Кокин. – Ижевск, РХД, 2001. – 352 с.

32. Vrijen R. Electron Spin Resonance Transistor for Quantum Computation in Silicon [Text] / R. Vrijen, D. Di Vincenzo // Germanium Heterostructure. Phys. Rev. 2000. – Vol.62. – P. 1–10.

33. Неизвестный И. Г. Квантовый компьютер и его полупроводниковая элементарная база [Электронный ресурс] / (<http://psj.nsu.ru/lector/neizvestniy/>).

34. Nakamura [Text] / Nakamura et al. // Nature. – 1999. – 398. – P 786.

35. Van der Wahl [Text] / Van der Wahl et al. // Science. – 2000. – 290. – P. 773.

36. Ioffe L. B. [Text] / L. B. Ioffe et al. // Nature. – 1999. – 398. – P. 679.

37. Kolesnichenko Yu. [Text] / Yu. Kolesnichenko, A. Omelyanchouk, A. Zagoskin // ФНТ. – 2004. – № 7/8. – P. 714.

38. Born D. [Text] / D Born, V Shnyrkov et. al. // Phys. Rev. – 2004. – В **70**. – 180501 (R).

39. Shevchenko S. [Text] / S Shevchenko, A. Omelyanchouk et. al. // ФНТ. – 2005. – N 7. – 752.

40. Shevchenko S., Omelyanchouk A. [Text] / S Shevchenko, M. Amin et. al. // Physica. – 2002. –С368. – P. 310.

41. Dykman M. I. [Text] / M.I. Dykman, P. M. Platzman // quant-ph/0109030.

42. Brennen G. K. [Text] / G. K. Brennen, I. H. Deutsch, P. S. Jessen // quant-ph/9910031.

43. Freedman M. H. [Text] / M. H. Freedman et al. // Bull. Am. Mat. Soc. 40 31 (2002).

44. Kokin A. A. [Text] / A. A. Kokin // quant-ph/0002034; Benjamin S C, Bose S, quant-ph/0210157.

45. Cirac J. Quantum Computations with Cold Trapped Ions [Text] / J.Cirac, P.Zoller // Phys. Rev. – 1995. –Lett. 74, 4091.

46. Кулик С. П. Физические основы квантовой информации



[Електронний ресурс] /

<http://qopt.phys.msu.ru/speckurs/quantinf/quantinf.htm>.

47. Kane B. E. [Text] / B. E. Kane // Nature (London) **393**, 133 (1998).

48. Loss D. [Text] / D. Loss, D. P. Di Vincenzo // Phys. Rev. A **57** 120 (1998).

49. Specht H. P. [Text] / H. P. Specht et al. // Nature **473**, 190 (2011).

50. Правильщиков П. А. Квантовый параллелизм и квантовые D – алгоритмы [Електронний ресурс] / pavelp@ipu.ru.





ПЕРЕДМОВА	3
РОЗДІЛ 1. ЕЛЕМЕНТИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ	5
1.1. Корпускулярно-хвильовий дуалізм природи мікрочастинок.....	5
1.2. Рівняння Шредінгера	21
1.2.1. Окремі приклади стаціонарних квантових систем	24
1.3. Основні принципи побудови Періодичної системи хімічних елементів.	37
1.4. Спін атомного ядра	40
1.5. Надпровідність та ефекти Джозефсона	41
1.6. Ядерний магнітний резонанс	48
РОЗДІЛ 2. СТРУКТУРА КВАНТОВОГО КОМП'ЮТЕРА .	50
2.1. Поняття класичного та квантового комп'ютера	50
2.2. Принципи побудови та роботи ідеального квантового комп'ютера	56
РОЗДІЛ 3. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ ІНФОРМАТИКИ	67
3.1. Математичне представлення кубіта	67
3.2. Однокубітні логічні елементи	70
3.3. Приклади однокубітних елементів	74
3.4. Двокубітні стани та оператори	80
3.5. Спроба копіювання невідомого кубіта за допомогою двокубітного квантового елемента CNOT.....	90
3.6. Кубіт в гільбертовому векторному просторі станів.....	93
РОЗДІЛ 4. ФІЗИЧНІ ОСНОВИ РЕАЛІЗАЦІЇ КВАНТОВОГО КОМП'ЮТЕРА	100
4.1. Квантовий процесор	100
4.2. Фізична реалізація гейтів на іонах пастки Пауля.....	118
4.3. Операції читання в деяких реалізаціях квантового комп'ютера	128
4.4. Квантова пам'ять	132
4.5. Квантова шина.....	136
Бібліографічний опис	147