

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет
Кафедра теоретической физики

**Графен и квантовые вычисления: новейшие
тенденции в развитии фундаментальных принципов,
лежащих в основе информационных технологий.**

(учебное пособие)

НОВОСИБИРСК – 2010

В учебном пособии излагается дополнительный материал по курсу "Введение в физику твердого тела". Он посвящен графену и квантовым вычислениям как примерам новых достижений в области материаловедения и информационных технологий. На основе простой формы приближения сильной связи найден электронный спектр однослойного графена. Даются основы теории квантовых вычислений, включая обзор квантовых алгоритмов факторизации, поиска в неструктурированной базе данных и квантовой телепортации. Рассмотрена аппаратная реализация квантовых вентилях на основе физики частиц со спином $1/2$ в магнитном поле.

Пособие предназначено для студентов, обучающихся на отделении информатики физического факультета НГУ, но и студенты физического отделения найдут для себя интересные дополнительные темы по квантовой механике. Материал по квантовым вычислениям и квантовой информации может оказаться полезен и для студентов факультета информационных технологий.

Автор

докт. физ.-мат. наук, доц. А. А. Кожевников

Учебное пособие подготовлено в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ на 2009-2018 г. г.

©Новосибирский государственный университет, 2010

Оглавление

Предисловие	4
1 Элементы теории кристаллической структуры	7
1.1 Три типа кубических решеток	7
1.2 Рассеяние как метод экспериментального исследования кристаллических структур	9
1.3 Волновой пакет электронов в периодическом поле.	13
2 Графен и его электронный спектр.	15
2.1 Приближение сильной связи.	16
2.2 Прямая и обратная решетка графена	22
2.3 Закон дисперсии электронов в графене	24
2.4 "Уравнение Дирака" для электронов в графене	28
3 Графен в магнитном поле.	34
3.1 Уровни Ландау электронов в графене	34
3.2 Квантовый целочисленный эффект Холла в полупроводниковых гетероструктурах.	41
3.3 Особенности квантового эффекта Холла в графене.	45
4 Концептуальные основы квантовых вычислений.	47
4.1 Кубиты и основные квантовые вентили.	49
4.2 Квантовый параллелизм и задача Дойча.	55
4.3 Квантовое преобразование Фурье.	57
4.4 Поиск и исправление ошибок в квантовых вычислениях.	58
5 Основные квантовые алгоритмы.	63
5.1 Квантовый алгоритм факторизации Шора.	63

5.2	Алгоритм Гровера поиска в неструктурированной базе данных.	69
5.3	Телепортация неизвестного квантового состояния.	74
6	Квантовые компьютеры и квантовые IT-технологии.	81
6.1	Возможная элементная база квантового компьютера. . . .	81
6.2	Частица со спином $1/2$ в магнитном поле как пример кубита.	83
6.3	Двухкубитовый вентиль в системе частиц со спином $1/2$. .	90
6.4	Достоинства и недостатки метода ЯМР в жидкой фазе. . .	98
6.5	Задача Элитцера-Вайдмана и идея принципа квантовой передачи данных.	100
	Заключение	106
	Литература	107

Предисловие

Базовыми элементами курса "Введение в физику твёрдого тела"(ВФТТ) для студентов отделения информатики физического факультета НГУ являются основы нерелятивистской квантовой механики (часть 1) и статистической физики (часть 2). Вместе с тем очевидно, что возникновение новых направлений даже в таких классических разделах как вычислительные науки и фундаментальное материаловедение делает совершенно необходимым ознакомление студентов этого отделения с новейшими достижениями в этих областях, появившимися в последнее время.

В настоящем учебном пособии освещаются ряд тем, которые в 2006-2010 гг. в том или ином виде входили в материал лекций и семинарских занятий в рамках курса ВФТТ, но не нашли своего отражения в основном учебнике по данному курсу [1]. Речь идет о приближении сильной связи для уровней энергии электрона в периодическом поле, в рамках которого находится электронный спектр графена, являющегося двумерной кристаллической модификацией углерода. Графен обладает уникальными свойствами как с точки зрения фундаментальной физики (эффективно безмассовые носители, квантовый эффект Холла при комнатных температурах и т.д.), так и в качестве перспективного вещества для нужд наноэлектроники. Важность и актуальность этой тематики подчеркивается недавним присуждением Нобелевской премии 2010 года за открытие и исследование свойств графена.

На основе квантовой механики частиц спина $s = 1/2$ вводятся основные понятия теории квантовых вычислений. Рассмотрены кубиты, основные одно- и двух-кубитовые вентили. Объясняется принцип квантового параллелизма в теории квантовых вычислений. Подробно разбирается квантовый алгоритм факторизации Шора, алгоритм поиска в неструктурированной базе данных и квантовая телепортация. Рассмотр-

рены примеры реализации кубитов и простейших квантовых вентилях системой частиц со спином $1/2$ во внешнем магнитном поле.

Пособие содержит большое число задач. В основном они носят технический характер и включены для того, чтобы перенести в них некоторые выкладки из основного текста и побудить тем самым читателя к активному изучению материала "с карандашом и бумагой в руках". Тем не менее, есть и более трудные задачи. Некоторые из них являются адаптацией на уровень студенческой аудитории серьезных научных работ из таких журналов, как *Physical Review Letters*, *Reviews of Modern Physics* и других. Представляется, что доля таких задач должна (и будет) увеличиваться, поскольку эта тактика помогает быстрее выводит студентов на уровень настоящей исследовательской деятельности.

Разумеется, пособие по дополнительным главам общефизического курса не ставит своей целью осветить все детали. Это предмет специальных курсов. Однако даже в рамках общего вводного курса по физике твердого тела необходимо показать, что изучаемые студентами отделения информатики физического факультета положения нерелятивистской квантовой механики и статистической физики являются не догмами, а реальными фундаментальными основами современных информационных технологий. Поэтому можно надеяться, что пособие окажется полезным и для студентов факультета информационных технологий НГУ. Задача-минимум, поставленная при написании этого пособия, состоит в том, чтобы студент, встретив в литературе или в интернете такие термины как *графен*, *кубит*, *квантовый алгоритм факторизации* и т.д., представлял себе, о чем идет речь. Задачей-максимум было бы побудить заинтересованных студентов к более подробному изучению представленных новых идей и, возможно, принять активное участие в их разработке.

В тексте в основном используется система единиц СГСЭ, в которой длина измеряется в сантиметрах, масса в граммах, энергия в эргах. Приведем для справок приближенные численные значения фундаментальных физических постоянных, которые будут использоваться в тексте. Эти же величины необходимо использовать при решении задач из домашних заданий и на семинарских занятиях.

1. Элементарный заряд $|e| = 4.8 \times 10^{-10}$ единиц СГСЭ.
2. Масса электрона $m_e = 9.1 \times 10^{-28}$ г.

3. Масса протона $m_p = 1.67 \times 10^{-24}$ г. С принятой здесь точностью масса нейтрона равна массе протона.
4. Скорость света $c = 3 \times 10^{10}$ см/с.
5. Постоянная Планка $\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-27}$ эрг·с.
6. Электрон-вольт (эВ): $1 \text{ эВ} = 1.6 \times 10^{-12}$ эрг.
7. Постоянная Больцмана $k_B = 1.38 \times 10^{-16}$ эрг/кельвин.
8. Единица измерения сечения реакции $1 \text{ барн} = 10^{-24}$ см².

Значения фундаментальных физических постоянных с наибольшей достигнутой точностью приводятся раз в два года в обзоре физики элементарных частиц (Review of Particle Physics). Интернет-страница этого издания находится по адресу

<http://pdg.lbl.gov/>

Глава 1

Элементы теории кристаллической структуры

В основной части курса в рамках одномерной модели были разобраны особенности спектра квантовой частицы в периодическом потенциале решетки. Сформулируем основные понятия, касающиеся идеальной решетки в трех измерениях. Под кристаллической решеткой будем понимать регулярное расположение атомов в пространстве. Решающее значение имеют симметрии решетки. Под симметрией понимаются такие преобразования решетки, которые совмещают ее с собой. Основные преобразования включают сдвиги, повороты на определенные углы, отражения и комбинации перечисленных преобразований. Е.С.Федоровым в 1895 г. были найдены 230 возможных пространственных групп преобразований решетки. Имеется полная классификация кристаллических систем и классов, соответствующих группам преобразований.

1.1 Три типа кубических решеток

Из всех преобразований мы коснемся лишь преобразований сдвига $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}_n$, совмещающих решетку с собой. Решетка, полученная в результате преобразований сдвига, называется решеткой Бравэ. Вектор сдвига

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.1)$$

представляется в виде линейной комбинации с целочисленными коэффициентами $n_{1,2,3}$ трех основных векторов трансляции $\mathbf{a}_{1,2,3}$. Эти векторы

не должны лежать в одной плоскости; в остальном их выбор произволен. Узел решетки задается вектором \mathbf{R}_n с определенным значением трех целых чисел $n_{1,2,3}$. С каждым узлом решетки можно связать *базис* из ν атомов, располагающихся относительно \mathbf{R}_n в точках $x_i\mathbf{a}_1 + y_i\mathbf{a}_2 + z_i\mathbf{a}_3$, где $i = 1, 2, \dots, \nu$, $|x_i|, |y_i|, |z_i| < 1$. Можно сказать, что кристаллическая структура = решетка + базис. Известны кристаллы, где базис состоит из более чем 10^3 атомов!

Мы рассмотрим лишь простейшие кубические решетки с базисом из одного атома. Простая кубическая решетка (ПК) имеет основные векторы

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_x, \mathbf{a}_2 = a\mathbf{e}_y, \mathbf{a}_3 = a\mathbf{e}_z, . \quad (1.2)$$

Здесь и далее $\mathbf{e}_{x,y,z}$ есть орты вдоль соответствующих направлений, a — длина ребра куба. Объемноцентрированная кубическая (ОЦК) решетка задается векторами

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z - \mathbf{e}_x), \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z - \mathbf{e}_y), \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z), \quad (1.3)$$

тогда как гранецентрированная кубическая (ГЦК)-векторами

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z), \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z), \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y). \quad (1.4)$$

Выберем узел решетки и отложим от него три вектора $\mathbf{a}_{1,2,3}$. Параллелепипед, имеющий в качестве ребер указанные векторы называется *элементарной ячейкой*. Ее объем равен

$$v = (\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]). \quad (1.5)$$

Если объем кристалла V , то число элементарных ячеек $N = V/v$.

- *Задача.* Вычислить объем элементарной ячейки для простой, гранецентрированной и объемноцентрированной кубических решеток.

Кристаллические плоскости задаются с помощью *индексов Миллера* (i, j, k) . Разберем способ их введения на примере простой кубической решетки. Если плоскость отсекает по осям x, y, z соответственно расстояния a, b, c , ее уравнение имеет вид

$$F(x, y, z) \equiv x/a + y/b + z/c - 1 = 0.$$

Берем обратные величины $(1/a, 1/b, 1/c)$ и выносим за скобку $1/abc$. Получим тройку целых чисел (bc, ac, ab) . Произведения bc, ac, ab соответственно обозначают i, j, k и заключают в круглые скобки (i, j, k) . Это и есть индексы Миллера, характеризующие ориентацию кристаллической плоскости. Нормаль \mathbf{n} к поверхности, заданной уравнением $F(x, y, z) = 0$, получается взятием градиента $\mathbf{n} \propto \nabla F$. Для указанной кристаллической плоскости

$$\mathbf{n} \propto (1/a, 1/b, 1/c) \propto (bc, ac, ab).$$

Тем самым кристаллическая плоскость, заданная индексами Миллера (i, j, k) , может быть эквивалентно охарактеризована и нормалью к ней, обозначаемой теми же самыми индексами Миллера, но взятыми в квадратные скобки: $[i, j, k]$. Для произвольных решеток вместо единичных ортов берутся векторы $\mathbf{a}_{1,2,3}$, а отсекаемые плоскостью отрезки на этих векторах измеряют в длинах $|\mathbf{a}_{1,2,3}|$, соответственно.

1.2 Рассеяние как метод экспериментального исследования кристаллических структур

Кристаллическая структура возникает, в конечном счете, за счет кулоновского взаимодействия друг с другом электронов и ядер макроскопически большого числа атомов элементов, участвующих в формировании структуры. Поэтому решение уравнения Шредингера для нахождения конфигурации, имеющей минимальную энергию, в реалистических ситуациях оказывается практически невозможным. Тем не менее, кулоновский характер сил позволяет сделать качественное утверждение, что характерный масштаб периодической структуры по порядку величины должен быть равен боровскому радиусу $a_B = \hbar^2/m_e e^2 \sim 10^{-8}$ см. Экспериментальный метод определения типа кристаллической структуры состоит в исследовании углового распределения частиц, упруго рассеянных на кристалле. Неупругое рассеяние используется для изучения спектра возбуждений в кристаллах. Исторически первыми для исследования структуры кристаллов были использованы рентгеновские лучи. Затем применялось рассеяние электронов и, уже после создания атомных реакторов, нейтронов. При рассеянии электронов и нейтронов можно было

контролировать как угол рассеяния, так и энергию до и после рассеяния. Совместное знание распределения рассеянных частиц по углу и энергии позволяет определить не только пространственную структуру расположения атомов, но и энергетический спектр конденсированного тела.

- *Задача.* Оценить энергию (в единицах эВ) соответственно фотонов, электронов, нейтронов, необходимую для изучения пространственной структуры кристаллов.
- *Задача.* Нейтрон неупруго рассеивается в жидком гелии, находящемся при температуре, которую приближенно можно считать нулевой. Найти минимальную скорость нейтрона, при которой это неупругое рассеяние сопровождается рождением фонона. *Указание.* Применить закон сохранения энергии и импульса к процессу нейтрон \rightarrow нейтрон + фонон. Закон дисперсии фонона имеет вид $\epsilon(\mathbf{p}) = c_s |\mathbf{p}|$, где c_s есть скорость звука в жидком гелии.

Хотя механизмы рассеяния в каждом из случаев разные, качественный анализ угловых распределений может быть проведен в терминах борновской формулы для амплитуды рассеяния:

$$f \propto \langle \mathbf{k}_f | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}_i \rangle = \int d^3r U(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ есть переданный волновой вектор. Если рассеяние упругое, то $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$. Вид потенциала взаимодействия $U(\mathbf{r})$ зависит от специфики взаимодействия падающей частицы с кристаллом, однако для наших целей существенно лишь то, что потенциал можно представить в виде суммы вкладов отдельных атомов, расположенных в точках \mathbf{R}_n :

$$U(\mathbf{r}) = \sum_n U_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n).$$

Тогда амплитуда рассеяния представляется в виде

$$f \propto S(\mathbf{q}) F_0(\mathbf{q}),$$

где $F_0(\mathbf{q}) = \int d^3r U_0(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ есть формфактор рассеяния на отдельном атоме, а величина

$$S(\mathbf{q}) = \sum_n e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n} \quad (1.6)$$

называется *структурным фактором*, Он напрямую зависит от расположения атомов в кристаллической структуре, см. (1.1). Угловое распределение рассеянных частиц дается дифференциальным сечением рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto |S(\mathbf{q})|^2 = \left| \sum_n e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n} \right|^2.$$

Пики в зависимости от угла рассеяния θ возникают при выполнении условия $\mathbf{q}\mathbf{R}_n = 2\pi K$, где K – любое целое число. В этом случае $d\sigma/d\Omega \propto N^2$ пропорционально квадрату числа атомов в кристалле. Условию

$$\mathbf{q}\mathbf{R}_n = 2\pi K$$

можно удовлетворить, выбрав переданный волновой вектор в виде

$$\mathbf{q} = \mathbf{b}_l = l_1\mathbf{b}_1 + l_2\mathbf{b}_2 + l_3\mathbf{b}_3,$$

где $l_{1,2,3} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, а векторы $\mathbf{b}_{1,2,3}$ есть основные векторы *обратной решетки*. Непосредственная проверка показывает, что их можно взять в виде

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{v}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{v}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{v}, \quad (1.7)$$

где v – объем элементарной ячейки (1.5). Поскольку уравнение $\mathbf{b}_l\mathbf{r} = 2\pi K$ определяет кристаллическую плоскость, вектор нормали к ней $\boldsymbol{\nu} \propto \mathbf{b}_l$. Но, с другой стороны, вектор нормали к кристаллической плоскости характеризуется индексами Миллера. Поэтому те значения переданных волновых векторов (или углов рассеяния) при которых наблюдаются резкие максимумы в угловой зависимости сечения рассеяния, напрямую дают индексы Миллера кристаллических плоскостей, от которых происходит отражение. Покажем, что уравнение

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f = \mathbf{b}_l \quad (1.8)$$

фактически совпадает с условием *Вульфа-Брэгга*

$$2d \sin \theta_{\widehat{\mathbf{k}_i \mathbf{n}}} = n\lambda, \quad (1.9)$$

означающим, что отражение от двух соседних кристаллических плоскостей происходит в фазе. Здесь $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}_i|$ – длина волны падающего излучения, $\theta_{\widehat{\mathbf{k}_i \mathbf{n}}}$ – угол между направлением падающей волны и кристаллической плоскостью, d – расстояние между кристаллическими плоскостями,

n -целое число. Действительно, условия $\mathbf{b}_l \mathbf{R}_n = 2\pi(K+1)$ и $\mathbf{b}_l \mathbf{R}_{n'} = 2\pi K$ задают две соседние кристаллические плоскости, перпендикулярные \mathbf{b}_l , и, следовательно, параллельные друг другу. Поэтому расстояние между ними равно

$$d = 2\pi/|\mathbf{b}_l|.$$

С другой стороны, возводя уравнение (1.8) в квадрат, получим $4\mathbf{k}_i^2 \sin^2 \theta_{\widehat{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_f}}/2 = \mathbf{b}_l^2$, где $\theta_{\widehat{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_f}}$ -угол рассеяния. Поскольку $\theta_{\widehat{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_f}} = 2\theta_{\widehat{\mathbf{k}_i \mathbf{n}}}$, то

$$2|\mathbf{k}_i| \sin \theta_{\widehat{\mathbf{k}_i \mathbf{n}}} = |\mathbf{b}_l|.$$

Выражая здесь волновой вектор через длину волны, а расстояние длину вектора обратной решетки через расстояние между плоскостями, приходим к (1.9).

Как известно из решения одномерной задачи в периодическом потенциале с постоянной решетки a , физически различные значения квазиимпульса лежат в первой зоне Бриллюэна,

$$-\pi/a \leq q \leq \pi/a.$$

Чтобы определить границы этой зоны, нужно построить обратную решетку (в одномерном случае ее постоянная равна $2\pi/a$), провести векторы к ближайшим соседям (число которых в одном измерении равно двум) и поделить эти векторы пополам. Такой же рецепт годится и в случае двух и трех пространственных измерений. По прямой решетке (1.1) строим обратную (1.7). В обратной решетке выбираем какой-то узел и проводим векторы в направлении ближайших соседей. Затем проводим плоскости, перпендикулярные этим векторам и делящие их пополам. Эти плоскости и будут гранями первой зоны Бриллюэна.

- *Задача.* Найти основные векторы обратной решетки для простой, гранецентрированной и объемноцентрированной кубических решеток.
- *Задача.* Рассчитать геометрический структурный фактор $S(\mathbf{q})$ для трех указанных кубических решеток. Зная, что при дифракции рентгеновских лучей с длиной волны 1.542 ангстрема на кристалле наблюдались брэгговские углы 12.3° , 14.1° , 20.2° , 24.0° , 25.1° , 29.3° , 32.2° и 33.1° , определить соответствующие индексы Миллера. Выяснить, к какому типу кубических решеток, ГЦК или ОЦК,

принадлежит решетка исследуемого кристалла и найти размер ее элементарной ячейки.

1.3 Волновой пакет электронов в периодическом поле.

Волновая функция электрона в периодическом поле кристаллической решетки представляет собой блоховскую волну

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V^{1/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}).$$

Это выражение можно интерпретировать как плоскую волну, характеризующуюся квазиимпульсом \mathbf{p} , но модулированную функцией $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$, периодичной с периодом решетки. Здесь V — объем кристалла. Блоховская волновая функция дает состояние с совершенно неопределенной координатой. Как и в случае свободных частиц в квантовой механике, для построения пространственной плотности вероятности частицы, имеющей конечную протяженность, возьмем волновой пакет. Он составлен из волн со слегка различающимися квазиимпульсами

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &\propto \int_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}_0| < \Delta p} d^3 p e^{i[\mathbf{p}\mathbf{r} - \epsilon(\mathbf{p})t]} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \approx e^{i[\mathbf{p}_0\mathbf{r} - \epsilon(\mathbf{p}_0)t]} u_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) \times \\ &\times \int_{-\Delta p < \mathbf{p}' < \Delta p} d^3 p' e^{i\mathbf{p}'(\mathbf{r} - t\frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}})}. \end{aligned}$$

Последний интеграл в этой формуле берется и равен

$$2^3 \times \frac{\sin \left[\frac{\Delta p_x}{\hbar} \left(x - t \frac{\partial \epsilon}{\partial p_x} \right) \right]}{x - t \frac{\partial \epsilon}{\partial p_x}} \cdot \frac{\sin \left[\frac{\Delta p_y}{\hbar} \left(y - t \frac{\partial \epsilon}{\partial p_y} \right) \right]}{y - t \frac{\partial \epsilon}{\partial p_y}} \cdot \frac{\sin \left[\frac{\Delta p_z}{\hbar} \left(z - t \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \right) \right]}{z - t \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z}}.$$

Распределение вероятности в пространстве $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ имеет резкий пик, центр которого движется по закону $\mathbf{r} = t \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}}$. Поэтому электрон можно представить как образование, локализованное в пространственной области $\Delta x \sim \hbar/\Delta p_x$, $\Delta y \sim \hbar/\Delta p_y$, $\Delta z \sim \hbar/\Delta p_z$ и движущееся со скоростью

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}}, \quad (1.10)$$

которая называется групповой скоростью. Зависимость $\epsilon \equiv \epsilon(\mathbf{p})$ суть закон дисперсии электрона в кристалле. Она может быть довольно сложной и сильно отличаться от закона дисперсии свободного электрона $\epsilon = \mathbf{p}^2/2m$. Примеры такой зависимости будут появляться в следующих главах. Одной из задач физики твердого тела как раз и является теоретическое и экспериментальное установление зависимости энергии от квазиимпульса как электронов, так и других квазичастиц (фононов, магнонов и т.д.)

Можно установить закон движения волнового пакета электрона под действием приложенного электрического поля \mathbf{E} . Изменение энергии волнового пакета должно равняться работе электрического поля над зарядом:

$$\Delta\epsilon = \frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{p}}\Delta\mathbf{p} = e\mathbf{E}\mathbf{v}\Delta t.$$

С учетом (1.10) получаем уравнение движения волнового пакета электрона

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E}. \quad (1.11)$$

Хотя по форме оно имеет вид второго закона Ньютона, описываемая им физическая картина другая из-за того, что \mathbf{p} есть не импульс, а квазиимпульс, определенный лишь с точностью до вектора обратной решетки. Это выражение имеет квазиклассический характер. Оно удобно для формулировки кинетического уравнения для функции распределения электронов, с помощью которого вычисляется проводимость металла.

Глава 2

Графен и его электронный спектр.

Одним из самых удивительных элементов таблицы Менделеева является углерод. Его выделенная роль обусловлена тем, что углерод входит в состав органических молекул. Долгое время он являлся (и до сих пор является) одним из источников энергии. В течение тысячелетий были известны такие *аллотропы* углерода как *алмаз* (кристалл с гранецентрированной кубической решеткой, в которой атом углерода соединяется с четырьмя соседними атомами, находящимися в вершинах тетраэдра), *графит* (представляет собой стопку плоскостей, соединенных слабыми ван-дер-ваальсовыми силами, в которых атомы углерода упакованы в виде гексагональных (шестиугольных) решеток; с 1564 г. используется как карандаш, *сажа* (аморфная форма углерода). В 1985 г. были открыты *фуллерены*, представляющие собой выпуклые замкнутые многогранники, составленные из чётного числа атомов углерода. В 90-гг. начали активно изучаться *углеродные нанотрубки*, история открытия которых прослеживается до 1953 г. В нанотрубках гексагональная плоская решетка сворачивается в цилиндр, длина которого на много порядков может превышать диаметр, порядок величины которого от одного до десятков нанометров.

- *Задача.* Найти (в кельвинах) температуру, при которой возбуждись бы уровни энергии энергии поперечного электрона в нанотрубке радиусом 2 ангстрема. *Указание.* Решить уравнение Шредингера для свободной частицы, движение которой ограничено окружностью радиуса R .

Однако сама плоская гексагональная структура атомов углерода-*графен*

была открыта совсем недавно в 2004 г. А. Геймом и К. Новоселовым-физиками российского происхождения, работающими в Манчестерском университете. За открытие и исследование физических свойств графена А.Гейму и К.Новоселову была присуждена Нобелевская премия по физике 2010 года.

После второй мировой войны физические свойства графита весьма активно изучались в связи с его применением в ядерной энергетике в уран-графитовых реакторах. К 1947 г. относится появление первой работы об электронном спектре плоского графита (графена), выполненной Уоллесом. Найдем электронный спектр графена в приближении сильной связи, как это и было сделано в работе Уоллеса. Но сначала разберем суть указанного приближения.

2.1 Приближение сильной связи.

Как правило, задача о нахождении уровней энергии электрона в периодическом поле реальных кристаллов не может быть решена точно. Приходится применять различные приближенные методы. Одним из таких методов является *приближение сильной связи*. Рассмотрим его идею на примере нахождения уровней энергии $E < 0$ в одномерном периодическом поле:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - G \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - an)\psi = E\psi. \quad (2.1)$$

Вспомним, что точное решение этого уравнения Шредингера приводит к зависимости энергии от квазиимпульса $E(q) = -\frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2m}$, где \varkappa определяется решением трансцендентного уравнения

$$\cos qa = \operatorname{ch} \varkappa a - \frac{mG}{\hbar^2 \varkappa} \operatorname{sh} \varkappa a.$$

При $mGa/\hbar^2 \gg 1$ можно найти приближенный явный вид зависимости энергии от квазиимпульса

$$E(q) \approx -\frac{mG^2}{2\hbar^2} \left(1 + 4e^{-mGa/\hbar^2} \cos qa \right). \quad (2.2)$$

Далее зависимость энергии от квазиимпульса будем называть *законом дисперсии*.

Допустим, однако, что точное решение этой задачи неизвестно. Попытаемся найти приближенный ответ, зная, что при условии $mGa/\hbar^2 \gg 1$ в нулевом приближении можно пренебречь влиянием всех других δ -ям на какую-то выделенную. Уровень энергии и волновая функция электрона в одиночной δ -яме имеют вид

$$E_0 = -mG^2/2\hbar^2,$$

$$\psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0}e^{-\kappa_0|x|},$$

где $\kappa_0 = mG/\hbar^2$ (см. следующую задачу).

- *Задача.* Решив уравнение Шредингера, получить уровень энергии и нормированную волновую функцию электрона в поле $U(x) = -G\delta(x)$. Далее найти волновые функции стационарных состояний $\psi_s(x)$ (симметричная) и $\psi_a(x)$ (антисимметричная) в поле двух симметрично расположенных одномерных δ -ям, $U(x) = -G[\delta(x - a) + \delta(x + a)]$ и оценить величину отношений $|\psi_L(a)/\psi_L(-a)|$ и $|\psi_R(-a)/\psi_R(a)|$ в предельном случае $mGa/\hbar^2 \gg 1$. Здесь волновые функции $\psi_{R,L}(x) = [\psi_s(x) \pm \psi_a(x)]/\sqrt{2}$ описывают частицу, локализованную в указанном пределе на правой, левой яме соответственно.

Очевидно, что волновая функция $\psi_0(x - an)$ описывает электрон, локализованный при $x = an$. Попытаемся найти решение уравнения Шредингера с волновой функцией вида

$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_0(x - an). \quad (2.3)$$

Согласно общим принципам квантовой механики, $|C_n|^2$ задает вероятность оказаться в состоянии $\psi_0(x - an)$, т.е. C_n является амплитудой вероятности того, что электрон локализован вблизи точки $x = an$. Подставим волновую функцию указанного вида в (2.1) и учтем, что ψ_0 является решением уравнения Шредингера в одиночной δ -яме,

$$-\hbar^2\psi_0''/2m - G\delta(x)\psi_0 = E_0\psi_0.$$

Получим уравнение

$$(E - E_0) \sum_n C_n \psi_0(x - na) = -G \sum_n \sum_{l \neq n} C_n \delta(x - la) \psi_0(x - na). \quad (2.4)$$

Умножим его слева на $\psi_0^*(x - n'a)$ и проинтегрируем по x . При этом возникнет, во-первых, выражение для так называемого *интеграла перекрытия*

$$I_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^*(x - an') \psi_0(x - an) = (1 + \kappa_0 a |n - n'|) e^{-\kappa_0 a |n - n'|}. \quad (2.5)$$

При $\kappa_0 a \gg 1$ в нулевом порядке по экспоненциально малому параметру $e^{-\kappa_0 a}$ имеем приближенно $I_{nn'} \approx \delta_{nn'}$. Во-вторых, появляются матричные элементы потенциальной энергии взаимодействия

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^*(x - an') [-G\delta(x - al)] \psi_0(x - an) = -G\kappa_0 e^{-\kappa_0 (|l - n'| + |l - n|)}.$$

- *Задача.* Показать, что интеграл перекрытия и матричный элемент оператора потенциальной энергии электрона в случае δ -ям имеют приведенный выше вид.

Вместо дифференциального уравнения Шредингера получим алгебраическое уравнение для нахождения уровней энергии и коэффициентов разложения C_n :

$$(E - E_0)C_{n'} \approx -G\kappa_0 \sum_{n \neq n'} e^{-\kappa_0 a |n - n'|} C_n \approx -G\kappa_0 e^{-\kappa_0 a} (C_{n'-1} + C_{n'+1}). \quad (2.6)$$

Учтено, что слагаемые с $|n - n'| \geq 2$ экспоненциально подавлены, поэтому их можно отбросить. Ищем решение (2.6) в виде плоской волны

$$C_n = \alpha e^{iqan}. \quad (2.7)$$

Подстановка его в (2.6) приводит к выражению

$$E(q) = E_0 - \frac{2mG^2}{\hbar^2} e^{-mGa/\hbar^2} \cos qa.$$

Ответ получен в пределе $\kappa_0 a \gg 1$. Он совпал с соответствующим пределом точного решения (2.2).

Заметим, что найденная волновая функция (2.3) удовлетворяет условию

$$\psi(x + a) = e^{iqa} \psi(x),$$

т.е. является правильной волновой функцией с точки зрения теоремы Блоха. В самом деле, сдвинем координату x на постоянную решетки a . Получим

$$\begin{aligned}\psi(x+a) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \psi_0(x-an+a) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{n+1} \psi_0(x-an) = \\ &= e^{iqa} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \psi_0(x-an) = e^{iqa} \psi(x).\end{aligned}$$

При выводе было учтено, что согласно (2.7) справедливо соотношение $C_{n+1} = e^{iqa} C_n$.

Теперь можно сделать обобщение, состоящее в том, что не обязательно считать, что потенциал отдельного одномерного "атома" представляет собой δ -функцию. Единственное требование состоит в том, что в нем должно быть по крайней мере одно связанное состояние. Как известно, в симметричной одномерной яме такое состояние всегда есть. Матричный элемент "атомного" потенциала между состояниями $\psi_0(x-an)$ и $\psi_0(x-a(n\pm 1))$ называется *параметром перескока* (*hopping parameter* в англоязычной литературе). Будем обозначать его $-\gamma$. В рассмотренном выше примере

$$\gamma = G\kappa_0 e^{-\kappa_0 a}.$$

В реальных ситуациях этот параметр определяется экспериментально. Отметим экспоненциальную зависимость параметра перескока от расстояния между атомами в решетке в данной простой модели. Это и оправдывает учет перескока электрона только на ближайший соседний узел. На качественном уровне вывод об экспоненциальном подавлении вероятности перескока электрона на соседний узел остается справедливой и в случае двух и трех измерений.

Сформулируем теперь суть приближения сильной связи. Сначала сделаем это в одномерном случае для одного атома в элементарной ячейке [2]. Пусть $C_n \equiv C_n(t)$ есть амплитуда вероятности электрону оказаться локализованным на "атоме" с координатой $x = an$ в момент времени t в одномерном "кристалле" с постоянной решетки a . Если пренебречь влиянием остальных атомов, энергия электрона будет E_0 . В следующем приближении электрон может перепрыгнуть направо или налево на соседний "атом". Амплитуда вероятности такого перескока равна $-\gamma$. Если

пренебречь возможностью перескока на атомы, следующими за ближайшими (хотя это и не обязательно!), уравнение Шредингера для такой ситуации можно переписать в виде

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = E_0 C_n - \gamma(C_{n-1} + C_{n+1}). \quad (2.8)$$

Волновая функция стационарного состояния с энергией E подчиняется уравнению

$$(E - E_0)C_n = -\gamma(C_{n-1} + C_{n+1}),$$

имеющему решение $C_n \propto e^{iqan}$, где

$$E(q) = E_0 - 2\gamma \cos qa.$$

Здесь q есть квазиимпульс. Если быть точным, то квазиимпульсом следует называть величину $\hbar q$, а q будет тогда квазиволновым числом. Ниже в целях экономии места не будем делать различия между этими величинами, называя их обе квазиимпульсом. Для достаточно малых значений квазиимпульса $qa \ll 1$ можно разложить косинус в ряд и получить приближенно

$$E(q) \approx E_0 - 2\gamma + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}. \quad (2.9)$$

Зависимость энергии от квазиимпульса оказалась очень похожа на закон дисперсии нерелятивистского свободного электрона за исключением того, что вместо его массы сюда вошла величина

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma a}.$$

Она называется *эффективной массой* электрона и определяется его взаимодействием с кристаллической решеткой. Если амплитуда вероятности перескока электрона на соседний узел велика, то эффективная масса мала, и наоборот. Таким образом, эффективная масса характеризует инерционные свойства электрона в кристаллической решетке. Она определяется энергией взаимодействия электрона с атомом решетки и не имеет никакого отношения к массе электрона в пустом пространстве.

Можно переписать C_n как $C(x_n = an)$. Если ввести одномерные "векторы" $\delta_1 = a$, $\delta_2 = -a$ от данного атома, находящегося в точке

$x = an$, к его ближайшим соседям, то приведенное уравнение можно переписать в виде

$$i\hbar \frac{dC(x_n)}{dt} = E_0 C(x_n) - \gamma [C(x_n + \delta_1) + C(x_n + \delta_2)],$$

который допускает обобщение на случаи двух и трех пространственных измерений. В предположении, что параметр перескока одинаков для прыжков электрона ко всем ближайшим соседям, указанное обобщение приближения сильной связи на случай большего числа пространственных измерений можно записать в виде уравнения

$$i\hbar \frac{dC(\mathbf{R}_n)}{dt} = E_0 C(\mathbf{R}_n) - \gamma \sum_l C(\mathbf{R}_n + \delta_l). \quad (2.10)$$

\mathbf{R}_n пробегает по атомам кристаллической решетки, l нумерует ближайших соседей. Подстановка решения в виде плоской волны

$$C(\mathbf{R}_n) \propto e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n}$$

приводит к закону дисперсии электрона

$$E(\mathbf{q}) = E_0 - \gamma \sum_l e^{i\mathbf{q}\delta_l}. \quad (2.11)$$

Здесь снова предполагалось, что в элементарной ячейке кристалла имеется один атом. Выбор начала отсчета энергии произволен, поэтому обычно полагают $E_0 = 0$.

- *Задача.* В приближении сильной связи получить явный вид закона дисперсии электрона в простой кубической, гранецентрированной кубической и объемноцентрированной кубической решетках. Найти эффективную массу электрона, выраженную через параметры a и γ . Вычислить вектор групповой скорости электрона и найти его значение на границе первой зоны Бриллюэна. Считать, что в элементарной ячейке находится один атом.

В случае более чем одного атома необходимо вводить свою амплитуду вероятности пребывания электрона на каждом из атомов аналогично тому, как это делалось в основной части курса для колебаний кристаллических решеток с более чем одним атомом в элементарной ячейке.

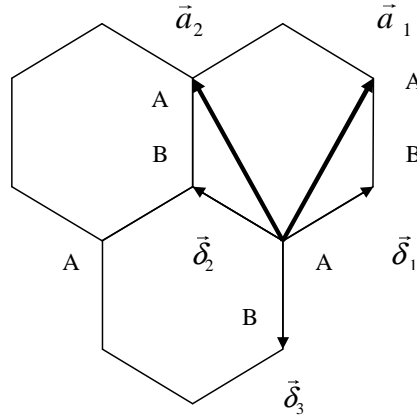


Рис. 2.1: Кристаллическая структура графена. $\mathbf{a}_{1,2}$ -базисные векторы решетки. $\delta_{1,2,3}$ -векторы в направлении ближайших соседей.

2.2 Прямая и обратная решетка графена

Кристаллическая решетка графена состоит из двух подрешеток A и B , см. рис. 2.1. Базисными векторами решетки являются векторы

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3), \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 3).\end{aligned}\quad (2.12)$$

Здесь и далее

$$a \approx 1.42\text{\AA} \quad (2.13)$$

есть расстояние между соседними атомами углерода в графене. В приближении сильной связи требуется задать векторы в направлении ближайших соседей. Из рис. 2.1 очевидно, что таких векторов три:

$$\begin{aligned}\delta_1 &= \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \\ \delta_2 &= \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1), \\ \delta_3 &= \frac{a}{2}(0, -2).\end{aligned}\quad (2.14)$$

Почему нельзя считать, что кристаллическая структура графена содержит один атомо в элементарной ячейке? Кажалось бы, выбрав базисные векторы $\mathbf{a}_1 = \delta_1$ и $\mathbf{a}_2 = \delta_1$ можно приписать каждому атому радиус-вектор $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$ с целочисленными коэффициентами. Однако

определение кристаллической структуры подразумевает, что окружение данного атома не меняется при сдвиге на \mathbf{R}_n . Между тем из рис. 2.1 можно понять, что сдвиг, допустим, на вектор $\mathbf{a}_1 = \boldsymbol{\delta}_1$ приводит к тому, что у атома А не окажется по соседству того атома В, который был на конце вектора $\boldsymbol{\delta}_2$ до сдвига. Окружение изменилось, то есть решетка не перешла в себя. Именно сдвиги на линейную комбинацию векторов (2.12), вместе с необходимостью введения двух подрешеток А и В, являются преобразованиями симметрии, переводящими решетку графена в себя.

Для двумерной структуры не удастся применить формулы для нахождения векторов обратной решетки (1.7), поэтому следует вернуться к исходному определению векторов обратной решетки

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi N,$$

где N есть целое число. Из этого соотношения можно найти базисные векторы обратной решетки графена

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, 1), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3}, 1). \end{aligned} \quad (2.15)$$

- *Задача.* Показать, что базисные векторы обратной решетки графена действительно имеют указанный вид. Вычислить площадь элементарной ячейки для прямой и обратной решеток графена.

Вся обратная решетка задается векторами $\mathbf{b}_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2$, где $m_{1,2}$ — целые числа. Как указано в главе 1, для построения первой зоны Бриллюэна нужно в обратной решетке из данного узла нарисовать векторы в направлении ближайших соседей и провести перпендикулярные им линии, проходящие через середину этих векторов. Получается гексагональная (шестиугольная) зона Бриллюэна, показанная на рис. 2.2. У ней шесть углов, но только два из них, обозначенные как K и K' , независимы. Как видно из рис. 2.2, векторы в направлении неэквивалентных углов первой зоны Бриллюэна имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \frac{2\pi}{3a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right), \\ \mathbf{K}' &= \frac{2\pi}{3a} \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right). \end{aligned} \quad (2.16)$$

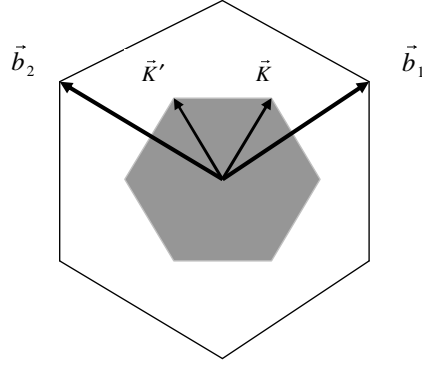


Рис. 2.2: Обратная решетка в графене. $\mathbf{b}_{1,2}$ -базисные векторы обратной решетки. Заштрихована первая зона Бриллюэна. \mathbf{K} , \mathbf{K}' - векторы конических (дираковских) точек обратной решетки.

Остальные получаются из \mathbf{K} и \mathbf{K}' добавлением линейных комбинаций базисных векторов обратной решетки (2.15) с целочисленными коэффициентами.

- *Задача.* Выразить векторы в направлении оставшихся углов первой зоны Бриллюэна через \mathbf{K} , \mathbf{K}' , \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 .

2.3 Закон дисперсии электронов в графене

Поскольку в кристаллической структуре графена имеется две подрешетки A и B , необходимо ввести два комплексных числа C_A и C_B , описывающие амплитуды вероятности пребывания электрона соответственно на узле A , B . Будем отсчитывать энергию от энергии электрона, локализованного на атоме при $a \rightarrow \infty$, тогда $E_0 = 0$. Уравнение Шредингера для этих амплитуд в приближении сильной связи эквивалентно двум уравнениям

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_A(\mathbf{r}_n)}{dt} &= -\gamma[C_B(\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\delta}_1) + C_B(\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\delta}_2) + C_B(\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\delta}_3)], \\ i\hbar \frac{dC_B(\mathbf{r}_n)}{dt} &= -\gamma[C_A(\mathbf{r}_n - \boldsymbol{\delta}_1) + C_A(\mathbf{r}_n - \boldsymbol{\delta}_2) + C_A(\mathbf{r}_n - \boldsymbol{\delta}_3)]. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Здесь через \mathbf{r}_n обозначен радиус-вектор атома в решетке, $\mathbf{r}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$, $n_{1,2}$ — целые числа. Для графена параметр перескока равен при-

ближенно

$$\gamma \approx 2.8 \text{ эВ.} \quad (2.18)$$

Ищем решения уравнений (2.17) в виде

$$\begin{pmatrix} C_A(\mathbf{r}_n) \\ C_B(\mathbf{r}_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar} + i\mathbf{r}_n\mathbf{k}\right). \quad (2.19)$$

Тогда постоянные α и β будут удовлетворять уравнениям

$$E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -\gamma \begin{pmatrix} 0, & e^{ik\delta_1} + e^{ik\delta_2} + e^{ik\delta_3} \\ e^{-ik\delta_1} + e^{-ik\delta_2} + e^{-ik\delta_3}, & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Условием разрешимости этой системы является равенство нулю ее определителя, откуда получаем спектр (Уоллес 1947):

$$E = \pm E(\mathbf{k}) = \pm\gamma |e^{ik\delta_1} + e^{ik\delta_2} + e^{ik\delta_3}|. \quad (2.21)$$

Знаки энергии интерпретируются аналогично тому, как это делается в случае полупроводников. Свободные состояния с $E \geq 0$ пусты. Они могут быть заполнены электронами, возбуждаемыми из заполненных состояний с энергией $E < 0$. Если "вынуть" электрон из состояния с отрицательной энергией, то образуется дырка с положительной энергией. После подстановки в (2.21) выражений для векторов в направлении ближайших соседей (2.14) получим выражение

$$E = \pm\gamma \sqrt{1 + 4 \cos \frac{ak_x \sqrt{3}}{2} \cos \frac{3ak_y}{2} + 4 \cos^2 \frac{\sqrt{3}ak_x}{2}}, \quad (2.22)$$

из которого видно, что закон дисперсии для электронов в графене представляет собой довольно-таки сложное выражение. Графическое изображение закона дисперсии (2.22) представлено на рис. 2.3. Однако для электронных состояний с достаточно малым квазиимпульсом $|\mathbf{k}| \ll \hbar/a$ полученное выражение можно сильно упростить.

Для этого вернемся к выражению (2.21). В силу того что

$$e^{i\mathbf{K}\delta_1} + e^{i\mathbf{K}\delta_2} + e^{i\mathbf{K}\delta_3} = 0, \quad (2.23)$$

(аналогично для \mathbf{K}'), энергия в двух независимых углах первой зоны Бриллюэна обращается в нуль, $E(\mathbf{K}(\mathbf{K}')) = 0$.

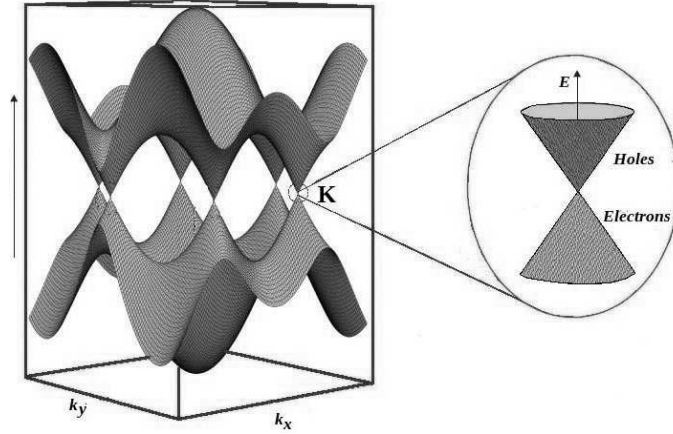


Рис. 2.3: Зависимость энергии электрона от квазиимпульса в графене. Увеличена область вблизи конических (или дираковских точек) \mathbf{K} (\mathbf{K}') (2.16). "Holes" ("electrons") означает соответственно незанятые (занятые) состояния при температуре, равной нулю. Если из области занятых состояний ("electrons") вынуть электрон и поместить его в область свободных состояний ("holes"), то в зоне занятых состояний образуется дырка, а в зоне свободных состояний возникнет электрон. Картина спектра и заполнение зон такие же, как в чистом полупроводнике с щелью, равной нулю.

- *Задача.* Проверить справедливость соотношения (2.23).

Разложим энергию (2.21) вблизи \mathbf{K} , \mathbf{K}' ,

$$\mathbf{k} = \mathbf{K}(\mathbf{K}') + \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad (2.24)$$

считая, что $ap/\hbar \ll 1$. Тогда

$$\sum_a e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_a} \approx \sum_a e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_a} + i \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \sum_a e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_a} \delta_a.$$

суммирование идет по ближайшим соседям $a = 1, 2, 3$. Такое же соотношение справедливо при замене $\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}'$. С учетом равенств

$$\begin{aligned} \sum_a \delta_a e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_a} &= \frac{3ia}{2} e^{i\pi/3} (1, -i), \\ \sum_a \delta_a e^{i\mathbf{K}' \cdot \delta_a} &= -\frac{3ia}{2} e^{-i\pi/3} (1, i) \end{aligned} \quad (2.25)$$

получим приближенное выражение для энергии электрона в графене, справедливое вблизи обеих точек \mathbf{K} и \mathbf{K}' :

$$E(p_x, p_y) = \pm \frac{3}{2\hbar} a\gamma \sqrt{p_x^2 + p_y^2} = \pm \frac{3}{2\hbar} a\gamma |\mathbf{p}| \quad (2.26)$$

Знак $+$ ($-$) в данном случае отвечает электронам (дыркам). Оказывается, что вблизи указанных точек закон дисперсии имеет такой же вид как для безмассовых частиц, а роль скорости света играет скорость $v = \frac{3}{2\hbar}a\gamma$.

- *Задача.* Проверить справедливость приближенного выражения (2.26) вблизи точек \mathbf{K} и \mathbf{K}' .

Поверхность постоянной энергии вблизи указанных точек представляет собой окружность, а геометрическое место точек (E, p_x, p_y) образует конус. Сами точки \mathbf{K} и \mathbf{K}' называются *коническими*. По причине, которая будет указана ниже, в литературе их называют еще *дираковскими* точками. Обе дираковские точки импульсного пространства вносят одинаковый вклад в энергию, т.е. имеется *вырождение*. В нулевом магнитном поле каждое состояние с импульсом \mathbf{p} имеет кратность вырождения $4 = 2 \times 2$. Один множитель 2 есть вырождение по проекции спина электрона на ось z , второй множитель учитывает вклад обеих дираковских точек. Поверхность Ферми отделяет занятые электронные состояния от свободных. В рассматриваемом случае она вырождается в две дираковские точки. В ферми-системе энергия, отсчитанная от поверхности Ферми, линейно зависит от импульса, отсчитанного от импульса Ферми:

$$E - E_F \approx \left. \frac{\partial E}{\partial |\mathbf{p}|} \right|_{p=p_F} (|\mathbf{p}| - p_F) = v_F(p - p_F).$$

Ввиду того что закон дисперсии в графене линеен по импульсу, можно считать, что скорость Ферми v_F связана с параметрами кристаллической решетки графена соотношением

$$v_F = \frac{3}{2\hbar}a\gamma. \quad (2.27)$$

Поскольку $a = 1.42 \text{ \AA}$, $\gamma = 2.8 \text{ эВ}$, $v_F \approx 9 \times 10^7 \text{ см/с}$, т.е. $v_F \approx c/300$.

- *Задача.* Найти плотность состояний $\nu(E) \equiv dN/dE$ для закона дисперсии в графене в приближении линейной зависимости. Указание. Напомним, что плотность состояний определяется как $\nu(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$, где E_n есть уровни энергии системы в зависимости от набора квантовых чисел n , характеризующих ее. Для плотности одночастичных состояний в квазиклассическом случае можно использовать приближенную формулу

$$\nu(E) \approx g \int \frac{d^D r d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \delta(H - E),$$

где H есть энергия частицы, выраженная через импульс и координату (гамильтониан), D -размерность координатного пространства, g -кратность вырождения, т.е. число состояний с одинаковой энергией.

- *Задача.* Найти концентрацию электронов (дырок) и электронную теплоемкость при постоянной площади в графене в зависимости от температуры T , считая, что графен является бесщелевым полупроводником без примесей. Как изменится концентрация электронов (дырок), если графен находится в однородном электрическом поле $\mathbf{E} = \mathcal{E}_0(1, 0)$, параллельном плоскости графенового листа? Пусть $T = 1\text{К}$, а напряженность электрического соответствует напряжению $V_g = 10$ вольт. Оценить отношение концентраций для случаев термического возбуждения и внешнего электрического поля.

Подчеркнем, что сделанное приближении длинных волн $|\mathbf{p}| \ll \hbar/a$ аналогично приближению, применяемому при рассмотрении колебаний атомов в кристаллической решетке вблизи положения равновесия. Там довольно сложный закон дисперсии акустических колебаний $\omega \propto \sin ka/2$ в пределе длинных волн переходит в простой линейный закон $\omega \propto k$.

2.4 "Уравнение Дирака" для электронов в графене

Произведем в уравнении нахождения электронного спектра графена (2.20) разложение (2.24). Сделаем это вначале вблизи \mathbf{K} . Для этого учтем соотношение (2.23) и соотношения (2.25). Получим систему уравнений

$$E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = v_F \begin{pmatrix} 0 & e^{i\pi/3}(p_x - ip_y) \\ e^{-i\pi/3}(p_x + ip_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

В соответствии с методами линейной алгебры найдем сначала значения энергии E , приравняв нулю определитель матрицы в правой части (2.28). Получим

$$E = \pm v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2},$$

что совпадает с (2.26). *Постулируем* условие нормировки амплитуд вероятности α и β в виде $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Нормированные таким условием решения системы уравнений (2.28) запишутся следующим образом. Вблизи дираковской точки \mathbf{K} имеем

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\pm} \\ \beta_{\pm} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i(\varphi_p - \pi/3)} \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

где верхний (нижний) знак следует брать для энергии $E = +v_F|\mathbf{p}|$ ($E = -v_F|\mathbf{p}|$). Здесь и далее

$$\varphi_p = \operatorname{arctg} \frac{p_y}{p_x} \quad (2.30)$$

есть азимутальный угол в плоскости (p_x, p_y) двумерного импульсного пространства.

Двумерное пространство решений задачи об электронном спектре графена (2.19) вызывает ассоциации с пространством состояний частицы со спином $1/2$. Такие состояния описываются в квантовой механике двухрядными спинорами, то есть столбцами из двух комплексных чисел, определенным образом преобразующихся при поворотах системы координат. Именно, при повороте на угол θ вокруг оси, характеризуемой единичным вектором $\boldsymbol{\nu}$, спинор преобразуется как

$$\begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} = e^{-i\theta(\boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\sigma})/2} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ обозначает тройку матриц Паули:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

В квантовой механике обычного спина $1/2$ верхняя (нижняя) компонента спинора есть амплитуда вероятности обнаружить проекцию спина на ось $s_z = +1/2$ ($s_z = -1/2$).

В случае графена физика задачи описывается столбцом также из двух комплексных чисел $C_{A,B}$ (2.19). Однако они, вообще говоря, не обязаны подчиняться спинорному закону преобразования (2.31) при поворотах в плоскости xy . Тем не менее физики, которые занимаются теоретическим и экспериментальным исследованием свойств графена, предложили буквально связать это формальное свойство решений с так называемым *псевдоспином*. Однако в рассматриваемом случае псевдоспина в

графене верхняя (нижняя) компонента спинора описывает амплитуду вероятности обнаружить электрон на узле A (B) кристаллической решетки. Поскольку закон преобразования спиноров при поворотах (2.31) содержит половинные углы, псевдоспинорное решение в графене (2.29) удобно переписать в эквивалентной форме через половинный угол. Для этого можно воспользоваться тем, что комплексные амплитуды вероятности $C_{A,B}$ можно умножать на общий фазовый множитель. Это следует из того, что плотности вероятности нахождения электрона на узлах A и B равны $|C_A|^2$ и $|C_B|^2$. Умножая решение (2.29) на $e^{-i(\varphi_p/2-\pi/6)}$ получим

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\pm} \\ \beta_{\pm} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i(\varphi_p/2-\pi/6)} \\ e^{i(\varphi_p/2-\pi/6)} \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

От слагаемого $\pi/6$ в показателе экспоненты можно избавиться, совершив поворот в xu -плоскости на угол $\pi/6$. Действительно, вводя в соответствии с (2.31) новый спинор

$$\begin{pmatrix} \alpha'_{\pm} \\ \beta'_{\pm} \end{pmatrix} = e^{-i\sigma_z\pi/6} \begin{pmatrix} \alpha_{\pm} \\ \beta_{\pm} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_p/2} \\ \pm e^{i\varphi_p/2} \end{pmatrix},$$

убеждаемся в том, что он удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \pm|E| \begin{pmatrix} \alpha'_{\pm} \\ \beta'_{\pm} \end{pmatrix} &= v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha'_{\pm} \\ \beta'_{\pm} \end{pmatrix} = \\ &= v_F(p_x\sigma_x + p_y\sigma_y) \begin{pmatrix} \alpha'_{\pm} \\ \beta'_{\pm} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

где σ_x и σ_y есть две из трех матриц Паули (2.32). Если считать матрицы Паули σ_x, σ_y компонентами двумерного матричного вектора $\boldsymbol{\sigma}_{\perp} = (\sigma_x, \sigma_y)$ и ввести спинор

$$\phi_{\mathbf{K}} \equiv \phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \phi_{A,\mathbf{K}}(\mathbf{p}) \\ \phi_{B,\mathbf{K}}(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \alpha'_{\pm} \\ \beta'_{\pm} \end{pmatrix}$$

и двумерный вектор $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$, то полученное уравнение (2.34) для обоих знаков энергии можно переписать в виде

$$E\phi_{\mathbf{K}} = v_F(\boldsymbol{\sigma}_{\perp}\mathbf{p})\phi_{\mathbf{K}}. \quad (2.35)$$

Здесь индекс \mathbf{K} у спинора ψ явно указывает на то, что уравнение справедливо при достаточно малых отклонениях квазиимпульса от дираковской точки \mathbf{K} .

- *Задача.* Повторить проведенное рассмотрение в окрестности второй дираковской точки \mathbf{K}' и показать, что соответствующее уравнение имеет вид

$$E\phi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{p}) = v_F(-\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}_\perp^*)\phi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{p}). \quad (2.36)$$

Отсюда видно, что единственное изменение по сравнению с разложением около точки \mathbf{K} состоит в замене $p_x \rightarrow -p_x$.

Уравнения для двухрядных спиноров (2.35) и (2.36) можно объединить в одно уравнение для четырехрядного спинора

$$\Phi(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \phi_{A,\mathbf{K}}(\mathbf{p}) \\ \phi_{B,\mathbf{K}}(\mathbf{p}) \\ -\phi_{B,\mathbf{K}'}(\mathbf{p}) \\ \phi_{B,\mathbf{K}'}(\mathbf{p}) \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Оно имеет вид

$$v_F(\boldsymbol{\Sigma}_\perp \mathbf{p})\Phi(\mathbf{p}) = E\Phi(\mathbf{p}), \quad (2.38)$$

где 4×4 вектор-матрица $\boldsymbol{\Sigma}_\perp$ имеет вид

$$\boldsymbol{\Sigma}_\perp = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_\perp & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma}_\perp \end{pmatrix}.$$

- *Задача.* Проверить сделанное утверждение.

Удобство такой записи состоит в том, что уравнение (2.38) для спинора Φ имеет точно такой же вид как уравнение Дирака для безмассового электрона в релятивистской квантовой теории в случае движения, ограниченного двумя пространственными измерениями. Именно по этой причине точки импульсного пространства \mathbf{K} и \mathbf{K}' называются дираковскими точками. Отличие от истинного безмассового электрона состоит в том, что роль скорости света в случае графена играет скорость Ферми v_F , а роль спина играет *псевдоспин*, оператор которого и представляется матрицей $\boldsymbol{\Sigma}_\perp$.

А как быть с обычным электронным спином? Разумеется, эта квантовая характеристика никуда не девается и в случае графена. Для ее учета каждую из компонент квазиспинора Φ (2.37) следует в свою очередь считать двухкомпонентным спинором, описывающим амплитуду вероятности электрону иметь проекцию спина на ось z , равную $+1/2$ или $-1/2$. Следовательно, для полного описания состояния электрона в графене

необходимо указать, во-первых, на каком из узлов кристаллической, A или B , он локализуется в приближении, запрещающем его перескок на соседний узел. Во-вторых, от какой из двух дираковских точек импульсного пространства, \mathbf{K} или \mathbf{K}' следует отсчитывать его импульс в приближении длинных волн $|\mathbf{p}| \ll \hbar/a$. Это условие эквивалентно условию $E \ll \gamma$. Хотя экспериментальное значение $\gamma \approx 3$ эВ, в экспериментах с графеном не наблюдалось отклонений от линейного закона дисперсии вплоть до напряжений порядка нескольких десятков вольт. В-третьих, необходимо указать значения проекции на ось z его спина. Итого, требуется восемь комплексных чисел.

Аналогия задачи о нахождении уровней энергии электрона в графене с релятивистской квантовой механикой безмассового заряженного фермиона породила большое число теоретических работ, в которых предлагалось моделировать в графене эффекты взаимодействий такого фермиона с внешними полями. Интерес к таким задачам подогревался тем обстоятельством, что для исследования взаимодействий реальных ультрарелятивистских электронов нужны дорогостоящие ускорители заряженных частиц, тогда как изготовление и исследование графена не требует столь значительных материальных затрат и усилий как при создании ускорителей в физике высоких энергий.

Вернемся к двумерному представлению квазиспинора вблизи точки \mathbf{K} и вспомним, что его компоненты ϕ_A и ϕ_B являются амплитудами вероятности (волновыми функциями) в импульсном представлении, отвечающими амплитудам вероятности найти электрон, локализованный на узле решетки A и B , соответственно. Поэтому будем считать уравнение (2.35) уравнением в импульсном представлении. Если ввести спинор в координатном представлении

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{A,\mathbf{K}}(\mathbf{x}) \\ \psi_{B,\mathbf{K}}(\mathbf{x}) \end{pmatrix},$$

где $\mathbf{x} = (x, y) \equiv \mathbf{r}_n$, то можно записать эквивалент уравнения (2.35) в координатном пространстве:

$$E\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{x}) = -i\hbar v_F(\boldsymbol{\sigma}_{\perp} \nabla_{\perp})\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{x}), \quad (2.39)$$

$\nabla_{\perp} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$. Было учтено, что оператор импульса двух пространственных измерений равен $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$. Напомним, что полученное урав-

нение является приближенным. Оно справедливо в приближении малых квазиимпульсов.

Глава 3

Графен в магнитном поле.

Удивительным оказалось то, что несмотря на формальный способ введения псевдоспина эта степень свободы совершенно недвусмысленно проявилась в экспериментах с графеном, помещенным в постоянное однородное магнитное поле. Рассмотрим поэтому задачу о нахождении волновых функций и уровней энергии (уровней Ландау) в этой ситуации. Будем решать задачу в приближении, в котором справедлив линейный закон дисперсии, то есть при квазиимпульсе электрона вблизи одной из найденных дираковских точек.

3.1 Уровни Ландау электронов в графене

Как известно из курса квантовой механике, влияние магнитного поля, описываемого векторным потенциалом \mathbf{A} , на стационарные состояния частицы учитывается путем замены оператора импульса $\hat{\mathbf{p}}$ на оператор $\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, где e -заряд частицы. Для электрона $e = -|e|$. Иногда эту процедуру называют "удлинением производной" ввиду того, что оператор импульса с точностью до постоянного множителя совпадает с оператором градиента. Будем считать, что графен расположен в плоскости (x, y) , а напряженность магнитного поля $\mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}]$ направлена вдоль оси z . Будем рассматривать состояния электрона в окрестности дираковской точки \mathbf{K} и для краткости опустим этот индекс у квазиспинора. Пренебрежем на время взаимодействием обычного спина электрона с магнитным полем. Чуть ниже мы убедимся, что при напряженности магнитного поля, используемого в экспериментах с графеном, это приближение

справедливо. Тогда уровни энергии и волновые функции стационарных состояний даются решением системы уравнений

$$E\psi = v_F \left(\boldsymbol{\sigma}_\perp, -i\hbar\nabla_\perp - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \psi. \quad (3.1)$$

Двумерный вектор-потенциал магнитного поля удобно выбрать в калибровке Ландау $\mathbf{A} = B(-y, 0)$. Тогда уравнение (3.1) для $\psi \equiv \psi(x, y)$ запишется в виде

$$E\psi = v_F \left[\sigma_x \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{|e|By}{c} \psi \right) - \sigma_y i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]. \quad (3.2)$$

Учтено, что для электрона $e = -|e|$. Оператор

$$\hat{H} = v_F \left[\sigma_x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{|e|By}{c} \right) - \sigma_y i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right]$$

(гамильтониан) в правой части уравнения, действующий на спинор ψ , не зависит от координаты x , поэтому коммутатор его с оператором x -компоненты импульса равен нулю, $[\hat{H}, \hat{p}_x] = 0$. Следовательно, собственное значение p_x , $\hat{p}_x \psi = p_x \psi$, сохраняется. В этом случае ψ можно искать методом разделения переменных:

$$\psi \equiv \psi(x, y) = e^{ip_x x/\hbar} \begin{pmatrix} \varphi_1(y) \\ \varphi_2(y) \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Для φ_1 и φ_2 получается система уравнений

$$\begin{aligned} E\varphi_1 &= v_F \left(p_x - \frac{|e|B}{c}y - \hbar\partial_y \right) \varphi_2, \\ E\varphi_2 &= v_F \left(p_x - \frac{|e|B}{c}y + \hbar\partial_y \right) \varphi_1. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Если $E \neq 0$, то можно выразить φ_1 из первого уравнения и подставить во второе. Получим

$$E^2\varphi_2 = v_F^2 \left(p_x - \frac{|e|B}{c}y + \hbar\partial_y \right) \left(p_x - \frac{|e|B}{c}y - \hbar\partial_y \right) \varphi_2.$$

Раскрыв произведение, приходим к уравнению

$$\frac{d^2\varphi_2}{dy^2} + \left[\left(\frac{E}{\hbar v_F} \right)^2 + \frac{|e|B}{\hbar c} - \left(\frac{|e|B}{\hbar c} \right)^2 \left(y - \frac{cp_x}{|e|B} \right)^2 \right] \varphi_2 = 0, \quad (3.5)$$

которое по своей математической структуре совпадает со стационарным уравнением Шредингера для нерелятивистского гармонического осциллятора

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 (y - y_0)^2 \right] \psi = 0.$$

Это уравнение имеет решение $\psi(y) = \psi_n^{\text{osc}}(y - y_0)$, $E = E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, $n = 0, 1, \dots$, где

$$\psi_n^{\text{osc}}(y - y_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(y-y_0)^2} H_n \left((y - y_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right),$$

H_n -полином Эрмита порядка n . Уравнение (3.5) сводится к уравнению Шредингера для гармонического осциллятора с помощью подстановок

$$\omega \rightarrow \frac{|e|B}{mc}, \quad \frac{2mE}{\hbar^2} \rightarrow \left(\frac{E}{\hbar v_F} \right)^2 + \frac{|e|B}{\hbar c}, \quad y_0 \rightarrow \frac{cp_x}{|e|B}. \quad (3.6)$$

Получаем

$$E_n^2 = \frac{2|e|B\hbar}{c} v_F^2 n,$$

откуда находим уровни энергии

$$E_n = \pm v_F \sqrt{\frac{2|e|\hbar B}{c} n^{1/2}}, \quad (3.7)$$

$n = 1, 2, \dots$. Отметим, что $n = 0$ исключено ввиду того, что ищутся решения с $E \neq 0$. Знак $+$ отвечает электронам, знак $-$ дыркам. Напомним, что уровни Ландау нерелятивистского электрона в однородном магнитном поле даются выражением

$$E_n = \frac{|e|\hbar B}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.8)$$

$n = 0, 1, \dots$. Нижняя компонента псевдоспинора выражается через волновую функцию гармонического осциллятора как

$$\varphi_{2,n}(y) = \psi_n^{\text{osc}}(y - y_0), \quad (3.9)$$

где

$$y_0 = \frac{cp_x}{|e|B}. \quad (3.10)$$

Верхняя компонента псевдоспинора при $E \neq 0$ вычисляется из первого уравнения (3.4)

$$\varphi_{1,n} = -\frac{v_F}{E_n} \left[\frac{|e|B}{c}(y - y_0) + \hbar \frac{d}{dy} \right] \varphi_{2,n}.$$

Результат действия оператора в квадратных скобках можно получить с использованием свойств полиномов Эрмита. Мы, однако, воспользуемся удобным методом операторов рождения и уничтожения гармонического осциллятора. Действительно, с помощью уже выписанных подстановок (3.6) и выражения для оператора уничтожения гармонического осциллятора с массой m и частотой ω ,

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \left(m\omega y + \hbar \frac{d}{dy} \right),$$

убеждаемся в том, что указанный выше оператор в квадратных скобках с точностью до постоянного множителя совпадает с оператором уничтожения осциллятора с положением равновесия y_0 :

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{c}{2|e|\hbar B}} \left[\frac{|e|B}{c}(y - y_0) + \hbar \frac{d}{dy} \right].$$

Результат действия оператора \hat{a} на собственные функции оператора Гамильтона осциллятора известен: $\hat{a}\psi_n^{\text{osc}} = \sqrt{n}\psi_{n-1}^{\text{osc}}$. Поэтому верхняя компонента псевдоспинора φ_1 принимает вид

$$\varphi_{1,n} = -\frac{v_F}{E_n} \left[\frac{|e|B}{c}(y - y_0) + \hbar \frac{d}{dy} \right] \varphi_{2,n} = \mp \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}\psi_n^{\text{osc}} = \mp \psi_{n-1}^{\text{osc}}, \quad (3.11)$$

где знак \mp соотносится со знаком \pm в выражении для уровней энергии (3.7). Заметим, что множитель \sqrt{n} , возникающий при действии оператора уничтожения, сократился с таким же множителем от E_n в знаменателе выражения (3.11). Если по аналогии со спинором в квантовой механике электрона нормировать псевдоспинор условием

$$\int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy (|\psi_{1n}|^2 + |\psi_{2n}|^2) = 1,$$

то нормированный псевдоспинор $\psi_n(x, y)$, отвечающий энергии $E_n \neq 0$ (3.7) запишется в виде

$$\psi_n(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2L_x}} e^{ip_x x/\hbar} \begin{pmatrix} \mp \psi_{n-1}^{\text{osc}}(y - y_0) \\ \psi_n^{\text{osc}}(y - y_0) \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Заметим, что ввиду экспоненциального затухания y -зависимости псевдоспинора пределы интегрирования $-L_y/2 \leq y \leq L_y/2$ по y в условии нормировки были заменены на $\pm\infty$.

Одной из наиболее ярких особенностей уровней Ландау в графене, отличающей его ситуации квазичастиц с квадратичным законом дисперсии, является наличие уровня с энергией, равной нулю. Для того чтобы найти псевдоспинор, отвечающий $E = 0$, возьмем первое из уравнений (3.4), подставим в него $E = 0$ и получим уравнение первого порядка для $\varphi_{2,0}(y)$:

$$\left[\frac{d}{dy} + \frac{|e|B}{\hbar c}(y - y_0) \right] \varphi_{2,0} = 0.$$

Его решение имеет вид $\varphi_{2,0}(y) = \psi_0^{\text{osc}}(y - y_0)$, то есть совпадает с волновой функцией основного состояния гармонического осциллятора. При этом необходимо потребовать, чтобы верхняя компонента псевдоспинора обратилась в нуль, $\varphi_{1,0}(y) = 0$. В противном случае из второго уравнения (3.4) при $E = 0$ находим физически бессмысленное решение $\varphi_{1,0}(y) \propto e^{eB(y^2 - 2yy_0)/2\hbar c}$, которое невозможно нормировать. Итак, псевдоспинор, отвечающий уровню Ландау с энергией $E = 0$, имеет вид

$$\psi_0(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ip_x x/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0^{\text{osc}}(y - y_0) \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Найденные в графене уровни Ландау (3.7) сильно вырождены. Найдем кратность их вырождения. Поскольку в исходном приближении предполагалось, что энергия и квазиимпульс электрона малы, детали кристаллической структуры несущественны ввиду большой длины волны электрона. Поэтому для нахождения кратности вырождения можно использовать те же соображения, что и в задаче об уровнях Ландау в квантовой механике нерелятивистского электрона. Будем считать, что графеновый лист имеет размеры $L_x \times L_y$. Как принято в физике твердого тела, конечные размеры кристалла учтем с помощью периодических граничных условий для волновой функции:

$$\psi(x + L_x, y) = \psi(x, y).$$

Поскольку x -компонента импульса постоянна, и зависимость псевдоспинора от x известна (3.3), получаем $e^{ip_x(x+L_x)/\hbar} = e^{ip_x x/\hbar}$, откуда следует условие квантования $p_x = 2\pi\hbar n_x/L_x$, где $n_x = 0, \pm 1, \dots$. С учетом (3.10)

это эквивалентно квантованию "центра орбиты"

$$y_0 = n_x \Delta y_0, \quad \Delta y_0 = \frac{2\pi\hbar c}{|e|BL_x}.$$

Уровни Ландау не зависят от y_0 , тогда как волновая функция (псевдоспинор) различна для разных y_0 . Иными словами, различные состояния имеют одну и ту же энергию. Число различных состояний равно числу "квантов" y -координаты

$$\frac{L_y}{\Delta y_0} = \frac{|e|B}{2\pi\hbar c} L_x L_y,$$

укладывающихся на длине L_y .

Для вычисления кратности вырождения g надо учесть несколько моментов. Во-первых, уровень энергии электрона расщепляется в магнитном поле на два магнитных подуровня, расстояние между которыми равно

$$\Delta E_{\text{magn}} = 2|\mu_B|B = \frac{|e|\hbar}{m_e c} B,$$

где μ_B — магнетон Бора. Между тем величина расщепления уровней Ландау с $n \sim 1$ составляет величину порядка $\Delta E \sim v_F \sqrt{2|e|\hbar B/c}$. Типичные значения напряженности магнитного поля в экспериментах с графеном составляет $B \sim 10$ тесла, или 10^5 гаусс. Отношение расщепления магнитных подуровней к разности энергий соседних уровней Ландау при не слишком больших n оценивается как

$$\frac{\Delta E_{\text{magn}}}{v_F \sqrt{|e|\hbar B/c}} \sim 10^{-2} \ll 1.$$

Поэтому с хорошей точностью можно пренебречь расщеплением магнитных подуровней и считать, что спиновая кратность вырождения равна двум. Во-вторых, вспомним, что рассматривается ситуация в окрестности дираковской точки \mathbf{K} в пространстве квазиимпульсов. Переход к окрестности дираковской точки \mathbf{K}' сводится к замене в решении $p_x \rightarrow -p_x$. См. уравнение (2.36) и относящуюся к нему задачу. Эта замена дает другую волновую функцию, отвечающую той же энергии $E_n \neq 0$ (3.7), что и решение в окрестности \mathbf{K} , и, следовательно, приводит к дополнительному двукратному вырождению. Фактически оно

связано с двумя подрешетками A и B в графене, то есть с псевдоспином. По аналогии с (приближенным) спиновым вырождением его можно назвать псевдоспиновым вырождением.

Итак, с учетом квантования координаты центра орбиты кратность вырождения уровней Ландау с $E_n \neq 0$ в графене равна

$$g_{n \neq 0} = \frac{eB}{2\pi\hbar c} L_x L_y \times 2 \times 2. \quad (3.14)$$

Однако в случае уровня энергии $E = 0$ псевдоспиновое вырождение отсутствует, поскольку электрон занимает только состояние с локализацией на подрешетке B : верхняя компонента псевдоспинора (3.13) обращается в нуль. Поэтому кратность вырождения уровня $E = 0$ в два раза меньше:

$$g_{n=0} = \frac{eB}{2\pi\hbar c} L_x L_y \times 2 \times 1. \quad (3.15)$$

Указанное различие в кратности вырождения уровней Ландау (3.14) и (3.15) является ключевым фактором в объяснении аномального квантового эффекта Холла в графене.

Первое экспериментальное подтверждение полученной картины уровней Ландау, включая уровень с энергией, равной нулю, было получено в работе Guohong Li and Eva Y. Andrei, Nature Physics, 3, 623 (2007) [arXiv:0705.1185], выполненной в 2007 году. Ее основной результат представлен на рис. 3.1, взятом из указанной работы. На нем показаны результаты измерения туннельного тока сканирующего электронного микроскопа с поверхности графита в магнитном поле, направленном перпендикулярно поверхности. Поскольку графит это стопка графеновых листов, можно ожидать, что методы исследования поверхности трехмерного графита выявят какие-то особенности графена. Так и оказалось. Как показано на рис. 3.1 а, в зависимости туннельного тока от напряжения имеются пики. Особо отметим пик A , положение которого не зависит от напряженности магнитного поля. Он и отвечает уровню с нулевой энергией, являющемуся "визитной карточкой" графена. Другие пики зависят от напряженности магнитного поля. Зависимость энергии от напряженности магнитного поля B показана авторами на рис. 3.1 б,с. Зависимость $\propto \sqrt{B}$ характеризует ненулевые уровни энергии в однослойном графене (3.7). Но есть и другие пики с зависимостью $\propto (\sqrt{B})^2 = B$, как для

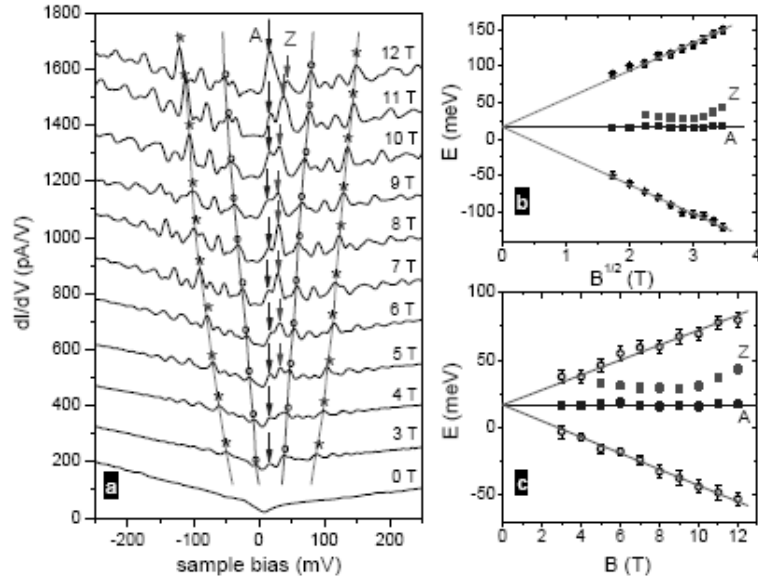


Рис. 3.1: Экспериментальное доказательство уровней Ландау в графене.

пика, обозначенного Z . Линейная зависимость уровня энергии от напряженности характерна для уровней Ландау в 3D-структурах (3.8). Она проявилась в силу взаимодействия между плоскими графеновыми листами, учет которой приводит к ветви в законе дисперсии, квадратично зависящей от квазиимпульса и, следовательно, к обычным 3D-уровням Ландау. В работе David L. Miller, et al., Science 324, 924 (2009) аналогичный эксперимент был выполнен с листом графена на кремниевой подложке. В результате были выявлены лишь уровни энергии с зависимостью $\propto \sqrt{B}$ от напряженности магнитного поля, в согласии с формулой (3.7).

3.2 Квантовый целочисленный эффект Холла в полупроводниковых гетероструктурах.

Напомним, в чем состоит сущность квантового целочисленного эффекта Холла. Известно, что при пропускании электрического тока с плотностью j_x (имеющей смысл заряда, проходящего через единицу поверхности, перпендикулярной потоку, в единицу времени), текущего в x -направлении, через полупроводник, помещенный в однородное магнитное поле напряженностью B в z -направлении, в y -направлении воз-

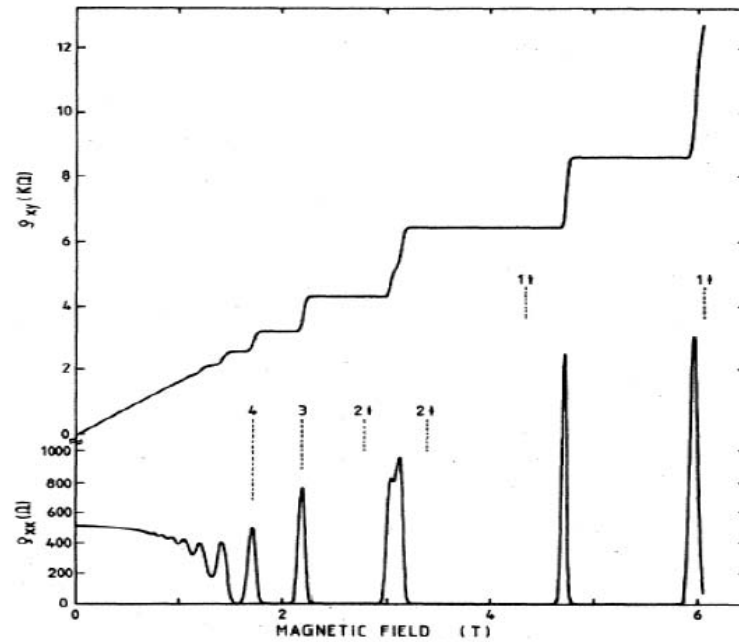


Рис. 3.2: Целочисленный квантовый эффект Холла в полупроводниковых гетероструктурах [3]. Температура $T = 8 \times 10^{-3}$ К. Плотность носителей отвечает напряжению на затворе $V_g = 0$ вольт.

никает электрическое поле с напряженностью E_y такой, что выполняется соотношение

$$j_x = \sigma_{xy} E_y,$$

где

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{R_H} = \frac{enc}{B}. \quad (3.16)$$

Явление называется эффектом Холла и служит одним из методов экспериментального определения заряда e и плотности n носителей в полупроводниках (имеющей смысл числа зарядов в единице объема). Здесь σ_{xy} —холловская проводимость, R_H —холловское сопротивление. Зависимость холловского сопротивления от магнитного поля линейна: $R_H = B/enc$. Удивительное явление, обнаруженное в 1980 г. немецким физиком К. фон Клитцингом, состоит в том, что холловское сопротивление (равно как и холловская проводимость) двумерного электронного газа в полупроводнике при определенных значениях напряженности магнитного поля выходит на плоские участки, переставая зависеть от B . Электронный газ в этих экспериментах был эффективно двумерным в плоскости,

перпендикулярной магнитному полю благодаря тому, что возбужденные уровни энергии движения вдоль магнитного поля отделены от основного уровня большой щелью. Это достигалось при температурах $T \sim 10^{-3}\text{K}$ при наложении электрического поля, перпендикулярного поверхности.

Для электронов в полупроводнике в зоне проводимости приближенно справедлив квадратичный закон дисперсии $E(\mathbf{p}) = E_0 + \mathbf{p}^2/2m^*$, где m^* обозначает эффективную массу. В этом случае уровни Ландау поперечного движения в однородном магнитном квантуются в соответствии с выражением

$$E_n = \frac{|e|\hbar}{m^*c} \left(n + \frac{1}{2} \right) B - \mu_B B \sigma, \quad (3.17)$$

$n = 0, 1, \dots$, $\sigma = \pm 1/2$ —проекция спина электрона на направление магнитного поля, μ_B — магнетон Бора. Кратность вырождения равна

$$g_n = \frac{|e|B}{2\pi\hbar c} L_x L_y.$$

Если менять напряженность магнитного поля B в двумерном электронном газе, имеющим поверхностную плотность n , то при некоторых значениях B все $N = nL_x L_y$ электронов могут разместиться на ν нижних уровнях Ландау, по g_n электронам на каждом из уровней. Это возможно при напряженности, удовлетворяющей условию

$$nL_x L_y = \nu \frac{|e|B}{2\pi\hbar c} L_x L_y. \quad (3.18)$$

Выражая отсюда n и подставляя в (3.16) видим, что холловское сопротивление при поверхностной плотности (3.18) перестает зависеть от напряженности магнитного поля и принимает квантованные значения

$$R_H = \frac{2\pi\hbar}{e^2\nu}, \quad (3.19)$$

$\nu = 1, 2, \dots$. Наличие примесей приводит к тому, что условие (3.18) выполняется не при одном значении B , а в некотором интервале. Тем самым в зависимости $R_H(B)$ получаются плато при квантованных значениях (3.19). Это и было обнаружено в экспериментах фон Клитцинга с сотрудниками [3]. Ввиду того, что явление происходит при целых ν , эффект получил название квантового целочисленного эффекта Холла. Квант сопротивления равен численно

$$R_0 = 25848.562 \text{ Ом.}$$

Замечательно, что этот квант выражается только через фундаментальные физические постоянные и не зависит от деталей электронного спектра в двумерном полупроводнике, таких как эффективная масса электрона, величина взаимодействия электронов друг с другом и т.д. Заметим, во-первых, что ввиду условия (3.18) можно держать напряженность магнитного поля B фиксированной, но менять плотность электронов n в двумерном электронном газе путем изменения напряжения на затворе. В оригинальной работе использовались оба метода. Во-вторых, при выполнении условия (3.18) уровни Ландау полностью заполнены. В силу принципа Паули нет свободных состояний, куда при наложении продольного электрического поля могли бы переходить электроны. Поэтому продольная проводимость σ_{xx} должна обращаться в нуль при выполнении условия квантования холловской проводимости

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar}\nu.$$

Это также было обнаружено в экспериментах. См. рис. 3.2, на котором показаны зависимости от приложенного магнитного поля удельных сопротивлений

$$\begin{aligned}\rho_{xx} &= \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \\ \rho_{xy} &= \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}.\end{aligned}$$

Напомним, что матрица удельных сопротивлений обратна матрице проводимостей:

$$\rho_{ij} = (\sigma)_{ij}^{-1}.$$

При этом компоненты плотности тока выражаются через компоненты напряженности внешнего электрического поля посредством соотношения

$$j_i = \sigma_{ij}E_j.$$

В случае геометрии, отвечающей эффекту Холла с $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, существенны лишь поперечные направлению магнитного поля компоненты плотности тока $\mathbf{j} = (j_x, 0, 0)$ и электрического поля $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$. Поэтому можно положить

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Как видно из рисунка, продольное удельное сопротивление, пропорциональное σ_{xx} , обращается в нуль как раз при напряженности магнитного поля, для которой квантуется холловское удельное сопротивление. Продольная проводимость при этой напряженности практически равна нулю в силу принципа Паули.

3.3 Особенности квантового эффекта Холла в графене.

Для электронов в графене картина квантового целочисленного эффекта Холла радикально меняется как из-за присутствия уровня Ландау с энергией, равной нулю, так и вследствие модификации выражения для спектра (3.7). Если напряженность магнитного поля такова, что заполнены ν уровней Ландау с $E_n \neq 0$ и уровень Ландау с $E = 0$, то с учетом (3.14), (3.15) вместо (3.18) будем иметь соотношение

$$nL_xL_y = 4 \times \frac{|e|B}{2\pi\hbar c} L_xL_y \left(\nu + \frac{1}{2} \right). \quad (3.21)$$

Отсюда видно, что правило квантования холловской проводимости в графене будет иметь вид

$$\sigma_{xy} = \frac{4e^2}{2\pi\hbar c} \left(\nu + \frac{1}{2} \right), \quad (3.22)$$

отвечающий как бы полуцелым числам. Этот результат, целиком обязанный присутствию уровня с нулевой энергией, был теоретически предсказан Гусыниным и Шараповым незадолго до открытия графена и экспериментально подтвержден в опытах с этим веществом. См. рис. 3.3 из работы [4]. Обратим внимание, что на этом рисунке по горизонтали отложена концентрация носителей, которую можно регулировать с помощью напряжения на затворе. Тогда отрицательные n отвечают дыркам.

Изменение картины спектра в графене (3.7) по сравнению с уровнями Ландау для электронов с квадратичным законом дисперсии (3.17) приводит к тому, что квантовый эффект Холла в графене может наблюдаться даже при комнатной температуре. Действительно, при не слишком больших квантовых числах характерное расстояние между уровнями Ландау

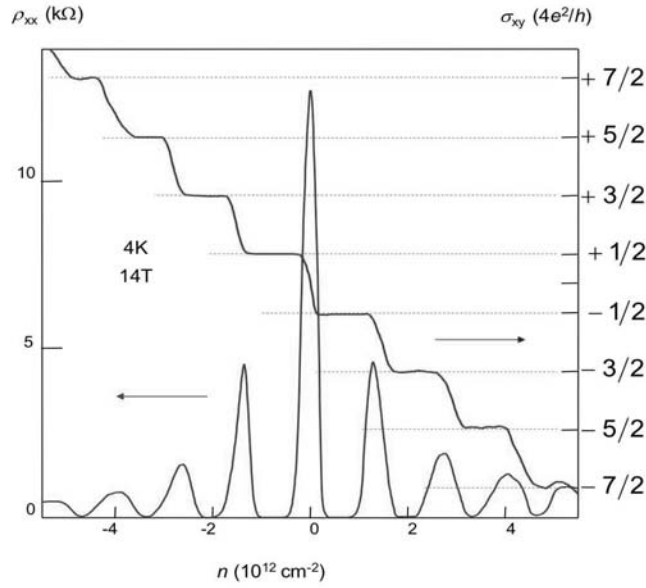


Рис. 3.3: Аномальный квантовый эффект Холла в графене из работы [4].

оценивается в температурных единицах как

$$\Delta E_{LL} \sim \frac{\hbar v_F}{k_B} \sqrt{\frac{|e|B}{\hbar c} n} \approx 4 \text{ К}$$

при напряженности магнитного поля $B = 10^{-4}$ Т. При $B = 29$ Т холловское плато в графене наблюдалось при температуре $T = 300$ К.

В заключение этой главы можно сказать, что теоретические и экспериментальные исследования в области физики графена в настоящее время развиваются очень быстрыми темпами. Здесь осталось очень много нерешенных задач, как теоретических, так и практических. Применение графена как перспективного материала в нанoeлектронике вообще находится в самой начальной стадии. С относительно свежим обзором по применению графена и других аллотропов углерода (нанотрубок и т.д.) в устройствах нанoeлектроники можно познакомиться в обзорной статье [5].

Глава 4

Концептуальные основы квантовых вычислений.

Теория сложности вычислений классифицирует задачи по тому, как зависит время счета на компьютере от длины входного регистра начальных данных. Если зависимость экспоненциальная, решение задачи в реальном времени невозможно. Как показали теоретические изыскания последних пятнадцати лет, этот пессимистический вывод может не иметь места, если решать задачу не на классическом, а на квантовом компьютере, то есть компьютере, работа которого и программирование существенно опираются на принципы квантовой механики. Разумеется, работа и классического компьютера основана на преобразовании потоков электронов в микросхемах, а электроны несомненно квантовые объекты. Тем не менее, электронные логические элементы типа "ДА" или "НЕТ" работают с макроскопически большим числом электронов и в этом смысле классичны. В работе квантовых компьютеров фундаментальную роль играет принцип суперпозиции волновых функций, который вместо классического бита типа "ДА/НЕТ" позволяет использовать квантовый бит, для краткости иногда называемый кубитом.

Одним из первых идею квантового компьютера высказал Ю. И. Манин 1980 году в книге "Вычислимое и невычислимое". Он указал, что пространство состояний квантового устройства имеет экспоненциально большую емкость в зависимости от числа элементов. Например, пространство состояний N частиц со спином $1/2$ имеет размерность 2^N . Поэтому задачи, не допускающие решения на классическом компьютере из-за нехватки ресурсов, могли бы быть решены на квантовом компью-

тере. Манин в этом пункте ссылается на работу, в которой оценивались вычислительные ресурсы, необходимые для квантовомеханического расчета молекулы аммиака на обычной вычислительной машине. Оказывается, что для этого требуется провести вычисления по методу сеток примерно в 10^{42} точках. Если считать, что в каждой точке проводится примерно 10 элементарных операций, а компьютер работает при сверхнизкой температуре $T = 10^{-3}$ К, то и тогда на расчет молекулы аммиака потребовалась бы энергия, выработанная на Земле за столетие. В то же время число состояний порядка 10^{43} было бы обеспечено всего

$$N = 43 \times \frac{\ln 10}{\ln 2} \approx 143$$

частицами спина $1/2$.

В дальнейшем идея квантового компьютера независимо была выдвинута Р. Фейнманом на конференции по физике вычислений, проводившейся в 1981 году в Массачусетском технологическом институте. Спустя еще 3 года Фейнман предложил конкретный гамильтониан квантового компьютера. Законченная концепция квантового вычисления, которая используется и по сей день, было сформулирована Д. Дойчем в 1985 году в статье, опубликованной в журнале Лондонского королевского общества. В 1994 году Питер Шор, ныне работающий в Массачусетском технологическом институте, предложил квантовый алгоритм факторизации. Еще один квантовый алгоритм поиска в неструктурированной базе данных был предложен Ловом Гровером из лаборатории фирмы Bell. Если до того времени число работ по квантовым компьютерам и квантовым вычислениям исчислялось единицами, после статьи Шора начался экспоненциальный рост числа публикаций на эту тему. Это означало, что тема стала необычайно актуальной. Такой она остается и по сей день.

Работа в этой области идет по двум основным направлениям. Первое — это собственно квантовая информатика, которая занимается теоретическим поиском и анализом квантовых алгоритмов решения сложных задач, не допускающих решения на классическом компьютере. Сюда же примыкает теория квантовой сложности вычислений и проблема создания квантовых кодов, исправляющих ошибки. Второе направление — это практическая реализация квантовых вычислений путем создания и изучения работы квантовых вентилях с помощью изученных к настоящему времени физических систем. К сожалению, степень продвижения в ука-

занных направлениях несравнимы. В то время как теоретические разработки продвинулись довольно далеко, физическая реализация достигнута лишь на весьма скромных по числу кубитов системах, включающих две или три частицы. Для решения серьезных задач нужно несколько десятков кубитов. При этом сама возможность масштабирования, то есть построения устройств, более сложных чем единичные квантовые вентили, все еще остается открытой проблемой.

4.1 Кубиты и основные квантовые вентили.

Классический компьютер оперирует классическими битами "ДА" и "НЕТ". Пример физической реализации: значению "ДА" отвечает намагниченный участок вещества, не намагниченный участок изображает "НЕТ". Намагниченность существенно макроскопична, так как включает много спинов. Квантовый компьютер оперирует квантовыми битами. Абстрактно, квантовый бит $|\psi\rangle$ является элементом двумерного комплексного пространства:

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

где

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (4.1)$$

Условие (4.1) можно переписать в виде

$$(\operatorname{Re}\alpha)^2 + (\operatorname{Im}\alpha)^2 + (\operatorname{Re}\beta)^2 + (\operatorname{Im}\beta)^2 = 1,$$

который говорит, что пространством состояний кубита является 3-сфера в четырехмерном пространстве. Пространство состояний классического бита состоит всего из двух элементов.

Любой кубит имеет физическую реализацию в виде какого-либо квантового объекта, например, частицы спина $1/2$, фотона той или иной поляризации и т.д. Поэтому оправданно использованное обозначение кубита как вектора состояния некоторой квантовой системы. Как и любой вектор состояния, кубит можно разложить по базисным состояниям так, как это делается в квантовой механике частицы со спином $1/2$:

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

где базисные векторы состояния имеют вид

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Этот квантово-механический базис определен как базис из собственных векторов матрицы Паули

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

с собственными значениями ± 1 .

- *Задача.* Найти вид оператора $\hat{\mu}$, обладающего свойством, что его собственные значения μ в базисе $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ равны 0, 1.

С кубитом $|\psi\rangle$ естественно связать оператор

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(\alpha^*\langle 0| + \beta^*\langle 1|) = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1| + \alpha\beta^*|0\rangle\langle 1| + \alpha^*\beta|1\rangle\langle 0|.$$

Его называют оператором плотности или матрицей плотности. В написанном выражении существенна фазовая когерентность, проявляющаяся в наличии перекрестных членов $\propto \alpha^*\beta, \alpha\beta^*$. Потеря фазовой когерентности называется декогеренцией. Это физическое явление может вызываться различными причинами, в частности, взаимодействием кубита с окружением. Декогеренция приводит к тому, что фазы $\arg\alpha$ и $\arg\beta$ становятся некоррелированными: $\langle\alpha^*\beta\rangle = 0$. При этом оператор $\hat{\rho}$ принимает вид

$$\hat{\rho} = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1|,$$

соответствующий некогерентной смеси состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ с вероятностями $|\alpha|^2$ и $|\beta|^2$, соответственно. То есть, мы получили классические биты информации "ДА" с вероятностью $|\alpha|^2$ и "НЕТ" с вероятностью $|\beta|^2$. Иногда квантовое состояние с такой матрицей плотности называют вероятностным битом. По существу, вероятностный бит является простым классическим битом плохого качества.

Квантовая механика говорит нам, что на векторы состояния могут действовать операторы и преобразовывать их в другие векторы состояния. Операторы должны быть унитарными для того, чтобы сохранялась

нормировка (4.1). В квантовых компьютерах операции над кубитами реализуются посредством вентилях. Очевидно, действие однокубитового вентиля представляется умножением на унитарную матрицу размерности 2×2 .

Имеется два основных однокубитовых вентиля. Во-первых, это вентиль NOT: квантовый "НЕТ". Он изображается унитарным оператором \hat{U}_{NOT} , который действует как

$$\hat{U}_{\text{NOT}}|0\rangle = |1\rangle, \hat{U}_{\text{NOT}}|1\rangle = |0\rangle. \quad (4.3)$$

Во-вторых, имеется вентиль Адамара \hat{U}_{H} , который действует следующим образом:

$$\hat{U}_{\text{H}}|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \hat{U}_{\text{H}}|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.4)$$

- *Задача.* С помощью (4.2) показать, что матричной реализацией вентилей NOT и Адамара в базисе векторов состояния (4.2) являются $\hat{U}_{\text{NOT}} = \sigma_x$, $\hat{U}_{\text{H}} = (\sigma_x + \sigma_z)/\sqrt{2}$. Здесь $\sigma_{x,z}$ — матрицы Паули (2.32). Найти матричную реализацию вентиля $\sqrt{\hat{U}_{\text{NOT}}}$.

Многокубитовые вентили действуют на регистр из кубитов. Одним из представителей n -кубитовых регистров является прямое произведение n кубитов:

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle = \prod_{i=1}^n |\psi_i\rangle \equiv |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \cdots \otimes |\psi_n\rangle.$$

Число состояний n -кубитового регистра равно 2^n . При $n = 2$ имеем

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} &= (\alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle) \otimes (\alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle) = \\ &= \alpha_1\alpha_2|0,0\rangle + \alpha_1\beta_2|0,1\rangle + \alpha_2\beta_1|1,0\rangle + \\ &+ \beta_1\beta_2|1,1\rangle. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Двухкубитовое состояние в виде прямого произведения однокубитовых не является самым общим. Общий вид ненормированного двухкубитового вектора состояния можно представить в виде

$$|2\text{-qubit}\rangle = a|0,0\rangle + b|0,1\rangle + c|1,0\rangle + d|1,1\rangle \quad (4.6)$$

с комплексными коэффициентами a, b, c, d . Отсюда и из (4.5) видно, что двухкубитовый вектор состояния можно представить в виде прямого произведения однокубитовых только при выполнении условия

$$ad = bc. \quad (4.7)$$

В противном случае $|2 - \text{qubit}\rangle \neq |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$. Вообще, если многокубитовый вектор состояния не представим в виде прямого произведения однокубитовых, квантовое состояние называется запутанным (англоязычный термин *entangled*). Такие состояния играют определяющую роль в теории квантовых вычислений и квантовой информации.

Прямое произведение вентилей Адамара действует на двухкубитовое состояние $|0, 0\rangle$ как

$$\hat{U}_H \otimes \hat{U}_H |0, 0\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{2}(|0, 0\rangle + |0, 1\rangle + |1, 0\rangle + |1, 1\rangle).$$

Далее знак прямого произведения \otimes векторов состояния явно выписываться не будет. Можно видеть, что линейную суперпозицию векторов состояния в этом соотношении можно записать в виде $|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + |3\rangle$, если использовать двоичное представление целых чисел. Для n -кубитового регистра справедливо равенство

$$\hat{U}_H^{\otimes n} |\underbrace{0, 0, \dots, 0}_n\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{i=0}^{2^n-1} |i\rangle, \quad (4.8)$$

где аргумент n -кубитового вектора состояния $|i\rangle$ надо представить в виде регистра из n элементов, в качестве которых стоит двоичное представлением чисел i . Было показано [6], что для реализации квантовых алгоритмов однокубитовых вентилей недостаточно.

Недостающим вентиляем, необходимым для создания квантового компьютера, является двухкубитовый вентиль "Контролируемое НЕТ" (в англоязычной литературе "Controlled NOT"), или CNOT. Этот вентиль действует на состояние двух кубитов по правилу

$$\hat{U}_{\text{CNOT}} |a, b\rangle = |a, a + b\rangle, \quad (4.9)$$

где сложение всюду будет пониматься по модулю 2: $0 + 0 = 0$, $0 + 1 = 1 + 0 = 1$, $1 + 1 = 0$. Поэтому действие вентиля CNOT на базисные

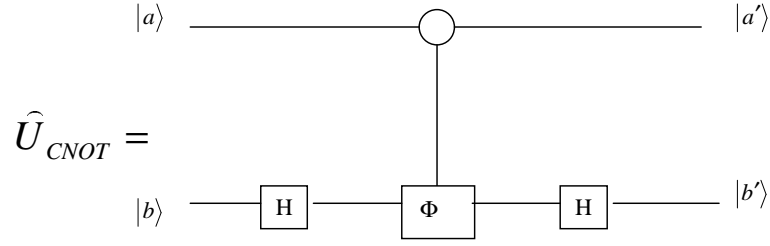


Рис. 4.1: Блок-схема квантового вентиля CNOT. H означает вентиль Адамара (4.4), Φ -вентиль контролируемого обращения фазы.

векторы состояния двух кубитов можно записать как

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\text{CNOT}}|00\rangle &= |00\rangle, \\ \hat{U}_{\text{CNOT}}|01\rangle &= |01\rangle, \\ \hat{U}_{\text{CNOT}}|10\rangle &= |11\rangle, \\ \hat{U}_{\text{CNOT}}|11\rangle &= |10\rangle.\end{aligned}\tag{4.10}$$

Если первый кубит находится в состоянии $|0\rangle$, то состояние второго кубита не меняется. Если же первый кубит находится в состоянии $|1\rangle$, то состояние второго кубита инвертируется. Для практических приложений вентиль CNOT обычно представляют в виде комбинации более простых для реализации операторов. Одна из возможностей дается выражением

$$\hat{U}_{\text{CNOT}} = \hat{U}_H \hat{U}_\Phi \hat{U}_H,\tag{4.11}$$

где оператор \hat{U}_H изображает действие вентиля Адамара (4.4). Вентиль, изображаемый на диаграмме блоком $\hat{\Phi}$, производит контролируемое обращение фазы

$$\begin{aligned}\hat{U}_\Phi|0,0\rangle &= |0,0\rangle, \\ \hat{U}_\Phi|0,1\rangle &= |0,1\rangle, \\ \hat{U}_\Phi|1,0\rangle &= |1,0\rangle, \\ \hat{U}_\Phi|1,1\rangle &= -|1,1\rangle.\end{aligned}\tag{4.12}$$

- *Задача.* С помощью (4.4) и (4.12) проверить справедливость (4.9) и (4.10).

Проиллюстрируем на двух примерах важность вентиля CNOT для квантовых вычислений. В качестве первого примера подействуем оператором \hat{U}_{CNOT} на двухкубитовое состояние в виде прямого произведения однокубитовых:

$$\hat{U}_{\text{CNOT}}(\alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle)(\alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle) = \alpha_1\alpha_2|0,0\rangle + \alpha_1\beta_2|0,1\rangle + \alpha_2\beta_1|1,1\rangle + \beta_1\beta_2|1,0\rangle.$$

Сравнение с (4.5) показывает, что здесь $ad \neq bc$. Поэтому вентиль \hat{U}_{CNOT} превращает прямое произведение однокубитовых вентилях в запутанное двухкубитовое состояние. Далее n -кубитовый вектор состояния $|j\rangle = |j_1\rangle|j_2\rangle \dots |j_n\rangle$, $j_l = 0, 1$, $l = 1, 2, \dots, n$, будем называть вектором состояния в вычислительном базисе с целью отличить его от запутанных векторов состояния $|\psi_j\rangle$, которые нельзя представить в виде прямого произведения однокубитовых векторов.

В качестве второго примера покажем, как с помощью последовательного действия вентилях \hat{U}_{CNOT} можно из трехкубитового вектора состояния

$$|\psi_i\rangle = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|00\rangle$$

получить вектор состояния типа "шредингеровского кота"

$$|\psi_f\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle.$$

Свое название такие состояния получили после знаменитой статьи 1935 года одного из создателей квантовой механики Э. Шредингера, в которой тот рассмотрел мысленный эксперимент, где приписал кошке вектор состояния вида

$$|\text{cat}\rangle = \alpha|\text{dead cat}\rangle + \beta|\text{living cat}\rangle.$$

В нашем случае можно отождествить $|\text{dead cat}\rangle \equiv |000\rangle$, $|\text{living cat}\rangle \equiv |111\rangle$. Обозначим через $\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(ij)}$ вентиль "контролируемое нет" с контролирующим кубитом i и контролируемым кубитом j . Представим исходный вектор состояния в виде $|\psi_i\rangle = (\alpha|00\rangle + \beta|10\rangle)|0\rangle$ и подействуем на него оператором $(\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \otimes \hat{I}_3)$. Этот оператор действует как вентиль CNOT на состояние первого и второго кубитов, а третий кубит оставляет в исходном состоянии. Здесь и далее \hat{I}_a будет означать единичный оператор, действующий на кубит a . С учетом (4.10) получим

$$|\psi'\rangle \equiv (\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \otimes \hat{I}_3) |\psi_i\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|110\rangle.$$

Затем подействуем на вектор состояния $|\psi'\rangle$ оператором $(\hat{I}_1 \otimes \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)})$, который не изменяет состояния первого кубита, а на состояние двух кубитов 2 и 3 действует как вентиль CNOT. Получим

$$(\hat{I}_1 \otimes \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)}) |\psi'\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle.$$

Таким образом, поставленная задача решается в виде соотношения

$$|\psi_f\rangle = (\hat{I}_1 \otimes \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)}) (\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \otimes \hat{I}_3) |\psi_i\rangle.$$

Из представленного решения понятно, как строить состояния типа шредингеровского кота в случае n кубитов.

После нескольких рассмотренных примеров можно сказать, что квантовый компьютер представляет собой устройство, которое входной n -кубитовый регистр $|\text{input}\rangle$ преобразует в регистр на выходе $|\text{output}\rangle$:

$$|\text{output}\rangle = \hat{U}|\text{input}\rangle.$$

С точки зрения квантовой механики устройство представляется действием унитарного оператора \hat{U} . Было показано [6], что любое \hat{U} можно составить из однокубитовых вентилях произвольного вида $e^{(i\nu \cdot \sigma \frac{\theta}{2})}$ и двухкубитовых вентилях \hat{U}_{CNOT} .

4.2 Квантовый параллелизм и задача Дойча.

Д. Дойчу принадлежит одна из первых концепций квантового компьютера как устройства, существенно опирающегося на принципы квантовой механики уже на стадии программирования. Он рассмотрел свойство квантового параллелизма на очень простой модели. Пусть имеется устройство, вычисляющее бинарную функцию $f(x)$. Бинарной называется функция, принимающая только два значения 0 и 1. Пусть эта функция настолько сложна, что время, затрачиваемое на ее вычисление, составляет 24 часа. Требуется узнать, является ли $f(x)$ постоянной, $f(0) = f(1)$, или сбалансированной: $f(1) = 1 + f(0)$. Классически, ответ на поставленный вопрос можно получить, прогнав устройство два раза, то есть за 48 часов. Дойч показал, что квантовое устройство требует одного прогона.

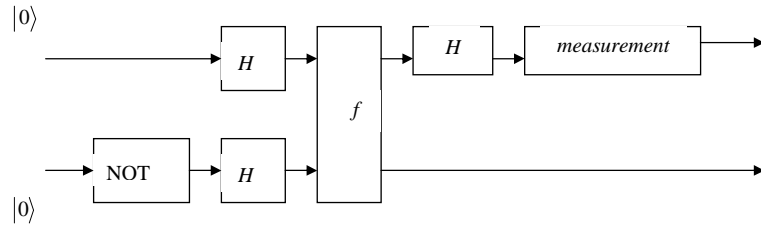


Рис. 4.2: Блок-схема квантового вычислительного устройства для решения задачи Дойча. H означает вентиль Адамара (4.4), "NOT"-вентиль (4.3), f -вентиль (4.13).

Далее для краткости будем опускать знак прямого произведения у векторов состояния. Допустим, что создан вентиль \hat{U}_f , действующий на двухкубитовое состояние $|x, y\rangle = |x\rangle|y\rangle$ по правилу

$$\hat{U}_f|x, y\rangle = |x, y + f(x)\rangle. \quad (4.13)$$

Приготовим входной регистр $|0, 0\rangle$. В соответствии с квантовой блок-схемой на Рис. 4.2 применим к входному регистру последовательно ряд операций

$$(\hat{U}_H \otimes \hat{I})\hat{U}_f(\hat{U}_H \otimes \hat{U}_H)(\hat{I} \otimes \hat{U}_{\text{NOT}}).$$

В результате получится вектор состояния

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \{ |0\rangle (|f(0)\rangle - |1 + f(0)\rangle + |f(1)\rangle - |1 + f(1)\rangle) + |1\rangle (|f(0)\rangle - |1 + f(0)\rangle - |f(1)\rangle + |1 + f(1)\rangle) \}.$$

Если функция постоянна, то результирующий вектор состояния будет $(-1)^{f(0)}|0\rangle(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$. Если функция сбалансирована, то в результате получится $(-1)^{f(0)}|1\rangle(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$.

- *Задача.* Проверить сделанное утверждение, воспроизводя последовательно действие указанных выше вентиляей.

Не будем следить за состоянием второго кубита. При этом первый кубит кубит окажется в состоянии $|0\rangle$ или $|1\rangle$ в зависимости от того, какому из двух классов принадлежит функция $f(x)$. Проведем измерение и узнаем, в каком состоянии окажется первый кубит (операция *measurement* на Рис. 4.2). Процесс такого измерения можно осознать на примере частицы со спином $1/2$. Если направить частицу в прибор Штерна-Герлаха, то он отклонит частицу по одной или другой траектории в зависимости

от того, равна ли проекция спина на ось z $+1/2$ (состояние $|0\rangle$), или $-1/2$ (состояние $|1\rangle$). В конце этих двух различных траекторий можно установить счетчики, тикающие всякий раз, когда в них попадет частица. Итак, для определения класса, к которому принадлежит в этом примере функция f , достаточно одного прогона квантового вычислительного устройства вместо двух прогонов у классического устройства. В этом и состоит идея квантового параллелизма.

4.3 Квантовое преобразование Фурье.

Квантовое преобразование Фурье определяется как действие на n -битовый регистр $|k\rangle$ оператора \hat{U}_{QFT} по правилу

$$|\psi_j\rangle \equiv \hat{U}_{\text{QFT}}|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi jk/2^n} |k\rangle. \quad (4.14)$$

Распишем правую часть (4.14), приняв во внимание, что метки вектора состояния в вычислительном базисе $|k\rangle = |k_1, k_2, \dots, k_n\rangle = |k_1\rangle|k_2\rangle \dots |k_n\rangle$ являются строкой из нулей и единиц, совпадающих с двоичной записью числа

$$k = \sum_{l=1}^n k_l 2^{n-l},$$

($k_l = 0, 1$). Тогда сумма по k сведется к независимому суммированию по $k_l = 0, 1$:

$$\begin{aligned} |\psi_j\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \dots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j \sum_{l=1}^n k_l / 2^l} |k_1\rangle |k_2\rangle \dots |k_n\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \dots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j (k_1 2^{-1} + k_2 2^{-2} + \dots + k_n 2^{-n})} |k_1\rangle |k_2\rangle \dots |k_n\rangle = \\ &= \prod_{l=1}^n \frac{|0\rangle + e^{i2\pi j / 2^l} |1\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Это выражение показывает, что квантовое преобразование Фурье представимо в виде прямого произведения линейных комбинаций однокубитовых векторов состояния.

- *Задача.* Найти матричный элемент $\langle k' | \hat{U}_{\text{QFT}} | k \rangle$ в вычислительном базисе.
- *Задача.* Найти результат действия оператора \hat{U}_{QFT} на трехкубитовый вектор состояния $\frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{k=0}^7 \cos \frac{2\pi k}{8} |k\rangle$.

Самим изобретателем алгоритма факторизации (см. ниже) П. Шором показано, что задача нахождения квантового преобразования Фурье полиномиальна по времени.

4.4 Поиск и исправление ошибок в квантовых вычислениях.

Как уже отмечалось, квантовое вычисление существенно использует корреляцию фаз квантовых состояний. Декогеренция разрушает квантовую когерентность. Имеющиеся в литературе оценки показывают, что в ряде физических реализаций кубитов и двухкубитовых вентилях время декогеренции очень мало, часто много меньше времени, необходимого для выполнения квантового вычисления. Поэтому необходимо применять специальные меры к тому, чтобы сохранить когерентность квантового состояния компьютера. Одной из таких мер является квантовое кодирование. Оно вводится по аналогии с классическим кодированием, когда бит "0" кодируется тремя битами "000". Бит "1" кодируется тремя битами "111". Пусть вероятность инверсии бита равна p . Тогда при самопроизвольной инверсии одного бита из трех, скажем, $(000) \rightarrow (100)$, ошибка исправляется на основе решения "большинством голосов": $(100), (010), (001) \rightarrow (000)$, а (000) декодируется как "0". Настоящая ошибка возможна при инверсии двух битов, что может произойти тремя способами, $(000) \rightarrow (110), (101)$, или (011) , либо при инверсии трех битов $(000) \rightarrow (111)$. Вероятность неисправимой ошибки равна $3p^2(1-p) + p^3 = 3p^2 - 2p^3$ и может быть сделана приемлемо малой при достаточно малом p .

- *Задача.* Оценить p исходя из требования, что вероятность неисправимой ошибки должна быть меньше 3×10^{-6} .

В квантовом случае, кроме неконтролируемого изменения квантового числа кубита $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ возможны следующие ошибки, не имеющие классического аналога.

- Ошибка фазы, например, $|1\rangle \rightarrow -|1\rangle$. Ошибка серьезная, поскольку состояние $|0\rangle + |1\rangle$ в результате такой ошибки переходит в состояние $|0\rangle - |1\rangle$, ортогональное исходному!
- Малые ошибки. Общий вид кубита $a|0\rangle + b|1\rangle$ непрерывно зависит от комплексных чисел a и b , которые могут слегка изменяться за счет внешних воздействий. Такая ошибка может накапливаться.
- Измерение в квантовой системе вносит неконтролируемые изменения в ее состояние. Собственно, задача квантовой информатики в том и состоит, чтобы, во первых, придумать алгоритм решения задачи. После прогона информация закодирована в фазах слагаемых в линейной суперпозиции базисных состояний. Поэтому, во-вторых, нужно извлечь эту информацию из квантового компьютера с помощью процедуры, которая не уничтожит хранящийся результат.

Основы теории квантовых кодов, исправляющих ошибки, уже созданы. Идея таких кодов, предложенная Питером Шором, основана на аналогии с классическим способом: трехкратное повторение кубита. Состояние кубита $a|0\rangle + b|1\rangle$ кодируется как $a|000\rangle + b|111\rangle$. Допустим, произошла ошибка инвертирования первого кубита:

$$a|000\rangle + b|111\rangle \rightarrow a|100\rangle + b|011\rangle.$$

Мы не можем просто измерить первый кубит для того, чтобы выяснить, произошла инверсия или нет. Согласно одному из постулатов квантовой механики, измерение вносит неконтролируемое возмущение в квантовое состояние объекта. В данном случае при измерении первого кубита произойдет коллапс вектора состояния $a|100\rangle + b|011\rangle \rightarrow |100\rangle$, если при измерении будет выяснено, что первый кубит находился в состоянии $|1\rangle$, или коллапс $a|100\rangle + b|011\rangle \rightarrow |011\rangle$, если выяснится, что первый кубит находился в состоянии $|0\rangle$. Хорошо, что ошибка обнаружена, но исправить ее нельзя, поскольку суперпозиция, необходимая для проведения квантового вычисления, при обнаружении ошибки разрушилась. Для того чтобы суперпозиция не разрушалась, необходимо измерять у

суперпозиции трехкубитовых векторов состояния вида $|x, y, z\rangle$ значение наблюдаемой $(y \oplus z, x \oplus z)$, где \oplus означает сложение по модулю два.

Такая наблюдаемая называется *синдромом* ошибки. Измерение синдрома выявляет положение инвертированного кубита, не разрушая при этом квантовой суперпозиции. Действительно, у исходной трехкубитовой суперпозиции $a|000\rangle + b|111\rangle$ значение указанной наблюдаемой равно $(0, 0)$, а у суперпозиции $a|100\rangle + b|011\rangle$, появившейся после ошибки инвертирования первого кубита, значение наблюдаемой равно $(0, 1)$. Двоичная запись 01 явно указывает на номер инвертированного кубита. Если инвертировался третий кубит,

$$a|000\rangle + b|111\rangle \rightarrow a|001\rangle + b|110\rangle,$$

то синдром равен $(1, 1)$. Двоичная запись числа 3 как раз и есть 11.

Если говорить более подробно, то способ квантового исправления ошибок состоит в следующих действиях. Исходное произвольное однокубитовое состояние $|x\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ превращаем в трехкубитовое состояние $(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|00\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|100\rangle$ с помощью двух вспомогательных кубитов. Вспомним, что $\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(ij)}$ обозначает вентиль "контролируемое нет" с контролирующим кубитом i и контролируемым кубитом j . Вспомогательные кубиты нужны для того, чтобы закодировать исходный однокубитовый вектор состояния в виде состояния "шредингеровского кота"

$$|\psi_c\rangle = \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)} (\alpha|000\rangle + \beta|100\rangle) = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle.$$

Ошибка инверсии кубита возникает за счет возможного взаимодействия с окружением. В квантовой теории всякое воздействие на систему представляется в виде некоторого оператора, действующего на вектор состояния. В данном случае назовем этот оператор \hat{E} оператором ошибки. Для ошибки переворота кубита его можно записать в виде

$$\hat{E} = \epsilon_0(t) \sigma_0^{(1)} \sigma_0^{(2)} \sigma_0^{(3)} + \epsilon_1(t) \sigma_x^{(1)} \sigma_0^{(2)} \sigma_0^{(3)} + \epsilon_2(t) \sigma_0^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_0^{(3)} + \epsilon_3(t) \sigma_0^{(1)} \sigma_0^{(2)} \sigma_x^{(3)}.$$

В целях единообразия записи единичная 2×2 матрица обозначена как $\sigma_0^{(i)}$. Верхний индекс в скобках указывает номер кубита, на который действует матрица. Функции времени $\epsilon_{0,1,2,3}(t)$ характеризуют детали динамического воздействия окружения на кодированный кубит. Они могут быть вычислены в конкретной модели декогерентности, однако в нашем

случае их вид несущественен. Вспоминая, что действие матрицы σ_x есть действие вентиля \hat{U}_{NOT} , то есть $\sigma_x|0\rangle = |1\rangle$, $\sigma_x|1\rangle = |0\rangle$, получаем

$$\hat{E}|\psi_c\rangle = \epsilon_0(t)(\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle) + \epsilon_1(t)(\alpha|100\rangle + \beta|011\rangle) + \\ + \epsilon_2(t)(\alpha|010\rangle + \beta|101\rangle) + \epsilon_3(t)(\alpha|001\rangle + \beta|110\rangle).$$

В соответствии с идеей, изложенной в начале этого параграфа, зарезервируем еще два квантовых бита для записи синдрома ошибок:

$$\hat{E}|\psi_c\rangle \rightarrow \hat{E}|\psi_c\rangle|00\rangle = \epsilon_0(t)(\alpha|00000\rangle + \beta|11100\rangle) + \\ + \epsilon_1(t)(\alpha|10000\rangle + \beta|01100\rangle) + \\ + \epsilon_2(t)(\alpha|01000\rangle + \beta|10100\rangle) + \epsilon_3(t)(\alpha|00100\rangle + \beta|11000\rangle).$$

Синдром ошибок представляется оператором \hat{S} , действующим на шестикубитовый вектор состояния как

$$\hat{S}|x_1, x_2, x_3, 0, 0\rangle = |x_1, x_2, x_3, x_2 \oplus x_3, x_1 \oplus x_3\rangle.$$

В результате вектор состояния кодированного кубита вместе с синдромом ошибок принимает вид

$$\hat{S}\hat{E}|\psi_c\rangle|00\rangle = \epsilon_0(t)(\alpha|00000\rangle + \beta|11100\rangle) + \\ + \epsilon_1(t)(\alpha|10001\rangle + \beta|01101\rangle) + \\ + \epsilon_2(t)(\alpha|01010\rangle + \beta|10110\rangle) + \\ + \epsilon_3(t)(\alpha|00111\rangle + \beta|11011\rangle).$$

Отсюда видно, что с вероятностью $|\epsilon_0(t)|^2$ кодированное трехкубитовое состояние не меняется от взаимодействия с окружением (идеальная ситуация), а с вероятностью соответственно $|\epsilon_1(t)|^2$, $|\epsilon_2(t)|^2$, $|\epsilon_3(t)|^2$ в кодированном трехкубитовом состоянии произойдет обращение первого, второго, третьего кубита. Но информация о перевернутом кубите оказалась записана в четвертом и пятом квантовых регистрах! Допустим, состояние этих регистров измерено, и получено значение 11 (с вероятностью $|\epsilon_3(t)|^2$). После измерения вектор состояния коллапсировал в $(\alpha|001\rangle + \beta|110\rangle)|11\rangle$. Состояние закодированного кубита при таком измерении не разрушилось, и известно, что нужно инвертировать третий кубит для исправления ошибки: $(\alpha|001\rangle + \beta|110\rangle)|11\rangle \rightarrow (\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle)|11\rangle$. Если к этому исправленному вектору состояния применить оператор $\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)}\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)} \otimes \hat{I}^{(45)}$, то получим вектор состояния $(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|00\rangle|11\rangle$.

- *Задача.* Проверить это утверждение.

Вспомогательные кубиты 2,3,4,5 можно в конце игнорировать.

Аналогичные методы троекратного повторения применяются и для исправления фазовых ошибок. В целом, теория квантовых кодов, исправляющих ошибки, является динамично развивающейся отраслью теории квантовых вычислений. Подробности можно узнать из статьи [9], или же заглянув на веб-страницу курса Дж. Прескилла в Калифорнийском технологическом институте

<http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph219/>.

На русский язык пока переведены [6] только первые главы этого курса, не включающие главу о квантовых кодах, исправляющих ошибки.

Глава 5

Основные квантовые алгоритмы.

Бурное развитие теории и практической реализации квантовых вычислений началось после того, как Питер Шор предложил квантовый алгоритм факторизации в 1994 году, а Лов Гровер изобрел в 1997 году алгоритм поиска в неструктурированной квантовой базе данных. Третьим широко известным алгоритмом является алгоритм телепортации неизвестного квантового состояния удаленному получателю. Разберем основные принципы указанных алгоритмов.

5.1 Квантовый алгоритм факторизации Шора.

Одна из широко используемых систем шифрования данных (система RSA), названная в честь ее создателей Ривеста, Шамира и Адлемана (Rivest, Shamir, Adleman), использует тот эмпирический, но не доказанный строго математически факт, что задача о нахождении множителей большого нечетного числа относится к классу вычислительных задач, время счета которых зависит от длины входных данных N как $\exp[c(\lg N)^{1/3}(\lg \lg N)^{2/3}]$, то есть неполиномиально. Однако П. Шор в 1995 г. показал, что квантовый алгоритм способен решить эту задачу за число шагов порядка $(\lg N)^2(\lg \lg N)(\lg \lg \lg N)$.

В теории чисел доказано, что нахождение множителей числа N сводится к нахождению периода r этого числа. Определение: r называется периодом числа N , если существует x такое, что $x^r = 1(\bmod N)$. Напомним, что $x(\bmod N)$ означает остаток от деления x на N . Если r четное, то определим y через соотношение $x^{r/2} = y(\bmod N)$. Тогда $y - 1$ и

$y + 1$ будут множителями числа N . Проверим, как это работает. Пусть $N = 21$. Возьмем $x = 2$. Имеем $2^r \pmod{21} = 2, 4, 8, 16, 11, 1, 2, \dots$ при $r = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$. Следовательно, период равен $r = 6$. Поэтому $y = 2^{6/2} \pmod{21} = 8$, $y - 1 = 7$, $y + 1 = 9 = 3 \times 3$. Отсюда $21 = 7 \times 3$.

Разберем идею квантового алгоритма факторизации на том же примере числа $N = 21$. Число N в двоичном представлении записывается в виде регистра из $n = \lceil \log_2 N \rceil$ символов 0 и 1. При $N = 21$ будет $n = 5$. Выбираем целое число t исходя из неравенства $N^2 < 2^t < 2N^2$. В нашем случае $t = 9$. Входной регистр подготовим в виде прямого произведения двух подрегистров

$$|\psi_0\rangle = \underbrace{|0, 0, \dots, 0\rangle}_{t=9} \underbrace{|0, 0, \dots, 0\rangle}_{n=5}.$$

Подвергнем первый подрегистр действию прямого произведения вентилей Адамара $\underbrace{\hat{U}_H \otimes \hat{U}_H \otimes \dots}_t$. Применив (4.8), получим вектор состояния

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} |j\rangle |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{512}} \sum_{j=0}^{511} |j\rangle |0\rangle.$$

Следующий шаг состоит в применении к вектору состояния $|\psi_1\rangle$ линейного унитарного оператора \hat{V}_x , действующего по правилу

$$\hat{V}_x |j\rangle |k\rangle = |j\rangle |k + x^j \pmod{N}\rangle$$

и переходе к вектору состояния

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} |j\rangle |x^j \pmod{N}\rangle. \quad (5.1)$$

Квантовый параллелизм проявился именно на этом шаге: как видно из (5.1), в состояниях второго подрегистра закодированы все степени числа x , необходимые для поиска периода. В рассматриваемом примере $x = 2$, а явный вид $|\psi_2\rangle$ есть

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle = & \frac{1}{\sqrt{512}} \{ |0\rangle |1\rangle + |1\rangle |2\rangle + |2\rangle |4\rangle + |3\rangle |8\rangle + |4\rangle |6\rangle + |5\rangle |11\rangle + \\ & + |7\rangle |2\rangle + \dots |511\rangle |2\rangle \}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

На первый взгляд, в этой записи трудно разглядеть какую-либо закономерность. Однако соберем линейную комбинацию векторов состояния первого подрегистра при фиксированном состоянии второго подрегистра. Получим

$$\begin{aligned}
 |\psi_2\rangle = & \frac{1}{\sqrt{512}} \{(|0\rangle + |6\rangle + \dots + |510\rangle) |1\rangle + \\
 & + (|1\rangle + |7\rangle + \dots + |511\rangle) |2\rangle + \\
 & + (|2\rangle + |8\rangle + \dots + |506\rangle) |4\rangle + \\
 & + (|3\rangle + |9\rangle + \dots + |507\rangle) |8\rangle + \\
 & + (|4\rangle + |10\rangle + \dots + |508\rangle) |16\rangle + \\
 & + (|5\rangle + |11\rangle + \dots + |509\rangle) |11\rangle\}. \quad (5.3)
 \end{aligned}$$

Напомним, что вектор состояния каждого из подрегистров, имеющий вид $|n\rangle$, записывается в виде $|1, 0, 0, \dots, 1\rangle$, где последовательность единиц и нулей представляет собой двоичную запись целого числа n .

В нашем конкретном примере внимательное рассмотрение суммы векторов состояния в любой из скобок выражения (5.3) показывает наличие периода $r = 6$. Из этого выражения видно, что знание всего вектора состояния избыточно для нахождения периода: линейная комбинация состояний первого подрегистра содержит период, закодированный в линейной комбинации состояний первого подрегистра. Поэтому в качестве следующего шага "измерим" второй подрегистр. Чтобы понять, каков может быть результат измерения, необходимо вспомнить, как формализуется измерение в квантовой механике.

Один из основных постулатов квантовой механики гласит, что если квантовая система до измерения находилась в состоянии $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$, представляющем собой линейную суперпозицию собственных состояний какого-либо оператора \hat{A} , $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle$, отвечающего физической величине a , то после измерения этой величины с вероятностью $|c_n|^2$ получается одно из собственных значений a_n , а система сразу после измерения оказывается в состоянии $|\psi_n\rangle$ [7]. В результате измерения происходит редукция (коллапс) квантового состояния $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_n\rangle$.

Допустим, что после измерения второй подрегистр оказался в состо-

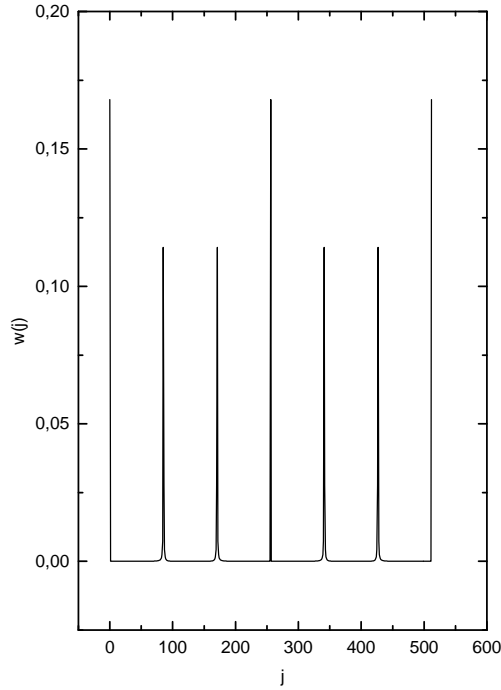


Рис. 5.1: Зависимость от j вероятности обнаружить первый подрегистр в состоянии $|j\rangle$. Поскольку j целое, кривая является огибающей дискретных пиков.

янии $|2\rangle$. Весь квантовый компьютер при этом переходит в состояние

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{86}} \sum_{a=0}^{85} |6a + 1\rangle|2\rangle. \quad (5.4)$$

Нормировочный множитель выбран из обычного условия $\langle\psi_3|\psi_3\rangle = 1$.

Из первых принципов теории сигналов известно, что для выявления периодической структуры нужно применить преобразование Фурье. В данном случае более удобно обратное квантовое преобразование Фурье первого подрегистра, которое сводится к переводу компьютера в новое состояние

$$|\psi_4\rangle = \left(\hat{U}_{\text{QFT}}^\dagger \otimes 1\right) \frac{1}{\sqrt{86}} \sum_{a=0}^{85} |6a + 1\rangle|2\rangle. \quad (5.5)$$

Используя (4.14), получим

$$\begin{aligned} |\psi_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{86 \times 512}} \sum_{a=0}^{85} \sum_{j=0}^{511} e^{-i2\pi j(6a+1)/512} |j\rangle |2\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{86 \times 512}} \sum_{j=0}^{511} e^{-i2\pi j/512} \left(\sum_{a=0}^{85} e^{-i2\pi j \cdot 6a/512} \right) |j\rangle |2\rangle. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Согласно общим принципам квантовой механики вероятность обнаружить первый подрегистр в состоянии $|j\rangle$ равна

$$w(j) = \frac{1}{86 \times 512} \left| \sum_{a=0}^{85} e^{-i2\pi j \cdot 6a/512} \right|^2 = \frac{1}{86 \times 512} \left[\frac{\sin^2 \left(\frac{6\pi j}{512} \times 86 \right)}{\sin^2 \frac{6\pi j}{512}} \right] \quad (5.7)$$

График зависимости $w(j)$ от $0 \leq j \leq 511$ приведен на рис. 5.1. На нем ясно видны пики. Аналогичные пики в угловом распределении проявляются при рассеянии частиц на периодической кристаллической решетке. Их положение дается законом Вульфа-Брэггов. В нашем случае положение пиков дается нулями знаменателя: $j_l = 512l/6$. Решения при целых j отвечают $l = 0, 3, 6$. Им соответствуют большие пики, расположенные при $j = 0, 256, 512$. Положение малых пиков дается условием, когда $512l/6$ близко к целому числу. Поскольку $512/6 = 85 + 1/3$, малые пики расположены при $j = 85, 171, 341, 427$.

- *Задача.* Вычислить (а) высоты больших и малых пиков на рис. 5.1 и (б) величину вероятности $w(j)$ для j , отличающихся на ± 1 от тех значений, при которых возникают пики вероятности. Этот расчет позволит оценить остроту пиков вероятности.

Допустим, после прогона квантового алгоритма Шора получено $j = 85$, с вероятностью $w \approx 0.1142$. Тогда период $r \approx 512/85 \approx 6$. По этому поводу стоит заметить, что в теории чисел существует регулярная процедура получения значения r из известного отношения типа $\frac{85}{512}$. Она основана на представлении отношений целых чисел в виде цепных дробей

$$\frac{85}{512} = \frac{1}{6 + \frac{1}{42 + \frac{1}{2}}}$$

- *Задача.* Повторить приведенное выше рассмотрение этапов алгоритма Шора для поиска множителей числа $N = 15$.

Разумеется, в рассмотренном примере заранее было известно, что $r = 6$. Однако и в общем случае значение r извлекается из положения пиков. Чтобы в этом убедиться, вернемся к (5.1) и повторим описанную выше цепочку действий при произвольных x и r . Аналогично тому, что было сделано при рассмотрении частного случая $r = 6$, выделим конкретный вектор состояния второго подрегистра $|x^{j_0}(\text{mod } N)\rangle$ и соберем при нем всю линейную комбинацию векторов состояния первого подрегистра:

$$\begin{aligned}
|\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^t}} [(|0\rangle + |r\rangle + |2r\rangle + \dots) |x^0\rangle + \\
&+ (|1\rangle + |r+1\rangle + |2r+1\rangle + \dots) |x^1\rangle + \\
&\dots + \\
&+ (|j_0\rangle + |r+j_0\rangle + |2r+j_0\rangle + \dots) |x^{j_0}\rangle + \dots] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j_0=0}^{r-1} \sum_{a=0}^{a_{\max}} |ar+j_0\rangle |x^{j_0}\rangle
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Здесь

$$a_{\max} \approx \frac{2^t}{r} - 1,$$

и знак приближенного равенства означает, что при различных j_0 верхний предел a_{\max} может слегка отличаться выписанного. Проведем измерение второго подрегистра и с отличной от нуля вероятностью получим после измерения состояние с каким-то j_0 :

$$|\psi_3\rangle = \sqrt{\frac{r}{2^t}} \sum_{a=0}^{a_{\max}} |ar+j_0\rangle |x^{j_0}\rangle. \tag{5.9}$$

Новый нормировочный множитель выбран из условия $\langle\psi_3|\psi_3\rangle = 1$. Применяем обратное квантовое Фурье-преобразование к первому подрегистру:

$$|\psi_4\rangle = (\hat{U}_{\text{QFT}}^\dagger \otimes 1) |\psi_3\rangle = \sum_{j=0}^{2^t-1} \left(\frac{\sqrt{r}}{2^t} \sum_{a=0}^{a_{\max}} e^{-i\frac{2\pi j}{2^t}(ar+j_0)} \right) |j\rangle |x^{j_0}\rangle. \tag{5.10}$$

Последний шаг: измеряем первый подрегистр и получаем состояние квантового компьютера $|j\rangle |x^{j_0}\rangle$ с вероятностью, равной квадрату модуля

выражения в скобках (5.10):

$$w(j) = \left| \frac{\sqrt{r}}{2^t} \sum_{a=0}^{a_{\max}} e^{-i\frac{2\pi j}{2^t}(ar+j_0)} \right|^2 = \frac{r}{2^{2t}} \left(\frac{\sin^2 \frac{\pi jr}{2^t} a_{\max}}{\sin^2 \frac{\pi jr}{2^t}} \right). \quad (5.11)$$

Анализ этого выражения проводится так же как в разобранный выше частном случае. Пики вероятности $w(j)$ даются нулями знаменателя (5.11) и отвечают $j = j_l$, где

$$j_l = \frac{2^t}{r} l.$$

Отсюда, в принципе, и находится период r . Как показывает разобранный выше частный случай, возможно, необходим более тщательный анализ ситуации, когда получается не целое j_l . Существенно, что такой анализ не требует экспоненциально больших затрат времени и проводится чисто классическими методами.

В проведенном анализе алгоритма Шора использовался конкретный выбор $x = 2$. В принципе, для поиска множителей другого числа такой выбор мог бы оказаться неудачным. В этом случае следовало бы попробовать другие числа x . Ясно, что несколько таких попыток не приведут к экспоненциальному росту ресурсных затрат.

5.2 Алгоритм Гровера поиска в неструктурированной базе данных.

Классическая задача о поиске определенной записи в неструктурированной базе данных из N элементов требует примерно N обращений к ней. Грубо говоря, мы перебираем все записи, пока не найдем нужную. В 1997 году Л. Гровер опубликовал в ведущем мировом физическом журнале статью [L. K. Grover, Physical Review Letters **79**, 325 (1997)], в которой предложил квантовый алгоритм поиска в неструктурированной *квантовой* базе данных из N записей, позволяющий найти нужную запись после примерно \sqrt{N} обращений к этой базе. Хотя квантовое ускорение не экспоненциально, как в случае алгоритма Шора, а степенное, при $N = 10^8$ время поиска уменьшалось бы в 10000 раз по сравнению с классическим случаем.

Квантовая база данных состоит из n -кубитовых регистров, каждый из которых представлен вектором состояния вида $|\underbrace{1001101000 \dots}_n\rangle$ с последовательностью нулей и единиц, являющихся двоичным представлением какого-то целого числа x . Для краткости, как уже указывалось выше, такой n -кубитовый вектор состояния можно записывать в виде $|x\rangle$. Всего имеется $N = 2^n$ записей в квантовой базе данных. Среди этих N векторов состояния имеется один помеченный вектор состояния $|\omega\rangle$, который и нужно найти, обращаясь к базе минимальное число раз. Запрос в квантовую базу данных производится путем обращения к *квантовому оракулу*. Так в современной литературе по квантовым алгоритмам называют устройство, которое сообщает нам значения бинарной, то есть принимающей всего два значения 0 и 1, функции $f_\omega(x)$. Эта функция обладает свойством

$$f_\omega(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x = \omega, \\ 0, & \text{если } x \neq \omega. \end{cases} \quad (5.12)$$

Действие оракула изображается унитарным преобразованием

$$\hat{U}_{f_\omega}|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|y + f_\omega(x)\rangle. \quad (5.13)$$

Здесь $|x\rangle$ представляет собой n -кубитовый вектор состояния, а $|y\rangle$ является однокубитовым вектором; сложение осуществляется по модулю 2. Удобство квантового оракула состоит в том, что ему можно предъявлять не только один квантовый регистр, но и линейную комбинацию двух или нескольких регистров. Подействуем оператором \hat{U}_{f_ω} на вектор состояния $|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$. С учетом правила действия (5.13) получим

$$\begin{aligned} \hat{U}_{f_\omega}|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle|f_\omega(x)\rangle - |x\rangle|1 + f_\omega(x)\rangle) = \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\omega\rangle|1\rangle - |\omega\rangle|0\rangle) = -|\omega\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, & \text{если } x = \omega \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle|0\rangle - |x\rangle|1\rangle) = +|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, & \text{если } x \neq \omega \end{cases}. \end{aligned}$$

Этот результат можно переписать как

$$\hat{U}_{f_\omega}|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = (-1)^{f_\omega(x)}|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Если не обращать внимания на второй однокубитовый регистр, то \hat{U}_{f_ω} осуществляет фазовое преобразование n -кубитового регистра $|x\rangle \rightarrow$

$(-1)^{f_\omega(x)}|x\rangle$. Если найдена нужная запись в квантовой базе данных, то, с учетом (5.12), $x = \omega$, и $|\omega\rangle \rightarrow -|\omega\rangle$. Если поиск неудачен, то есть $x \neq \omega$, то $|x\rangle \rightarrow |x\rangle$. Указанное действие представляет собой инверсию фазы искомого квантового регистра и может быть представлено в виде оператора \hat{U}_ω , действующего на n -кубитовый регистр:

$$\hat{U}_\omega = \hat{I} - 2|\omega\rangle\langle\omega|. \quad (5.14)$$

Отсюда видно, что $\hat{U}_\omega|\omega\rangle = -|\omega\rangle$ и $\hat{U}_\omega|x\rangle = |x\rangle$, если $x \neq \omega$.

Для построения алгоритма с помощью формулы (4.8) из исходного вектора состояния $|\underbrace{00 \cdots 0}_n\rangle$ строим вектор состояния

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle, \quad (5.15)$$

где $N = 2^n$. Среди N векторов состояния $|x\rangle$ присутствует один нужный $|\omega\rangle$ с вероятностью $|\langle\omega|s\rangle|^2 = 1/N$. Для того чтобы его найти вводится оператор

$$\hat{U}_s = 2|s\rangle\langle s| - \hat{I}. \quad (5.16)$$

Этот оператор действует так: $\hat{U}_s|s\rangle = |s\rangle$, $\hat{U}_s|\omega\rangle = 2|s\rangle\langle s|\omega\rangle - |\omega\rangle \equiv \frac{2}{\sqrt{N}}|s\rangle - |\omega\rangle$. Последнее тождество выполняется ввиду того что

$$\langle\omega|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

Теперь все готово для того, чтобы ввести *итерацию Гровера*, которая представляется действием оператора $\hat{U}_G = \hat{U}_s\hat{U}_\omega$. С учетом (5.14) и (5.16) находим, что

$$\begin{aligned} \hat{U}_G|s\rangle &= \left(1 - \frac{4}{N}\right)|s\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}|\omega\rangle, \\ \hat{U}_G|\omega\rangle &= -\frac{2}{\sqrt{N}}|s\rangle + |\omega\rangle. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Отсюда видно, что после итерации Гровера $\hat{U}_G|s\rangle$ амплитуда амплитуда вероятности состояния $|s\rangle$ слегка уменьшается за счет появления амплитуды вероятности искомого состояния $|\omega\rangle$. Покажем, что после многократно проведенной итерации Гровера искомое состояние $|\omega\rangle$ будет иметь

единичную вероятность. Для этого удобно представить (5.17) в матричном виде

$$\hat{U}_G \begin{pmatrix} |s\rangle \\ |\omega\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{4}{N} & \frac{2}{\sqrt{N}} \\ -\frac{2}{\sqrt{N}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |s\rangle \\ |\omega\rangle \end{pmatrix}.$$

При $N \gg 1$ добавкой $4/N$ можно пренебречь, и матрица становится похожей на матрицу поворота на бесконечно малый угол 2θ , где $\theta = 1/\sqrt{N}$. Отсюда понятно, что \hat{U}_G^n в матричном представлении в базисе $|s\rangle, |\omega\rangle$ будет n -ой степенью матрицы поворота

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 & 2\theta \\ -2\theta & 1 \end{pmatrix}^n &= \left(\hat{1} + i \frac{2n\theta}{n} \sigma_y \right)^n \approx e^{2in\theta \sigma_y} = \cos 2n\theta + i \sigma_y \sin 2n\theta = \\ &= \begin{pmatrix} \cos 2n\theta & \sin 2n\theta \\ -\sin 2n\theta & \cos 2n\theta \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Здесь $\hat{1}$ суть единичная 2×2 матрица, а $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ одна из матриц Паули. Отсюда получаем, что

$$\begin{aligned} \hat{U}_G^n |s\rangle &= \cos 2n\theta |s\rangle + \sin 2n\theta |\omega\rangle, \\ \hat{U}_G^n |\omega\rangle &= \cos 2n\theta |\omega\rangle - \sin 2n\theta |s\rangle. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Если $2n\theta = \pi/2$, то вероятность обнаружения искомого состояния $|\omega\rangle$ близка к единице. Это значит, что после $n = \left\lfloor \frac{\pi}{4} \sqrt{N} \right\rfloor$ обращений к оракулу с достоверностью найдется нужная квантовая запись $|\omega\rangle$. Важно, что надо знать, когда следует остановить итерации Гровера, поскольку после указанного числа итераций вероятность обнаружения состояния $|\omega\rangle$ начнет уменьшаться.

Итак, алгоритм Гровера, в принципе, позволяет ускорение поиска примерно в \sqrt{N} раз по сравнению с классическими алгоритмами, требующими примерно N обращений к классическому оракулу. Другое дело что сам процесс перекодирования базы данных в квантовый режим может потребовать затрат ресурсов, перекрывающих выгоды алгоритма Гровера. В этой связи в литературе высказывались соображения, что квантовый поиск мог бы оказаться полезным при решении других задач квантовых вычислений в качестве подпрограммы.

Допустим, что в квантовой базе данных из N записей имеется r помеченных записей $|\omega_i\rangle$, где $i = 1, 2, \dots, r$. Найдем минимальное число

обращений к квантовому оракулу, необходимое для обнаружения хотя бы одной из помеченных записей. Для этого обратим внимание на геометрическую интерпретацию алгоритма Гровера. В случае одной помеченной записи $|\omega\rangle$ квантовый оракул \hat{U}_ω отражает векторы состояния в плоскости, ортогональной $|\omega\rangle$: $\hat{U}_\omega|\omega\rangle = -|\omega\rangle$, $\hat{U}_\omega|x\rangle = |x\rangle$, если $x \neq \omega$. Разумеется, плоскости, векторы и т.д. здесь относятся к пространству квантовых состояний, а не обычному координатному пространству. Сама же итерация Гровера, согласно (5.18) интерпретируется как поворот в плоскости, натянутой на векторы $|s\rangle$ и $|\omega\rangle$ в сторону вектора $|\omega\rangle$. Изменим алгоритм так, чтобы квантовый оракул

$$\hat{U}_{\tilde{\omega}} = \hat{I} - 2|\tilde{\omega}\rangle\langle\tilde{\omega}|$$

отражал в плоскости, ортогональной вектору состояния

$$|\tilde{\omega}\rangle = r^{-1/2} \sum_{i=1}^r |\omega_i\rangle$$

Модифицированная для решения поставленной задачи итерация Гровера будет иметь вид $\hat{U}_{\tilde{G}} = \hat{U}_s \hat{U}_{\tilde{\omega}}$. Для того чтобы узнать, как этот оператор действует на $|s\rangle$, вычислим амплитуду вероятности того, что состояние $|\tilde{\omega}\rangle$ содержится в состоянии $|s\rangle$:

$$\langle s|\tilde{\omega}\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{i=1}^r \langle s|\omega_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{rN}} \sum_{j=0}^{N-1} \langle j|\omega_i\rangle = \sqrt{\frac{r}{N}},$$

при этом $\langle s|\tilde{\omega}\rangle = \langle\tilde{\omega}|s\rangle$. Здесь было учтено, что $|s\rangle$ имеет вид (5.15) и что среди N состояний вычислительного базиса $|j\rangle$ обязательно присутствуют все помеченные состояния $|\omega_i\rangle$ в количестве r штук. Теперь можно найти, что

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\tilde{G}}|s\rangle &= \hat{U}_s(\hat{I} - 2|\tilde{\omega}\rangle\langle\tilde{\omega}|)|s\rangle = \hat{U}_s(|s\rangle - 2|\tilde{\omega}\rangle\langle\tilde{\omega}|s\rangle) = \\ &= |s\rangle - 2\sqrt{\frac{r}{N}}(2|s\rangle\langle s|\tilde{\omega}\rangle - |\tilde{\omega}\rangle) = \left(1 - 4\frac{r}{N}\right)|s\rangle + 2\sqrt{\frac{r}{N}}|\tilde{\omega}\rangle. \end{aligned}$$

Сравнение с (5.17) показывает, что наша задача сводится к предыдущей с помощью замены $N \rightarrow N/r$. Поэтому поиск среди N состояний одного из r помеченных требует $\sqrt{N/r}$ обращений к квантовому оракулу.

5.3 Телепортация неизвестного квантового состояния.

Введем в действие трех персонажей, которые фигурируют во всех современных публикациях по проблеме квантовых информационных технологий. Это Алиса (А), Боб (В) и Чарли (С). Допустим, Чарли приготовил квантовое состояние

$$|\psi\rangle_C = a|0\rangle_C + b|1\rangle_C.$$

Здесь и далее нижние индексы A, B, C указывают на принадлежность кубита конкретному из указанных персонажей. Чарли передал Алисе этот кубит и исчез в неизвестном направлении, не сообщив ей значения комплексных амплитуд вероятности a и b . Бобу нужен этот кубит. Как Алиса может передать этот кубит Бобу, если Боб находится на расстоянии, не допускающем прямого контакта, а единственным видом связи между ним и Алисой является только телефон? Алиса могла бы измерить кубит, проецируя его на базисные состояния либо $|0\rangle_A$, либо $|1\rangle_A$, и сообщить результат Бобу по телефону. Но принципы квантовой механики говорят, что при измерении квантовое состояние объекта может измениться неконтролируемым образом. Например, с вероятностью $|a|^2$ произойдет редукция (коллапс) вектора состояния $a|0\rangle_C + b|1\rangle_C \rightarrow |0\rangle_C$. Информация о b разрушится в результате измерения. Алиса могла бы скопировать неизвестные ей вектор состояния $|\psi\rangle_C$ в числе копий, которое позволило бы ей определить модули амплитуд вероятности и их относительную фазу.

- *Задача.* Пусть кубит представляет собой частицу со спином $1/2$, так что $|0\rangle = |\uparrow_z\rangle \equiv |s_z = +1/2\rangle$, $|1\rangle = |\downarrow_z\rangle \equiv |s_z = -1/2\rangle$. Укажите способ определения в серии измерений модулей $|a|$ и $|b|$ и относительной фазы амплитуд вероятности a и b в линейной суперпозиции $a|0\rangle + b|1\rangle$.

Для копирования кубита Алисе потребовался бы квантовый ксерокс, в качестве которого выступал бы квантовомеханический оператор $\hat{U}_{\text{херок}}$, действующий по правилу

$$\hat{U}_{\text{херок}}|\psi\rangle|0\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle. \quad (5.19)$$

Оператор $\hat{U}_{\text{херокс}}$ создает неизвестное состояние $|\psi\rangle$ вместо некоторого "пустого" состояния $|0\rangle$.

Увы, квантовый ксерокс создать невозможно! Препятствием к этому служит теорема о невозможности клонирования неизвестного квантового состояния, доказанная в 1982 году Вутерсом и Зуреком (Wootters, Zurek). Теорема доказывается от противного. Допустим, что существует оператор $\hat{U}_{\text{херокс}}$, удовлетворяющий свойству (5.19) для любого вектора состояния $|\psi\rangle$. Но тогда утверждение должно быть справедливо для линейной комбинации векторов состояния $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$. Но между тем в левой части (5.19) по свойству линейности оператора $\hat{U}_{\text{херокс}}$ получается выражение

$$c_1|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle,$$

тогда как в правой части (5.19) получается выражение

$$c_1^2|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + c_2^2|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle + c_1c_2(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle),$$

отличающееся от только что полученного. Противоречие! Следовательно, оператора с требуемым свойством не существует.

Выходом из ситуации является использование Алисой и Бобом запутанных состояний двух кубитов. Еще в 1966 году знаменитый ирландский физик Дж. Белл, работавший в ЦЕРНе, ввел удобный базис для запутанных состояний двух частиц, с тех пор называемый базисом Белла. В случае двухкубитовых состояний, которыми обладают Алиса и Боб, базис состоит из четырех векторов состояния:

$$\begin{aligned} |\phi^\pm\rangle_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{AB} \pm |11\rangle_{AB}), \\ |\psi^\pm\rangle_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_{AB} \pm |10\rangle_{AB}). \end{aligned} \quad (5.20)$$

В этой записи и далее $|00\rangle_{AB} \equiv |0\rangle_A|0\rangle_B$ и т.д., но состояния $|\phi^\pm\rangle_{AB}$ и $|\psi^\pm\rangle_{AB}$ в виде прямых произведений не представимы ввиду их запутанности. Нижние двойные индексы в виде заглавных латинских букв указывают на принадлежность персонажам, обладающим запутанным двухкубитным состоянием.

- *Задача.* Выразить все четыре состояния базиса Белла (5.20) в виде четырехрядных спиноров.

- *Задача.* Допустим, что однокубитовые состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ являются состояниями с определенной проекцией спина не на ось z , а на произвольную ось, заданную единичным вектором $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$. Решить предыдущую задачу для такого выбора оси квантования.

Алиса и Боб должны быть предусмотрительными и заранее приготовить совместное двухкубитовое запутанное состояние. Допустим, этим состоянием будет $|\phi^+\rangle_{AB}$. После этого Боб может увозить свой кубит сколь угодно далеко и хранить в надежном месте. Алиса также хранит свой кубит, запутанный с кубитом Боба. Чтобы проиллюстрировать этот пункт, допустим, что Алиса и Боб делят двухкубитовое состояние $|\psi^-\rangle_{AB} = (|01\rangle_{AB} - |10\rangle_{AB})/\sqrt{2}$. Если кубиты реализуются как состояния частицы со спином $1/2$ с определенной проекцией спина на ось z , то

$$|\psi^+\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\downarrow_z\rangle_{AB} - |\downarrow_z\uparrow_z\rangle_{AB}).$$

Запутанное состояние $|\psi^-\rangle_{AB}$ в этом случае является состоянием с полным спином $S = 0$. Приготовив две частицы в таком состоянии, их можно разносить на большие расстояния и хранить. Это вполне реализуемая ситуация, особенно если учесть, что одиночный электрон хранился в ловушке Пеннинга в течение примерно года.

- *Задача.* В экспериментах по прецизионному измерению магнитного момента электрона использовалась *ловушка Пеннинга* в виде комбинации однородного магнитного поля $\mathbf{B} = B(0, 0, 1)$ и квадрупольного электростатического потенциала $\varphi(\mathbf{r}) = \gamma(x^2 + y^2 - 2z^2)$, $\gamma = \text{const}$. Найти уровни энергии электрона с магнитным моментом $\mu = \mu_B \frac{g}{2}$ в такой ловушке. Определить квантовые числа двух наиболее близких уровней. Используя экспериментальные значения $\frac{g}{2} = 1.00115965218073(28)$ и $B = 5$ Тесла, вычислить длину волны излучения, испускаемого при переходе между такими уровнями в приближении $\gamma = 0$. *Указание.* Решить уравнение Паули с векторным потенциалом магнитного поля в виде $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{B} \times \mathbf{r}]$ методом разделения переменных в цилиндрических координатах (r, φ, z) , вводя новую радиальную координату $\rho \propto r^2 = x^2 + y^2$.

Другая пара максимально запутанных состояний Белла $|\phi^\pm\rangle$ в спиновой записи выглядит как $(|\uparrow_z\uparrow_z\rangle \pm |\downarrow_z\downarrow_z\rangle)/\sqrt{2}$. Для приготовления таких со-

стояний требуется включить спин-спиновое взаимодействие и поместить систему в переменное магнитное поле. Возможность приготовления таких состояний обсуждается в следующей главе.

Теперь решение поставленной задачи, называемое в литературе протоколом телепортации неизвестного квантового состояния, можно представить в виде последовательности следующих действий. Получив от Чарли неизвестное состояние $a|0\rangle_C + b|1\rangle_C$, Алиса присоединяет к нему свой кубит, спутанный с кубитом Боба, приготовив тем самым состояние с вектором $|\psi_i\rangle_{ABC} = (a|0\rangle_C + b|1\rangle_C)|\phi^+\rangle_{AB}$. Вектор такого состояния можно преобразовать так:

$$\begin{aligned} |\psi_i\rangle_{ABC} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a|0\rangle_C + b|1\rangle_C)(|00\rangle_{AB} + |11\rangle_{AB}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a|0\rangle_C|0\rangle_A|0\rangle_B + \\ &+ a|0\rangle_C|1\rangle_A|1\rangle_B + b|1\rangle_C|0\rangle_A|0\rangle_B + b|1\rangle_C|1\rangle_A|1\rangle_B) = \frac{1}{2} \times \\ &\times [a(|\phi^+\rangle_{AC} + |\phi^-\rangle_{AC})|0\rangle_B + a(|\psi^+\rangle_{AC} - |\psi^-\rangle_{AC})|0\rangle_B + \\ &+ b(|\psi^+\rangle_{AC} + |\psi^-\rangle_{AC})|0\rangle_B + b(|\phi^+\rangle_{AC} - |\phi^-\rangle_{AC})|1\rangle_B] = \\ &= \frac{1}{2} [|\phi^+\rangle_{AC}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + |\phi^-\rangle_{AC}(a|0\rangle_B - b|1\rangle_B) + \\ &+ |\psi^+\rangle_{AC}(a|1\rangle_B + b|0\rangle_B) + |\psi^-\rangle_{AC}(-a|1\rangle_B + b|0\rangle_B)]. \end{aligned}$$

Если учесть, что $\sigma_x|0\rangle = |1\rangle$, $\sigma_x|1\rangle = |0\rangle$, $i\sigma_y|0\rangle = -|1\rangle$, $i\sigma_y|1\rangle = |0\rangle$, $\sigma_z|0\rangle = |0\rangle$, то окончательно получаем

$$\begin{aligned} |\psi_i\rangle_{ABC} &= \frac{1}{2} [|\phi^+\rangle_{AC}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + \\ &+ |\phi^-\rangle_{AC}\sigma_z^{(B)}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + \\ &+ |\psi^+\rangle_{AC}\sigma_x^{(B)}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + \\ &+ |\psi^-\rangle_{AC}i\sigma_y^{(B)}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B)]. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Верхний индекс (B) у $\sigma_{x,y,z}$ означает, что соответствующая матрица Паули должна действовать на кубит B . Цель этих действий состоит в том, что начальный вектор состояния трех кубитов оказался переразложен по базису Белла Алисы и Чарли. После этого Алиса может провести измерение в указанном базисе.

Напомним, что процесс измерения в квантовой механике представлен действием некоторого оператора на вектор состояния, в котором находилась квантовая система. Обозначим этот вектор состояния через $|\phi\rangle$.

Действие любого оператора \hat{A} можно представить в виде линейной комбинации

$$\hat{A} = \sum_{i,j} C_{ji} |\psi_j\rangle \langle \psi_i|.$$

В этом выражении векторы состояния $|\psi_i\rangle$ образуют ортонормированный базис $\langle \psi_j | \psi_i \rangle = \delta_{ij}$. Тогда коэффициенты разложения C_{ji} вычисляются по формуле $C_{ji} = \langle \psi_j | \hat{A} | \psi_i \rangle$. С учетом этого действие оператора запишется как

$$\hat{A}|\phi\rangle = \sum_{i,j} C_{ji} |\psi_j\rangle \langle \psi_i | \phi \rangle.$$

Если $|\psi_i\rangle$ являются собственными векторами оператора \hat{A} с собственными значениями a_i , то есть $\hat{A}|\psi_i\rangle = a_i|\psi_i\rangle$, то $C_{ji} = a_i\delta_{ji}$ (нет суммирования по i), и

$$\hat{A} = \sum_i a_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|.$$

Среднее значение оператора \hat{A} в состоянии $|\phi\rangle$ есть $\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle = \sum_i a_i |\langle \psi_i | \phi \rangle|^2$, поэтому $|\langle \psi_i | \phi \rangle|^2$ равно вероятности того, что при измерении физической величины, представленной оператором \hat{A} , в квантовом состоянии с вектором $|\phi\rangle$ будет получено значение a_i . Если измерение показало, что значение физической равно a_i , то квантовая система оказалась после измерения в состоянии $|\psi_i\rangle$. Поэтому говорят, что измерение, дающее значение физической величины a_i , проектирует вектор состояния $|\phi\rangle$ на один из базисных векторов $|\psi_i\rangle$. Оператор проектирования записывается как $\hat{P}_i = |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$. Действительно,

$$\hat{P}_i^2 = |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_i \rangle \langle \psi_i| = |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \hat{P}_i.$$

Поскольку $\hat{P}_i|\phi\rangle = |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \phi \rangle$, то условие нормировки вектора состояния, получившегося после измерения, требует записать результат проектирования как

$$\hat{P}_i|\phi\rangle = \frac{|\psi_i\rangle}{\sqrt{\langle \phi | \hat{P}_i | \phi \rangle}}.$$

- *Задача.* Допустим, некто измеряет проекции спина частицы со спином $1/2$ на декартовы оси x , y и z . Найти операторы проектирования (6 операторов!) на состояния с проекциями $\pm 1/2$ на все эти оси.

Вернемся к действиям Алисы. Проведение измерений в базисе Белла означает, что Алиса применяет один из четырех операторов проектирования $|\phi^\pm\rangle_{AC}\langle\phi^\pm|_{AC}$, $|\psi^\pm\rangle_{AC}\langle\psi^\pm|_{AC}$.

- *Задача.* Выразить все четыре оператора проектирования на базис состояний Белла $|\phi^\pm\rangle_{AC}\langle\phi^\pm|_{AC}$, $|\psi^\pm\rangle_{AC}\langle\psi^\pm|_{AC}$ через линейные комбинации прямых произведений матриц Паули $\sigma_i^{(A)} \otimes \sigma_j^{(C)}$ и $\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{1}^{(C)}$.

Допустим, что в результате измерений, выполненных Алисой над кубитами, находящимися в ее распоряжении, вектор их состояния оказался $|\phi^+\rangle_{AC}$. Алиса звонит Бобу и сообщает свой результат. Тогда в соответствии с выражением (5.21) Боб знает, что он получил квантовый бит в состоянии $a|0\rangle_B + b|0\rangle_B$. Если в результате измерений Алисы произошла проекция на состояние $|\phi^-\rangle_{AC}$, и Алиса сообщила об этом Бобу, он, в соответствии с (5.21) должен подействовать на свой кубит оператором $\sigma_z^{(B)}$ и после этого с гарантией получить тот же самый кубит. Если Алиса осуществила проекцию на вектор состояния $|\psi^+\rangle_{AC}$, Боб применяет к своему кубиту вентиль $\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(B)} \equiv \sigma_x^{(B)}$ для того, чтобы получить кубит $a|0\rangle_B + b|1\rangle_B$ и т.д. Произошла телепортация неизвестного квантового состояния к Бобу, который может находиться сколь угодно далеко от Алисы. Теорема о запрете клонирования не нарушилась, поскольку исходный кубит, приготовленный Чарли, в результате измерений, проведенных Алисой, разрушился. Мы видим, что такое сугубо квантовое явление как существование запутанных квантовых состояний может использовать как ресурс при квантовой передаче данных. Квантовое запутывание является следствием нелокальных квантовых корреляций между состояниями разнесенных в пространстве объектов. Разумеется, выводы специальной теории относительности не нарушаются, поскольку при телепортации не передается ни энергия, ни информация. Ведь для того, чтобы провести телепортацию квантового состояния, Алисе, согласно протоколу, нужно передать Бобу классическую информацию по классическому каналу связи. При этом сообщение передается со скоростью, не превышающей скорости света.

Экспериментальное подтверждение алгоритма телепортации было получено в конце 90-х годов прошлого века с помощью запутанных состояний поляризации фотонов. Расстояние телепортации было порядка нескольких метров. С тех пор квантовые инженеры продвинулись на

столько далеко, что квантовая телепортация осуществляется с использованием коммерческих оптоволоконных сетей связи на расстояния порядка сотен метров. Подробности этих интереснейших исследований и ссылки на специальную литературу можно найти в статье N. Gisin, R. Thew, Nature Photonics, **1**, 165 (2007)[arXiv:quant-ph/0703255].

Глава 6

Квантовые компьютеры и квантовые ИТ-технологии.

Из приведенных в предыдущей главе примеров должно быть ясно, что принципиальная блок-схема работы квантового компьютера включает три основных элемента. Во-первых, это инициализация входного регистра кубитов. Во-вторых, действие на входной регистр оператора, в котором закодирован квантовый алгоритм. Как было показано, например, в [6], любой такой оператор с любой наперед заданной точностью можно реализовать, используя лишь однокубитовые и двухкубитовые вентили. В-третьих, необходимо произвести измерение выходного регистра, полученного в результате действия оператора, кодирующего алгоритм, и считать полученный результат. В этой главе дается обзор обсуждаемой в настоящее время элементной базы для создания квантовых вентилях и отмечаются как проблемы на пути ее реализации, так и возможные методы их решения. Основное внимание будет уделено рассмотрению физической реализации на основе динамики частиц спина $1/2$ во внешнем переменном однородном магнитном поле.

6.1 Возможная элементная база квантового компьютера.

Практическая реализация квантовых компьютеров пока еще находится в зачаточном состоянии. Ниже перечислены некоторые экспериментальные схемы. Подробные комментарии к ним и ссылки на литературу

даны в книге [8] и статьях [9, 10, 11].

- Атомы, взаимодействующие с фотонами в резонаторах.
- Одиночные фотоны, когда кубиты реализуются либо как поляризационные состояния фотонов, либо как фотоны, распространяющиеся по двум альтернативным траекториям.
- Одномерная цепочка ионов в ловушке Пауля, которая представляет собой комбинацию статических и переменных электрических полей. Переменные поля необходимы потому, что в силу теоремы Ирншоу никакая комбинация статических электрических полей не может обеспечить устойчивость ансамбля заряженных частиц. Кубитами являются внутренние квантовые состояния ионов. Кубиты управляются лазерными лучами, которые можно фокусировать на отдельном ионе. Двухкубитовые вентили реализуются за счет возбуждения колебательных мод ионов.
- Нейтральные атомы в оптических решетках. Оптическая решетка представляет собой комбинацию пересекающихся лазерных пучков, способную удерживать атомы. Опыт работы с такими решетками получен при исследовании, в частности, конденсатов Бозе-Эйнштейна.
- Методы ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Методы основаны на спиновой динамике в переменном по времени магнитном поле. Рассматриваются реализации как в жидкой фазе при комнатных температурах так и в спинах, внедренных в твердотельную фазу при низких температурах.
- Квантовые точки. Квантовая точка является как бы искусственным атомом, в котором специально подобранная наноструктура удерживает в связанном состоянии один или несколько электронов в полупроводнике.
- Кванты магнитного потока в сверхпроводниках. Это направление квантовой технологии использует макроскопическую квантовую когерентность ансамбля сверхпроводящих электронов.

Уже из этого простого перечисления видно, что проблема разработки необходимой элементной базы для создания квантовых компьютеров представляет собой интереснейшее поле деятельности. Несмотря на значительные усилия многочисленных групп исследователей пока продемонстрирована лишь принципиальная возможность создания и манипуляции с небольшим числом кубитов. Вопрос о масштабировании к большим интегрированным системам квантовых вентилей остается открытым. Ниже на примере частицы со спином $1/2$ будет продемонстрирована возможность реализации одно- и двух-кубитовых квантовых вентилей. Подробности такой реализации можно почерпнуть в обзорных статьях [11, 12].

6.2 Частица со спином $1/2$ в магнитном поле как пример кубита.

Как уже отмечалось, примером однокубитового вентиля является частица со спином $s = 1/2$. Покажем, как можно, в принципе, реализовать однокубитовые операции с помощью внешнего магнитного поля. Будем считать, что поступательное движение частицы отсутствует. Тогда гамильтониан можно записать в виде

$$\hat{H} = -\mu(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}),$$

где μ есть магнитный момент частицы, а $\boldsymbol{\sigma}$ обозначает три матрицы Паули (2.32). Динамика спина в магнитном поле дается решением уравнения Паули

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1(t) \\ \psi_2(t)\end{pmatrix} = \hat{H}\begin{pmatrix}\psi_1(t) \\ \psi_2(t)\end{pmatrix} \quad (6.1)$$

для спинора $\begin{pmatrix}\psi_1(t) \\ \psi_2(t)\end{pmatrix}$. Физический смысл компонент спинора в том, что $|\psi_1(t)|^2$ или $|\psi_2(t)|^2$ определяют вероятности обнаружить в момент времени t у частицы проекцию спина на ось z , равную $+1/2$ или $-1/2$.

- *Задача.* Найти нормированные собственные векторы, отвечающие определенной проекции спина на оси x, y, z . Указание. Для частиц со спином $s = 1/2$ оператор спина выражается через матрицы Паули как $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$.

Допустим, что имеется однородное постоянное магнитное поле вдоль оси z : $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$. Здесь и далее $\mathbf{e}_{x,y,z}$ — будут обозначать единичные орты вдоль соответствующих декартовых осей. Уравнение Паули в этом случае принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = -\mu B_0 \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ -\psi_2(t) \end{pmatrix}.$$

Ищем решение в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar}.$$

После подстановки этого решения в исходное уравнение получим систему однородных линейных уравнений, дающих значения энергии $E = -\mu B_0$ и $E = +\mu B_0$ и собственные векторы $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, отвечающие собственным значениям $s_z = \pm 1/2$. Далее будем использовать удобные обозначения $|\uparrow_{x,y,z}\rangle$ и $|\downarrow_{x,y,z}\rangle$ для собственных векторов операторов соответственно $\hat{s}_{x,y,z}$, имеющих собственные значения $+1/2$ (стрелка вверх) и $-1/2$ (стрелка вниз). Например, $|\uparrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\downarrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ и т. д. В этих обозначениях базисные векторы однокубитовых состояний записываются как $|0\rangle = |\uparrow_z\rangle$, $|1\rangle = |\downarrow_z\rangle$.

Общее решение, содержащее две произвольные комплексные постоянные α и β , имеет вид

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \alpha e^{i\mu B_0 t/\hbar} |\uparrow_z\rangle + \beta e^{-i\mu B_0 t/\hbar} |\downarrow_z\rangle. \quad (6.2)$$

Это решение описывает прецессию спина вокруг направления магнитного поля $B_0 \mathbf{e}_z$. Действительно, пусть при $t = 0$ приготовлено квантовое состояние $|\uparrow_x\rangle = (|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle)/\sqrt{2}$, описывающее частицу с проекцией спина на ось x , равную $+1/2$. Из этого начального условия находим $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$. Ортогональная линейная комбинация $|\downarrow_x\rangle = (|\uparrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle)/\sqrt{2}$ описывает частицу с проекцией спина $-1/2$ на ось x . Выражая базисные состояния $|\uparrow_z\rangle$, $|\downarrow_z\rangle$ через $|\uparrow_x\rangle$, $|\downarrow_x\rangle$, получаем

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = |\uparrow_x\rangle \cos \frac{\mu B_0 t}{\hbar} + i |\downarrow_x\rangle \sin \frac{\mu B_0 t}{\hbar}.$$

Следовательно, вероятности обнаружить в момент времени t проекцию $+1/2$ на ось x равна

$$w_{\uparrow x}(t) = \cos^2 \mu B_0 t / \hbar.$$

Вероятность найти на ось x проекцию $-1/2$ равна

$$w_{\downarrow x}(t) = \sin^2 \mu B_0 t / \hbar.$$

Среднее значение проекции спина на ось x

$$\langle \hat{s}_x \rangle(t) = \frac{1}{2} w_{\uparrow x}(t) - \frac{1}{2} w_{\downarrow x}(t) = \frac{1}{2} \cos 2\mu B_0 t / \hbar$$

осциллирует с частотой $\omega = 2\mu B_0 / \hbar$. Это и означает, что спин в магнитном поле прецессирует с угловой частотой

$$\Omega_{\text{precession}} = \frac{2\mu B_0}{\hbar}.$$

Для $\mu = \mu_p \sim 10^{-23}$ эрг/гс и $B_0 \sim 10^5$ гс оценка дает $\Omega_{\text{precession}} \sim 2$ ГГц.

- *Задача.* Вычислить аналогичным методом $\langle \hat{s}_y \rangle(t)$.

Вспомним, что в формализме квантовой механики есть эквивалентный метод вычисления средних значений операторов, сопоставляемых физическим величинам. Это так называемое представление Гейзенберга, а котором зависимость от времени вектора состояния системы переносится на оператор физической величины \hat{A} . Для гамильтониана \hat{H} , который не зависит от времени явно, указанная зависимость дается выражением

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar}.$$

- *Задача.* Вычислить найденные выше зависимости от времени средних от операторов спина с помощью представления Гейзенберга. Указание. Использовать формулу

$$\hat{R}_n(\theta) \equiv e^{i\theta(\mathbf{a}\sigma)/2} = \cos \frac{\theta}{2} + i(\mathbf{a}\sigma) \sin \frac{\theta}{2}, \quad (6.3)$$

справедливую для единичного вектора $|\mathbf{a}| = 1$, а также матричные соотношения для матриц Паули $\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$ (и другие, получающиеся из выписанного циклическими перестановками).

Таким образом, свободная прецессия в постоянном однородном магнитном поле генерирует относительную фазу φ суперпозиции состояний кубита $|0\rangle \equiv |\uparrow_z\rangle$ и $|1\rangle \equiv |\downarrow_z\rangle$ в виде $|0\rangle + e^{i\varphi}|1\rangle$, где $\varphi = -2\mu B_0 t/\hbar - \arg\alpha + \arg\beta$. См. общее решение (6.2). Выбирая продолжительность действия внешнего магнитного поля t , можно получить любое заданное значение относительной фазы φ .

Для реализации вентиля \hat{U}_{NOT} требуется переменное магнитное поле вида

$$\mathbf{B}(t) = B_0 \mathbf{e}_z + B_1 [\mathbf{e}_x \cos(\omega_0 t) - \mathbf{e}_y \sin(\omega_0 t)], \quad (6.4)$$

где компонента B_0 магнитного поля вдоль оси z постоянна, а поперечная компонента мала: $B_1 \ll B_0$. Поперечная компонента отвечает магнитному полю, вращающемуся в плоскости xy с угловой частотой ω_0 . Примером такого поля можно считать магнитное поле радиочастотного излучения. В выбранном приближении, когда поступательные степени свободы заморожены, уравнение Паули принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{i\omega_0 t} \\ B_1 e^{-i\omega_0 t} & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

Ищем решение системы однородных линейных уравнений с переменными коэффициентами (6.5) в виде

$$\begin{aligned} \psi_1(t) &= e^{i\omega_0 t/2} e^{-iEt/\hbar} C_1, \\ \psi_2(t) &= e^{-i\omega_0 t/2} e^{-iEt/\hbar} C_2, \end{aligned}$$

с постоянными и, вообще говоря, комплексными амплитудами $C_{1,2}$. В матричном виде такую подстановку можно записать как

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar}, \quad (6.6)$$

откуда видно, что матрица в правой части (6.6) является матрицей поворота частицы спина 1/2 вокруг оси z на угол $\omega_0 t$. См. формулу (6.3). Другими словами, указанная подстановка означает переход в систему отсчета, вращающуюся с угловой скоростью ω_0 вокруг оси z .

Для величин C_1 и C_2 получим систему алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} \left(E - \frac{\hbar\omega_0}{2} + \mu B_0 \right) C_1 + \mu B_1 C_2 &= 0, \\ \mu B_1 C_1 + \left(E + \frac{\hbar\omega_0}{2} - \mu B_0 \right) C_2 &= 0. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Равенство нулю определителя этой системы дает два возможных значения E :

$$E_{\pm} = \pm \hbar \Omega \equiv \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar \omega_0}{2} - \mu B_0\right)^2 + (\mu B_1)^2}. \quad (6.8)$$

Этим значениям отвечают два линейно-независимых решения

$$C_1^{(\pm)} = -\frac{\mu B_1 C_2^{(\pm)}}{\pm \hbar \Omega - \hbar \omega_0/2 + \mu B_0}.$$

Поэтому общее решение системы уравнений Паули (6.5), содержащее две произвольных постоянные, можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = C_2^{(+)} \begin{pmatrix} -\frac{\mu B_1}{\hbar \Omega - \hbar \omega_0/2 + \mu B_0} e^{i\omega_0 t/2} \\ e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} e^{-i\Omega t} + \\ + C_2^{(-)} \begin{pmatrix} \frac{\mu B_1}{\hbar \Omega + \hbar \omega_0/2 - \mu B_0} e^{i\omega_0 t/2} \\ e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} e^{i\Omega t}. \quad (6.9)$$

Пусть при $t = 0$ частица находилась в состоянии $|\uparrow_z\rangle$, поэтому $C_2^{(+)} + C_2^{(-)} = 0$. Тогда нормированное решение, удовлетворяющее поставленному начальному условию, запишется в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar \Omega} \begin{pmatrix} [\hbar \Omega \cos \Omega t - i(\hbar \omega_0/2 - \mu B_0) \sin \Omega t] e^{i\omega_0 t/2} \\ i\mu B_1 e^{-i\omega_0 t/2} \sin \Omega t \end{pmatrix}. \quad (6.10)$$

Вероятности обнаружения проекций спина на ось z в момент времени t будут

$$w_{\uparrow_z}(t) = \cos^2 \Omega t + \left(\frac{\hbar \omega_0/2 - \mu B_0}{\hbar \Omega}\right)^2 \sin^2 \Omega t, \\ w_{\downarrow_z}(t) = \left(\frac{\mu B_1}{\hbar \Omega}\right)^2 \sin^2 \Omega t. \quad (6.11)$$

Если только $\hbar \omega_0 \neq 2\mu B_0$, то ввиду неравенства $B_1 \ll B_0$ вероятность переворота спина $w_{\downarrow_z}(t) \ll 1$, т.е. пренебрежимо мала при любом t . Однако в случае так называемого резонанса Раби, то есть при

$$\hbar \omega_0 = 2\mu B_0,$$

ситуация коренным образом меняется.

В самом деле, рассмотрим решение (6.10) в условиях резонанса Раби. Тогда $\hbar\Omega = \mu B_1$, а решение (6.10) примет вид

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\mu B_0 t/\hbar} \cos \mu B_1 t/\hbar \\ ie^{-i\mu B_0 t/\hbar} \sin \mu B_1 t/\hbar \end{pmatrix}. \quad (6.12)$$

Выражения для вероятностей обнаружить проекцию спина на ось z в условиях резонанса принимают вид

$$w_{\uparrow_z}(t) = \cos^2 \mu B_1 t/\hbar,$$

$$w_{\downarrow_z}(t) = \sin^2 \mu B_1 t/\hbar.$$

В момент времени $t = t_* = \pi\hbar/2\mu B_1$ вероятность переворота спина обращается в единицу. Мы видим, что облучение частицы в состоянии $|\uparrow_z\rangle$ радиочастотным полем в течение времени $\Delta t = t_*$ переводит ее в состояние $|\downarrow_z\rangle$. Тем самым реализуется вентиль NOT с действием $\hat{U}_{\text{NOT}}|0\rangle = |1\rangle$.

Полезно взглянуть на динамическую эволюцию спина-кубита с точки зрения вычисления среднего значения оператора спина $\hat{s} = \boldsymbol{\sigma}/2$. Для этого рассчитаем

$$\langle \hat{s} \rangle(t) = \frac{1}{2} (\psi_1^*(t), \psi_2^*(t)) \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}$$

в случае резонанса Раби, то есть со спинором (6.12). Для среднего значения оператора спина в исходной неподвижной системе отсчета получим выражение

$$\langle \hat{s} \rangle(t) = \frac{1}{2} \left(\sin \frac{2\mu B_0 t}{\hbar} \sin \frac{2\mu B_1 t}{\hbar}, \cos \frac{2\mu B_0 t}{\hbar} \sin \frac{2\mu B_1 t}{\hbar}, \cos \frac{2\mu B_1 t}{\hbar} \right). \quad (6.13)$$

Геометрический смысл очевиден: конец вектора среднего значения спина пробегает по сфере радиуса $1/2$ ($\hbar/2$ в обычных единицах). При этом полярный и азимутальный углы есть

$$\theta = \frac{2\mu B_1 t}{\hbar},$$

$$\varphi = \frac{2\mu B_0 t}{\hbar}.$$

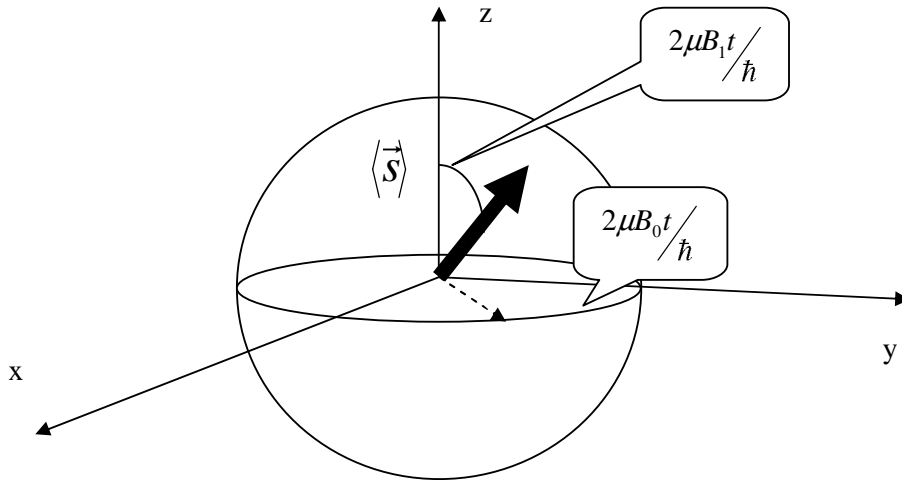


Рис. 6.1: Эволюция во времени среднего значения оператора спина в переменном магнитном поле: полярный угол равен $2\mu B_1 t / \hbar$, азимутальный угол, в данном случае отсчитываемый от оси y , равен $2\mu B_0 t / \hbar$.

См. Рис. 6.1. Таким образом, любое состояние кубита можно, в принципе, реализовать в системе частиц со спином $1/2$, помещенных в переменное магнитное поле. Поскольку $B_0 \gg B_1$, вращение спина вокруг оси z происходит очень быстро. Поэтому удобно перейти систему отсчета, которая вращается с угловой частотой ω_0 вокруг оси z . Спиноры в этой системе, как показано выше в связи с (6.6), можно получить, полагая $\omega_0 = 0$ в (6.10) и $B_0 = 0$ в (6.12). В результате приходим к выражению

$$\langle \hat{s} \rangle'(t) = \frac{1}{2} \left(0, \sin \frac{2\mu B_1 t}{\hbar}, \cos \frac{2\mu B_1 t}{\hbar} \right), \quad (6.14)$$

где штрих означает, что среднее вычисляется во вращающейся системе отсчета. В этой системе отсчета конец вектора среднего спина относительно медленно (с угловой частотой $2\mu B_1 / \hbar \ll 2\mu B_0 / \hbar$) вращается в плоскости (y', z') . Решение в лабораторной системе отсчета, как уже отмечалось, получится отсюда путем быстрого вращения вокруг оси z всей картины медленного вращения в плоскости (y', z') .

- *Задача.* Решения (6.10) и (6.12) записаны в неподвижной системе отсчета. Найти зависимости от времени вероятностей $w_{\uparrow x,y}$ и $w_{\downarrow x,y}$ во вращающейся и неподвижной системах отсчета для начального условия $\psi_1(0) = 1, \psi_2(0) = 0$.
- *Задача.* Показать, что среднее значение оператора спи-

на $\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle(t)$ в магнитном поле вида $\mathbf{B}(t) = B_0 \mathbf{e}_z + B_1 [\mathbf{e}_x \cos(\omega_0 t + \varphi) - \mathbf{e}_y \sin(\omega_0 t + \varphi)]$ в системе координат, вращающейся вокруг оси z с угловой скоростью ω_0 , в условиях резонанса Раби $\omega_0 = 2\mu B_0/\hbar$, равно

$$\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle'(t) = \frac{1}{2} \left(\sin \frac{2\mu B_1 t}{\hbar} \sin \varphi, \sin \frac{2\mu B_1 t}{\hbar} \cos \varphi, \cos \frac{2\mu B_1 t}{\hbar} \right). \quad (6.15)$$

Получить выражение для $\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle(t)$ в лабораторной системе. Описать характер эволюции этих средних.

Отметим, что время переворота кубита t_* много больше периода прецессии вокруг направления постоянного магнитного поля $2\pi/\Omega_{\text{precession}}$. Из-за этого преобразование состояния кубита, основанное на свободной прецессии, требует очень коротких интервалов времени действия однородного поля вдоль оси z . На практике это может представлять трудность при реализации такого преобразования кубита.

Вентиль Адамара $\hat{U}_H = (\sigma_x + \sigma_z)/\sqrt{2}$ можно реализовать, учитывая формулу

$$e^{i\theta(\sigma_x + \sigma_z)/\sqrt{2}} = \cos \theta + i(\sigma_x + \sigma_z) \sin \theta/\sqrt{2}.$$

При $\theta = \pi/2$ получим

$$(\sigma_x + \sigma_z)/\sqrt{2} = e^{-i\pi/2} e^{i\pi(\sigma_x + \sigma_z)/2\sqrt{2}}.$$

Общий фазовый множитель не влияет на физическое содержание однокубитового вектора состояния, а операторный множитель можно представить как оператор эволюции спина во внешнем магнитном поле $e^{-i\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}t/\hbar}$ с $\mathbf{B} = -B(1, 0, 1)$. Если включить такое поле на время $t_* = \pi\hbar/(2\sqrt{2}\mu B)$, то это будет эквивалентно действию \hat{U}_H .

6.3 Двухкубитовый вентиль в системе частиц со спином 1/2.

Как уже упоминалось, для создания квантовых устройств однокубитовых вентилях недостаточно. Необходим двухкубитовый вентиль, в качестве которого используется вентиль "КОНТРОЛИРУЕМОЕ НЕТ" \hat{U}_{CNOT} . В спиновой схеме двухкубитовый вентиль \hat{U}_{CNOT} можно

реализовать, если включить взаимодействие между двумя спинами. В квантовых системах частиц со спином $1/2$ имеется спиновый оператор диполь-дипольного взаимодействия вида

$$U = -\mu_1\mu_2 \frac{3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)r^2}{r^5},$$

где μ_1, μ_2 суть величины магнитных моментов частиц 1 и 2, \mathbf{r} есть радиус-вектор, направленный от частицы 1 к частице 2. Обычно при экспериментальной реализации квантовых вентилях в схеме частиц спина $1/2$ в магнитном поле используются хорошо разработанные методы ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в жидкой фазе при комнатных температурах. За счет хаотического движения молекул все зависящие от ориентации вклады $\propto (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r})$ в гамильтониан взаимодействия в среднем исчезают, и остается только вклад $\propto (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$. Более того, из-за наличия сильного магнитного поля $B_0 \sim 5 - 15$ Тесла вдоль оси z спины очень быстро, с частотой $\omega_0 \sim 1$ ГГц прецессируют вокруг направления магнитного поля. Поэтому среднее значение компонент магнитного момента, перпендикулярных \mathbf{B}_0 , равно нулю после усреднения, так что эффективное спин-спиновое взаимодействие в этом пределе можно записать как $\sigma_{1z}\sigma_{2z}$. Тогда гамильтониан системы двух частиц со спином $1/2$ и магнитными моментами μ_1 и μ_2 приближенно можно записать в виде

$$\hat{H} = -(\mu_1\sigma_{1z} + \mu_2\sigma_{2z})B_0 + J\sigma_{1z}\sigma_{2z}, \quad (6.16)$$

где параметр J имеет размерность энергии и характеризует взаимодействие двух спинов.

Оценим эффективную угловую частоту $\omega \sim J/\hbar$ в предположении, что взаимодействуют два протона в молекуле. Будем предполагать, что магнитный момент протона в молекуле примерно такой же, как в свободном состоянии, $\mu_p = 2.79 \frac{e\hbar}{2m_p c} \approx 1.4 \times 10^{-23}$ эрг/гс. Энергия диполь-дипольного магнитного взаимодействия по порядку величины может быть оценена как

$$J \sim \frac{\mu_p^2}{a_B^3},$$

если считать, что расстояние между двумя протонами в молекуле порядка боровского радиуса a_B . Отсюда после подстановки числовых данных получаем

$$\omega = \frac{J}{\hbar} \sim 10^5 \text{ с}^{-1}.$$

Сравнение с величиной частоты прецессии ω_0 показывает, что $J/\hbar\omega_0 \sim 10^{-4}$.

На самом деле типичная величина $J/\hbar = (1 - 4) \times 10^2$ герц. Это связано с тем, что магнитное взаимодействие двух ядерных спинов является не прямым, как предполагалось в приведенной только что оценке, а косвенным, возникающим благодаря обобществленным электронам в химических связях внутри молекулы. Из-за этого эффективные магнитные моменты протонов надо считать примерно на порядок меньше, чем их значения в свободном пространстве.

- *Задача.* Качественно изобразить спектр излучения при переходах между уровнями энергии системы двух ядерных спинов с гамильтонианом (6.16). Для этого построить схему квантованных уровней энергии частицы и указать возможные переходы с излучением одного фотона. Для оценок взять числовые значения параметров гамильтониана $\mu_{1,2}B_0/\hbar \sim 100$ МГц, $|\mu_1 - \mu_2|B_0/\hbar \sim 5$ кГц, $J/\hbar \sim 10^2$ Гц.

Выше, см. (4.11) и рис. 4.1 уже приводилась возможная блок-схема вентиля CNOT. С точки зрения физической реализации более удобна слегка отличная от нее версия. Вместо вентиля Адамара H на рис. 4.1, которому отвечает оператор \hat{U}_H , более удобно использовать так называемый псевдооператор Адамара \hat{U}_h , который имеет вид

$$\hat{U}_h = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i\sigma_y) = e^{i\pi\sigma_y/4}. \quad (6.17)$$

Так что $\hat{U}_{\text{CNOT}} = \hat{U}_h^{-1}\hat{\Phi}\hat{U}_h$. Удобство такой замены состоит в том, что \hat{U}_h является оператором поворота на угол $\pi/2$ вокруг оси y :

$$\hat{U}_h = e^{i\pi\sigma_y/4} \equiv \hat{R}_{e_y}(\pi/2).$$

Здесь и далее символ $\hat{R}_{\mathbf{n}}(\theta)$ будет использоваться для обозначения матриц поворота (6.3) для спина $1/2$ на угол θ вокруг оси, заданной единичным вектором \mathbf{n} . Вентиль, изображаемый на диаграмме блоком $\hat{\Phi}$, производит контролируемое обращение фазы по правилу (4.12).

Построим вначале реализацию вентиля контролируемого обращения фазы в виде оператора \hat{U}_{Φ} , действующего на двухкубитовое состояние:

$$\hat{U}_{\Phi} = e^{-i\pi/4} \left[\hat{R}_{e_z} \left(\frac{\pi}{2} \right) \otimes \hat{I} \right] \left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_z} \left(\frac{\pi}{2} \right) \right] e^{-i\sigma_{1z}\sigma_{2z}\pi/4}. \quad (6.18)$$

Поясним смысл написанного. Крайний правый оператор $e^{-i\sigma_{1z}\sigma_{2z}\pi/4}$ является оператором динамической эволюции системы двух спинов

$$\hat{U}_{\text{spin-spin}}(t) \equiv e^{-i\hat{H}_{\text{spin-spin}}t/\hbar} = e^{-iJt\sigma_{1z}\sigma_{2z}/\hbar} \quad (6.19)$$

за счет взаимодействия двух частиц, описываемого гамильтонианом $\hat{H}_{\text{spin-spin}} = J\sigma_{1z}\sigma_{2z}$ в (6.16) в течение времени $\Delta t = \pi\hbar/4J$. Следом за ним идет оператор $\left(\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_z}\left(\frac{\pi}{2}\right)\right)$, который селективно осуществляет поворот второго спина на угол 90° вокруг оси z , но не влияет на первый спин. Далее следует оператор селективного поворота первого спина на 90° вокруг оси z , не затрагивая второго спина. Наконец, все это завершается умножением на общий фазовый множитель.

Здесь важны два момента. Во-первых, поворот вокруг оси z , как уже отмечалось, происходит за счет свободной прецессии с большой частотой и поэтому не удобен для реализации. Но такой поворот можно представить в виде комбинации поворотов вокруг осей x и y :

$$\hat{R}_{e_z}\left(\frac{\pi}{4}\right) = \hat{R}_{e_y}\left(\frac{\pi}{4}\right)\hat{R}_{e_x}\left(\frac{\pi}{4}\right)\hat{R}_{e_y}\left(-\frac{\pi}{4}\right), \quad (6.20)$$

каждый из которых осуществляется путем включения резонансного импульса на нужное время. Ниже такое представление будет использовано. Отметим, что в силу выражения (6.3) для матрицы поворота частицы со спином $1/2$ справедливо соотношение

$$\hat{R}_n(-\theta) = \hat{R}_{-n}(\theta).$$

- *Задача.* Проверить справедливость (6.20). С помощью формулы (6.15) определить значения фазы φ и продолжительность действия резонансного импульса, необходимые для реализации указанных поворотов вокруг осей x и y .

Второй момент состоит в возможности реализации селективных операций типа $\left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_z}\left(\frac{\pi}{2}\right)\right]$, когда один из кубитов, в данном случае первый, не подвергается воздействию. Такое возможно благодаря резонансу Раби, обсуждавшемуся выше. Как было показано, вероятность переворота спина из исходного состояния $|\uparrow_z\rangle$ пренебрежимо мала при $\omega_0 \neq 2\mu B_0/\hbar$. Поэтому, если кубит 2, реализованный как частица с магнитным моментом μ_2 , находится в резонансе Раби $\omega_0 = 2\mu_2 B_0/\hbar$ и тем самым подвергается воздействию переменного магнитного поля, первый кубит с

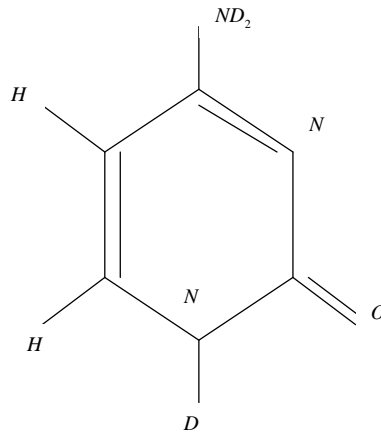


Рис. 6.2: Частично дейтерированный цитозин как пример молекулы, в которой два атома водорода находятся в различном химическом окружении. Это позволяет выборочно воздействовать на каждый атом с помощью внешнего переменного магнитного поля в условиях резонанса Раби.

$\mu_1 \neq \mu_2$ находится вне резонанса и практически не испытывает воздействия такого поля. До настоящего времени все опыты по реализации двухкубитовых квантовых вентилях с применением ЯМР в жидкой фазе использовали органические молекулы, в которых имелись два атома со спином $1/2$. Если эти атомы разные, то $\mu_1 \neq \mu_2$, и селективное воздействие возможно. Однако и для одинаковых атомов, как, например, атомы водорода в частично дейтерированном цитозине на рис. 6.2, возможно селективное воздействие на каждый из атомов. Хотя здесь $\mu_1 = \mu_2$, химическое окружение у одинаковых атомов разное, см. рис. 6.2. Поэтому локальное магнитное поле для каждого из атомов отличается от B_0 . Поэтому частота прецессии $\Omega = 2\mu B_0/\hbar$, резонансная для одного из атомов, не будет резонансной для другого: $\Omega \neq 2\mu(B_0 + \Delta B)/\hbar$. Разность между локальными частотами прецессии $\Delta\omega = 2\mu\Delta B/\hbar$, возникающая из-за отличия напряженностей локального магнитного поля называется *химическим сдвигом*.

Вернемся к расшифровке (6.18) и распишем прямые произведения

операторов, входящих в это выражение. Имеем

$$\begin{aligned} \left[\hat{R}_{e_z} \left(\frac{\pi}{2} \right) \otimes \hat{I} \right] &\equiv \left(e^{i\pi\sigma_{1z}/4} \otimes \hat{I} \right) = \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\pi/4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Аналогично находим

$$\left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_z} \left(\frac{\pi}{2} \right) \right] = \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}$$

и

$$e^{-i\pi\sigma_{1z}\sigma_{2z}/4} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}.$$

Перемножая в соответствии с (6.18) все три матрицы и учитывая фазовый множитель, находим матричное представление

$$\hat{U}_\Phi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.21)$$

Разумеется, этот результат мог бы быть получен сразу из выражений для действия оператора \hat{U}_Φ на векторы состояния в вычислительном базисе (4.12). Целью же настоящего рассмотрения является указание возможности физической реализации действия вентиля контролируемого обращения фазы.

Последний шаг в реализации вентиля CNOT таков:

$$\hat{U}_{\text{CNOT}} = \left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_y} \left(-\frac{\pi}{2} \right) \right] \hat{U}_\Phi \left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_y} \left(\frac{\pi}{2} \right) \right]. \quad (6.22)$$

Иными словами, вначале производим селективный поворот второго спина на 90° вокруг оси y , затем применяем разобранный выше вентиль

контролируемого обращения фазы, наконец, осуществляем селективный поворот второго спина на угол -90° вокруг оси y .

- *Задача.* Найти 4×4 -матричное представление селективных поворотов вокруг оси y в (6.22) и показать, что согласно (6.22) получается матрица

$$\hat{U}_{\text{CNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

осуществляющая представление оператора \hat{U}_{CNOT} (4.9) или (4.10).

Соберем теперь все операции, необходимые для реализации вентиля CNOT в (6.22):

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{CNOT}} = & \left[\underbrace{\hat{I}}_A \otimes \underbrace{\hat{R}_{e_y}\left(-\frac{\pi}{2}\right)}_B \right] \left\{ e^{-i\pi/4} \left[\hat{R}_{e_z}\left(\frac{\pi}{2}\right) \otimes \hat{I} \right] \times \right. \\ & \left. \times \left[\underbrace{\hat{I}}_C \otimes \underbrace{\hat{R}_{e_z}\left(\frac{\pi}{2}\right)}_D \right] e^{-i\pi\sigma_{1z}\sigma_{2z}/4} \right\} \left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_y}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Это выражение можно преобразовать к более простой форме, если применить соотношение $(A \otimes B) \cdot (C \otimes D) = (A \cdot C) \otimes (B \cdot D)$ к операторам, помеченным соответствующими буквами в выражении (6.23). Получим выражение

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{CNOT}} = & e^{-i\pi/4} \left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_y}\left(-\frac{\pi}{2}\right) \hat{R}_{e_z}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right] \left[\hat{R}_{e_z}\left(\frac{\pi}{2}\right) \otimes \hat{I} \right] e^{-i\pi\sigma_{1z}\sigma_{2z}/4} \times \\ & \times \left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_y}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right], \end{aligned}$$

которое все еще не совсем удобно из-за присутствия операторов поворота вокруг оси z . Окончательное выражение получится, если с помощью (6.20) выразить такие операторы через операторы поворотов вокруг осей x и y , осуществляемых резонансным радиочастотным импульсом:

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{CNOT}} = & e^{-i\pi/4} \left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_x}\left(\frac{\pi}{2}\right) \hat{R}_{e_y}\left(-\frac{\pi}{2}\right) \right] \left[\hat{R}_{e_y}\left(\frac{\pi}{2}\right) \hat{R}_{e_x}\left(\frac{\pi}{2}\right) \times \right. \\ & \left. \hat{R}_{e_y}\left(-\frac{\pi}{2}\right) \otimes \hat{I} \right] e^{-i\pi\sigma_{1z}\sigma_{2z}/4} \left[\hat{I} \otimes \hat{R}_{e_y}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Возникает естественный вопрос: как управлять динамической эволюцией, скажем, двух частиц со спином, взаимодействующих согласно (6.16). Действительно, если вектор спина можно вращать, подбирая частоту, фазу и продолжительность радиочастотного импульса, то ответ на вопрос о включении и выключении "встроенной" динамики (6.19) не очевиден. Тем не менее, в исследованиях по ядерному магнитному резонансу был разработан метод *рефокусирующих импульсов*, предназначенный как раз для решения поставленной задачи.

Идея метода состоит в следующем. Имеется оператор поворота спина на угол 180° вокруг оси x в виде $\hat{R}_{e_x}(\pi) = e^{i\pi\sigma_x/2} = i\sigma_x$. Как уже было объяснено, этот поворот можно реализовать подбором фазы и продолжительности действия резонансного радиочастотного импульса, см. выражение для среднего значения оператора импульса во вращающейся системе координат (6.15) при $\varphi = 0$. Используя свойства матриц Паули убеждаемся в том, что для оператора эволюции (6.19) справедливо выражение

$$\left[\hat{R}_{e_x}(-\pi) \otimes \hat{I} \right] \hat{U}_{\text{spin-spin}}(t) \left[\hat{R}_{e_x}(\pi) \otimes \hat{I} \right] = \hat{U}_{\text{spin-spin}}(-t),$$

в котором оператор поворота действует селективно только на первый кубит, а второй не затрагивается.

- *Задача.* Проверить написанное равенство.

Выписанное соотношение эквивалентно обращению времени. Аналогичное соотношение справедливо в случае, когда оператор поворота вокруг оси x действует на второй кубит из взаимодействующей пары, не затрагивая первый. Но если повернуть оба кубита, то желаемого обращения направления хода эволюции не получится.

Отсюда уже можно установить способ регулировки продолжительности времени действия внутреннего спин-спинового взаимодействия двух частиц. Вначале в течение промежутка времени t_1 сама собой происходит эволюция системы двух спинов, взаимодействующих согласно (6.16). Результат такой эволюции представляется действием оператора $\hat{U}_{\text{spin-spin}}(t_1)$. Затем осуществляется поворот, скажем, первого спина на угол 180° вокруг оси x . Это эквивалентно действию оператора $\left[\hat{R}_{e_x}(\pi) \otimes \hat{I} \right]$. Физическая реализация осуществляется селективным

воздействием на первый кубит резонансного радиочастотного импульса продолжительностью $\Delta t = \pi\hbar/2\mu_1 B_1$, где μ_1 есть эффективный (с учетом химического сдвига) магнитный момент первой частицы, B_1 есть амплитуда напряженности переменного магнитного поля. Поскольку $\Delta t \ll \hbar/J$, воздействие радиочастотного импульса в масштабе времен свободной эволюции квантового состояния двух кубитов можно считать мгновенным. Затем система двух спинов снова предоставлена сама себе в течение промежутка времени t_2 . После этого первый спин поворачивается на -180° вокруг оси x , что представляется действием оператора $[\hat{R}_{e_x}(-\pi) \otimes \hat{I}]$. В результате получим

$$\begin{aligned} & [\hat{R}_{e_x}(-\pi) \otimes \hat{I}] \hat{U}_{\text{spin-spin}}(t_2) [\hat{R}_{e_x}(\pi) \otimes \hat{I}] \hat{U}_{\text{spin-spin}}(t_1) = \\ & = \hat{U}_{\text{spin-spin}}(-t_2) \hat{U}_{\text{spin-spin}}(t_1) = \hat{U}_{\text{spin-spin}}(t_1 - t_2). \end{aligned}$$

Подбирая t_1 и t_2 так, чтобы выполнялось равенство $t_1 - t_2 = \pi\hbar/4J$, можно добиться нужного вида оператора эволюции двух взаимодействующих спинов $e^{-i\pi\sigma_{1z}\sigma_{2z}/4}$, необходимого для реализации квантового вентиля CNOT. В этом пункте выясняется одно из потенциальных слабых мест реализации квантовых вентилях в схеме ядерного магнитного резонанса в жидкой фазе. В самом деле, поскольку порядок величины энергии J спин-спинового взаимодействия мал, оказывается, что $t_1 - t_2 \sim \hbar/J \sim 10^{-3}\text{с}$. Квантовый вентиль CNOT на основе ЯМР довольно-таки медленный.

Поскольку для свободной прецессии оператор временной эволюции имеет вид $\hat{U}_{\text{free}}(t) = e^{-i\mu B_0 t \sigma_z/\hbar}$, описанный выше метод нейтрализации собственной эволюции спина в постоянном магнитном поле, ввиду соотношения $\hat{R}_{e_x}(-\pi)\hat{U}_{\text{free}}(t)\hat{R}_{e_x}(\pi) = \hat{U}_{\text{free}}(-t)$, работает и в данном случае. Этот метод по-другому называется методом *спиновой эха*.

6.4 Достоинства и недостатки метода ЯМР в жидкой фазе.

Любое устройство, претендующее на роль квантового компьютера, должно удовлетворять ряду требований. Во-первых, должен существовать удобный способ инициализации (приготовления) начального состо-

яния $|0000 \dots 0\rangle$. Во-вторых, время декогерентности (то есть время существования фазовой когерентности разных слагаемых в квантовой суперпозиции состояний) должно превышать время, требующееся на проведение квантового вычисления. В-третьих, должна быть обеспечена возможность считывания результата. В-четвертых, квантовое вычислительное устройство должно допускать масштабирование в сторону увеличения количества участвующих кубитов. Ну и последнее по порядку но не по важности: квантовое вычисление обязательно должно включать механизм поиска и исправления квантовых ошибок.

Несомненным достоинством метода ядерного магнитного резонанса в жидкой фазе является доведенная почти до совершенства техника управления ядерными спинами в магнитном поле. Были разработаны как методы создания оптимальной формы импульса переменного магнитного поля для воздействия на спин частицы-кубита, так и методы считывания результата вычисления (так называемый метод томографии квантового состояния). Время декогерентности квантового компьютера на основе ЯМР в жидкой фазе порядка секунды, что очень много в сравнении с типичными периодами прецессии. Была экспериментально подтверждена возможность квантовой коррекции вычислений. Есть и ряд других достоинств.

Вместе с тем практическая реализация квантовых вентилях и квантовых вычислений методом ядерного магнитного резонанса в жидкой фазе встречается с некоторыми трудностями. Одна из таких трудностей является продолжением достоинств метода ЯМР. Устройство работает при комнатной температуре, поэтому квантовые энергетические уровни, необходимые для проведения квантовых вычислений, заселены почти равномерно. Действительно, во второй части курса будет показано, что относительная вероятность заселения уровня с энергией E пропорциональна $e^{-E/T}$, где температура T измеряется в единицах энергии. Между тем максимальная типичная энергия в методе ЯМР в магнитных полях с напряженностью около 10 Тесла оценивается как $\hbar\omega_0$ с $\omega_0/2\pi \sim 10^8$ герц. При температурах порядка комнатной показатель экспоненты является величиной порядка 10^{-5} , так что все уровни энергии ядерных спинов равновероятны. Отсюда видно, что инициализация квантового ЯМР-компьютера является делом не простым.

Поэтому для решения этой проблемы был разработан метод *квази-*

чистых состояний, с помощью которого можно было создавать подсистему ядерных спинов-кубитов, как бы изолированную от окружения, и работать только с ней. Недостатком метода является то, что сигнал подсистемы, который необходимо считывать, экспоненциально уменьшается с ростом числа кубитов. В этом смысле указанная выше проблема масштабирования в квантовых ЯМР-компьютерах практически неразрешима. Реально работающего квантового компьютера на ядерных спинах создать не удалось, но принципиальные доказательства работоспособности концепции квантовых вычислений в системах с тремя-четырьмя кубитами этим методом были получены.

Отмеченные трудности ЯМР в жидкой фазе отсутствуют в реализации квантового компьютера методом ЯМР в твердой фазе при температурах порядка одного Кельвина. Поэтому указанный метод привлекает внимание исследователей, занимающихся воплощением идеи квантовых вычислений.

6.5 Задача Элитцур-Вайдмана и идея принципа квантовой передачи данных.

В 1993 году два физика А. Элитцур и Л. Вайдман опубликовали в журнале "Основания физики" статью под названием "Квантово-механические измерения, не требующие взаимодействия" [Avshalom C. Elitzur and Lev Vaidman, Quantum mechanical interaction-free measurements, Foundations of Physics, **000**, 000 (1993), arXiv:hep-th/9305002]. В статье была рассмотрена и решена задача, которая иллюстрировала свойства квантовых систем столь же ярко, как известный мысленный эксперимент по одноквантовой интерференции на двух щелях.

Задача формулируется так. Допустим, имеется $N \gg 1$ бомб, у части которых взрыватели испорчены, а у другой части исправны. Необходимо гарантированно определить по крайней мере одну исправную бомбу, которую в дальнейшем можно бы было использовать.

Классическим (не квантово-механическим) методом задачу не решить. Классический метод требует непосредственного воздействия на взрыватель (скажем, с помощью удара по нему молотком). Очевидно,

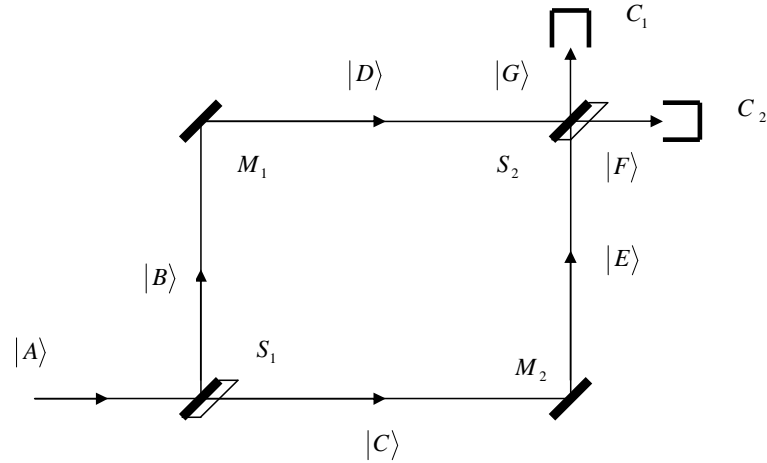


Рис. 6.3: Интерферометр Маха-Цандера, состоящий из зеркал M_1 и M_2 , делителей пучка света S_1 и S_2 и счетчиков фотонов C_1 и C_2 . Светоделители S_1 и S_2 расщепляют поток фотонов на отраженный и прошедший пучки, каждый с интенсивностью 50% от интенсивности падающего пучка. Но их фазы различаются на 90° .

что так можно определить лишь неисправные бомбы, тогда как все исправные бомбы взорвутся.

Элитцур и Вайдман показали, что свойства квантовой интерференции фотонов могут использоваться для решения поставленной задачи. Необходимое для этого устройство носит название интерферометра Маха-Цандера. Оно схематично показано на рис. 6.3. Фотон испускается из лазера в состоянии $|A\rangle$ и попадает на светоделитель S_1 . Этот светоделитель действует на состояние фотона как оператор, преобразующий начальный вектор состояния в линейную суперпозицию $i|B\rangle + |C\rangle$. Здесь вектор состояния $|B\rangle$ описывает фотон, летящий по прямой к зеркалу M_1 в верхнем левом углу интерферометра, а вектор состояния $|C\rangle$ описывает фотон, летящий к зеркалу M_2 в правом нижнем углу. Этот светоделитель действует на состояние фотона как оператор

$$\hat{U}_{S_1} : |A\rangle \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|B\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|C\rangle, \quad (6.25)$$

преобразующий начальный вектор состояния в определенную линейную суперпозицию, в которой вектор состояния $|B\rangle$ описывает отраженный фотон, летящий вверх по прямой к зеркалу M_1 в верхнем левом углу интерферометра, а вектор состояния $|C\rangle$ описывает прошедший фотон, летящий направо к зеркалу M_2 в правом нижнем углу. Множители $1/\sqrt{2}$

показывают, что проходит и отражается ровно 50% падающих на светоделитель фотонов. Мнимая единица i у вектора состояния $|B\rangle$ показывает, что фаза отраженной волны отличается на 90° от фазы прошедшей волны. [Этот факт установлен в работах V. Degiorgio, American Journal of Physics **48**, 81 (1980); A. Zeilinger, American Journal of Physics **49**, 882 (1981); Z. Y. Ou, L. Mandel, American Journal of Physics **57**, 66 (1980)]

- *Задача.* Смоделируем светоделитель прохождением через одномерный прямоугольный потенциальный барьер нерелятивистской частицы. Найти в этой модели разность фаз между прошедшей и отраженной волнами.

Зеркала M_1 и M_2 соответственно преобразуют вектора состояния в соответствии с

$$\begin{aligned}\hat{U}_{M_1} : |B\rangle &\rightarrow |D\rangle, \\ \hat{U}_{M_2} : |C\rangle &\rightarrow |E\rangle.\end{aligned}\quad (6.26)$$

Наконец, светоделитель S_2 производит над векторами состояния падающих на него фотонов от зеркал M_1 и M_2 преобразование

$$\begin{aligned}\hat{U}_{S_2} : |D\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}|F\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|G\rangle, \\ \hat{U}_{S_2} : |E\rangle &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|F\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|G\rangle.\end{aligned}\quad (6.27)$$

Число фотонов, зарегистрированных в единицу времени счетчиками C_1 и C_2 , согласно правилам квантовой механики пропорционально соответственно квадрату модуля коэффициентов при векторах состояния $|G\rangle$ и $|F\rangle$. Найдем эти коэффициенты, проследив всю цепочку действий при прохождении фотонов через интерферометр Маха-Цандера:

$$\begin{aligned}|A\rangle &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|B\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|C\rangle \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|D\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|E\rangle \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|F\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|G\rangle \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{i}{\sqrt{2}}|F\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|G\rangle \right) = \\ &= \left(\frac{i}{2}|F\rangle - \frac{1}{2}|G\rangle \right) + \left(\frac{i}{2}|F\rangle + \frac{1}{2}|G\rangle \right) = i|F\rangle + 0|G\rangle.\end{aligned}\quad (6.28)$$

Итак, искомые коэффициенты (амплитуды вероятности) равны $a_F = i$, $a_G = 0$. Вероятности зарегистрировать фотон в счетчиках C_1 и C_2 равны

соответственно $w_{C_1} = |a_G|^2 = 0$, $w_{C_2} = |a_F|^2 = 1$. Следовательно, ни один фотон не попадет в счетчик C_1 ! Все фотоны, испущенные лазерным источником, попадут в детектор C_2 .

Допустим, что на пути фотонов от светоделителя S_1 до зеркала M_2 поставлен поглотитель. Тогда на зеркало M_2 фотоны не попадают. Единственной траектории отвечает следующая цепочка преобразований векторов состояния:

$$\begin{aligned} |A\rangle &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|B\rangle \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|D\rangle \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{i}{\sqrt{2}}|G\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|F\rangle \right) = \\ &= -\frac{1}{2}|G\rangle + \frac{i}{2}|F\rangle. \end{aligned}$$

Теперь амплитуды вероятности равны $a_F = i/2$, $a_G = -1/2$, а вероятности зарегистрировать фотон счетчиками C_1 и C_2 одинаковы: $w_{C_1} = |a_G|^2 = 1/4$, $w_{C_2} = |a_F|^2 = 1/4$.

Приспособим интерферометр Маха-Цандера для проверки бомб на пригодность. Для этого прикрепим зеркало M_2 к взрывателю бомбы. Если фотон полетит по пути $S_1 - M_2$ и попадает на это зеркало, то при отражении он передаст импульс взрывателю, и бомба, если она исправна, взорвется. Вероятность того, что исправная бомба при таком тестировании взорвется, равна $1/2$. Иными словами, в среднем половина исправных бомб при первом прогоне такого тестирования будет потеряна. Если фотон летит по пути $S_1 - M_2 - S_2$, то бомба, если она исправна, остается целой. Однако после прохождения этим фотоном светоделителя S_2 он с вероятностью $1/2$ может оказаться как в детекторе C_2 , так и в детекторе C_1 . Если бомба не взорвалась, а фотон попал в детектор C_2 , то нельзя сказать, исправна она или нет. Ставим на бомбе знак вопроса и откладываем ее в сторону для того, чтобы подвергнуть вторичному тестированию. Но если фотон попал в детектор C_1 , а бомба осталась целой, то она гарантированно исправна! Вероятность этого события при прохождении одного фотона равна $1/4$, поскольку с вероятностью $1/2$ фотон пойдет по траектории $S_1 - M_2 - S_2$, и с вероятностью $1/2$ после прохождения светоделителя S_2 угодит в детектор C_1 . Таким образом, после первого тестирования будет отобрано в среднем 25% от общего числа исправных бомб.

Выпустим один фотон из лазерного источника. Если взрыватель испорчен, то возникает рассмотренная выше ситуация с распространени-

ем фотона по двум возможным путям, верхнему и нижнему. При этом счетчик C_1 не регистрирует фотона. Продолжаем испускать по одному фотону. Если после достаточно большого числа испытаний бомба не взорвалась, а счетчик C_1 не зарегистрировал фотона, то бомба не исправна, и ее отбрасываем.

Итак, способ поиска исправных бомб состоит в отборе событий, когда бомба не взрывается, а детектор C_1 срабатывает. После первого прогона в среднем $1/2$ исправных бомб взорвалось, $1/4$ исправных бомб гарантированно пригодны для использования и $1/4$ исправных бомб оказалась в категории со знаком вопроса. После второго прогона через интерферометр Маха-Цандера останется $1/16$ доля исправных бомб и т.д. После многократного повторения рассмотренной процедуры доля пригодных к использованию (в мирных целях) бомб оказывается равной

$$\Delta_{\text{ready-for-use}} = \frac{1}{4} + \frac{1}{16} + \frac{1}{64} + \dots = \frac{1}{3}.$$

Следует напомнить, что классический способ отбора дает $\Delta_{\text{ready-for-use}} = 0$.

Задача Элитцура-Вайдмана важна в том отношении, что великолепно иллюстрирует принцип действия квантовой безопасной передачи данных (квантовой криптографии). Если два персонажа А (Алиса) и В (Боб) пересылают друг другу сообщения посредством квантовых частиц, например фотонов, то законы квантовой механики позволяют установить, было ли сообщение перехвачено третьим персонажем С (Ева). Перехват сообщения означает возможность регистрации Евой фотона, летящего, допустим, по траектории $S_1 - M_2$. При регистрации фотон поглощается. Как было показано выше, это приводит к тому, что детектор C_1 начинает регистрировать фотоны, чего бы никогда не случилось, не будь на траектории $S_1 - M_2$ подслушивающего персонажа.

В реальности все гораздо сложнее. Переданное сообщение кодируется квантовым состоянием поляризации пересылаемых одиночных фотонов, в системе есть шумы, которые могут имитировать перехват, и множество других факторов. Для практической реализации необходим источник одиночных когерентных фотонов, оптоволоконная линия связи с хорошими характеристиками и т.д. Тем не менее, эти сложности преодолеваются. Применяя методы квантовой механики, можно разработать статистические критерии, которые на основании статистики регистрации

фотонов позволяют и при наличии шумов установить, было ли сообщение перехвачено. Первый такой протокол квантовой передачи данных, названный BB84, был предложен в 1984 году. К настоящему времени реализован на коммерческих оптоволоконных линиях связи на расстояниях порядка десяти километров. Можно считать, что квантовая механика стала и инженерной наукой.

Заключение

Небольшой очерк недавних достижений в области исследования графена и квантовых вычислений, данный в пособии, отражает лишь малую долю небывалой научной активности исследователей, работающих в указанных направлениях. Для более глубокого и, возможно, профессионального, ознакомления с последними результатами в этих областях заинтересованные студенты могут обращаться к электронному архиву публикаций arXiv.org, подразделы по конденсированному состоянию cond-mat и квантовой физике quant-ph, который поддерживается библиотекой Корнелльского университета в США. Веб-сайты конкретных групп исследователей, вовлеченных в исследования по графену и квантовым вычислениям, слишком многочисленны, чтобы приводить их здесь. Но они без труда могут быть найдены в Интернете.

Литература

- [1] И. Ф. Гинзбург. Введение в физику твердого тела. Издательство "Лань" (2007).
- [2] Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. Фейнмановские лекции по физике. Том 8 и 9.
- [3] К. фон Клитцинг. Успехи Физических Наук **150**, 107 (1986).
- [4] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Reviews of Modern Physics **81**, 109(2009).
- [5] P. Avouris, Zh. Chen, and V. Perebeinos. Nature Nanotechnology **2**, 605 (2007).
- [6] Дж. Прескилл. Квантовая информация и квантовые вычисления. (Перевод с английского). Издательство РХД, Москва-Ижевск, 2008.
- [7] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М. Наука, 1989.
- [8] К. А. Валиев, А. А. Кокин. Квантовые компьютеры: Надежды и реальность. Издательство РХД, Москва-Ижевск, 2001.
- [9] К. А. Валиев. Успехи физических наук **175**, 3 (2005).
- [10] T. D. Ladd, F. Jelezko, R. Laflamme, *et al.* Nature, **464**, 45 (2010) [arXiv:1009.2267v1].
- [11] L. M. K. Vandersypen, I. L. Chuang, Rev. Mod. Phys. **76**, 1037 (2005) [arXiv:quant-ph/0404064].
- [12] J. A. Jones, *Quantum Computing with NMR*. [arXiv:1011.1382].