

IonQ & QCenter Quantum Challenge [1]

Team: Kim&Lee*

(Submitted: November 1, 2021)

Contents

1 Circuit Compilation and Optimization	2
1.1 Task 1 (Level 1)	2
1.2 Task 2 (Level 1)	5
1.3 Task 3 (Level 2)	6
1.4 Task 4 (Level 2)	7
1.5 Task 5 (Level 3)	9
2 Ion Trap Design	11
2.1 Task 1 (Level 1): Surface Trap Background	11
2.1.1 Symmetric electrodes	11
2.1.2 Asymmetric electrodes	11
2.1.3 Conformal mapping for surface electrodes design	12
2.2 Task 2 (Level 2): RF Electrode Simulation	12
2.3 Task 3 (Level 2): Ponderomotive Potential and Pseduopotential	16
2.4 Task 4 (Level 3): Challenge Trap Design	17
3 Simulating Hubbard Model with Quantum Computers	21
3.1 Task 1 (Level 1)	21
3.2 Task 2 (Level 1)	22
3.3 Task 3 (Level 2)	24
3.4 Task 4 (Level 2)	25
3.5 Task 5 (Level 2)	26
3.6 Task 6 (Level 3)	26
3.6.1 Advanced Analysis	29
Appendix: Attached Files	33
References	34
List of Figures and Tables	35

*김하음; Ha-Eum Kim (hekim007@korea.ac.kr) and 이명원; Myeongwon Lee (mwxxxx@korea.ac.kr)

1 Circuit Compilation and Optimization

양자 컴퓨팅을 구현하기 위해서 우리는 Mathematica 내에서 오픈소스 패키지인 최만수 교수님의 Q3 패키지를 이용하였다. 패키지 설치 및 작동법은 '[GitHub: Q3App](#)'에서 볼 수 있다 [2]. 이 패키지를 이용하여 양자정보를 분석하는 자세한 예시들은 '[A Quantum Computation Workbook](#)'에서 확인할 수 있다 [3].

문제와 Mathematica 그리고 회로 그림에 사용하는 게이트 표기의 관계는 표 1에 정리하였다.

Problem	Mathematica	Gate			
$R_{x/y/z}(\frac{2\pi}{2^n})$	$\text{opX}[j,n]/\text{opY}[j,n]/\text{opZ}[j,n]$	X_n / Y_n / Z_n			
$R_{x/y/z}(-\frac{2\pi}{2^n})$	$\text{opX}[j,-n]/\text{opY}[j,-n]/\text{opZ}[j,-n]$	X_n^\dagger / Y_n^\dagger / Z_n^\dagger			
Problem	Mathematica	Gate	Problem	Mathematica	Gate
CNOT	$\text{cnot}[i,j]$		$R_{xx}(\pi/2)$	$\text{opXX}[i,j]$	

Table 1: 문제에 주어진 모든 게이트들과 Mathematica에 사용한 명령어 그리고 회로 그림 내의 표기법들 간의 관계를 나타내는 표.

1.1 Task 1 (Level 1)

그림 1은 보편적 게이트들의 집합

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{CNOT} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad R_x(\theta) := \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -i \sin(\theta/2) \\ -i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \\ R_y(\theta) := \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad R_z(\theta) := \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \end{array} \right\} \quad (1)$$

을 사용하여 CCCNOT 게이트를 실행하는 회로를 나타낸다. 여기서 위에서부터 첫째와 둘째 줄은

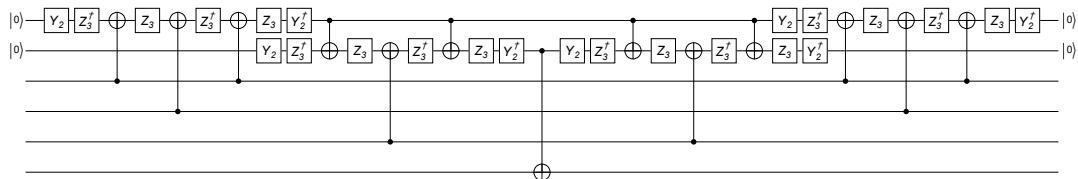


Figure 1: 문제 1.1에서 구하라고 지시한 CCCNOT 게이트의 회로. 위에서부터 1,2 번 큐빗은 보조 큐빗, 3,4,5 큐빗은 제어 큐빗들이고 마지막 큐빗은 작동 큐빗을 나타낸다.

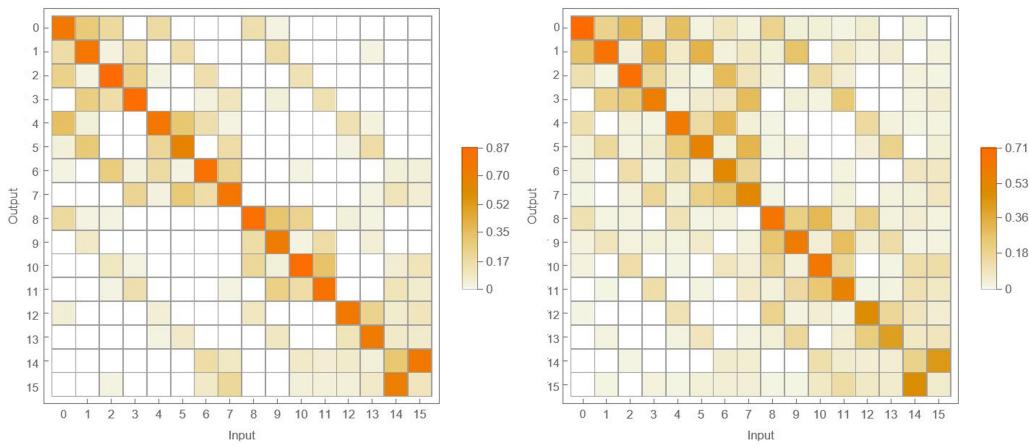
보조(ancilla) 큐빗들을 나타내고 상태들은 항상 $|0\rangle$ 으로 준비한다. 세번째부터 다섯번째 줄은 제어(control) 큐빗들이고 마지막 줄은 작동(target) 큐빗을 나타낸다. 이 회로에 사용된 게이트들은 표 1에

정리했다.

첨부파일 ‘Appendix_1_Mathematica.nb’의 섹션 1.1에서 계산 기저 (computational basis)를 이용하여 그림 1 회로의 행렬 표현이 CCCNOT 행렬임을 확인하였다.

일반 컴퓨터로 시뮬레이션 돌린 그림 1의 회로를 실제 IonQ 하드웨어 (qpu)에서 실행했다 [4]. 우리가 만든 회로가 CCCNOT 게이트임을 확인하기 위해 초기 상태를 두 가지 방법으로 분류하여 회로에 작용했다.

첫번째는 계산 기저의 상태들을 초기 상태로 두고 회로에 의해 연산된 상태를 관측한다. 이를 여러번 반복하여 연산된 상태에서의 기존 기저에 대한 기댓값을 구할 수 있다. 그림 2(a)는 첫번째 실험에 대한 결과이다. 가로와 세로 축은 각각 입력과 출력 상태의 10진수 표기법을 나타낸다. 예를 들어서 상태 $|0101\rangle$ 는 5가 된다. 데이터 값은 해당 입력 상태를 넣었을 때 나오는 출력 상태의 확률으로 주황색에 가까울수록 1에 가까워지고 흰색에 가까울수록 0에 가까워진다. 상태 하나 당 1000번 반복하였다.



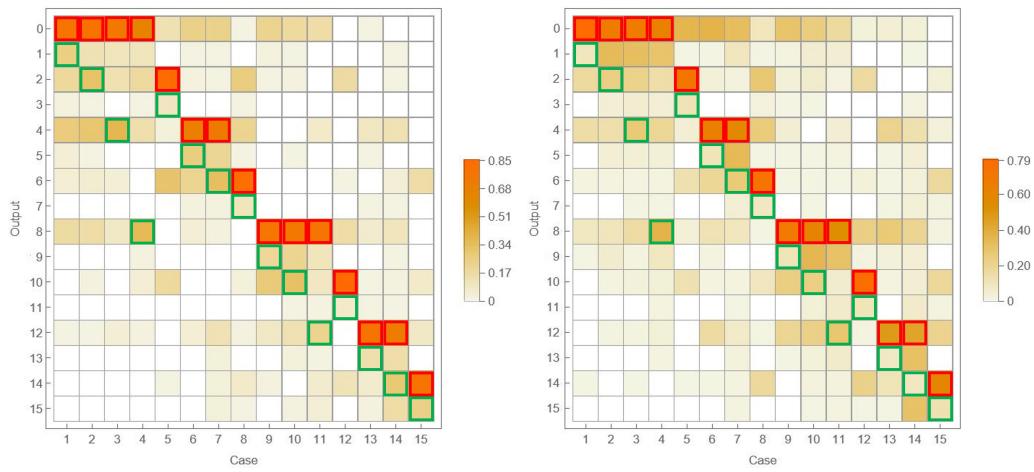
(a) 문제 1.1에서 주어진 보편적 게이트 집합 사용 (b) 문제 1.2에서 주어진 보편적 게이트 집합 사용

Figure 2: IonQ 하드웨어에 계산 기저의 상태들을 입력하여 나오는 각각의 상태들의 확률을 나타낸 그래프. 가로축 새로축은 각각 입력과 출력 상태의 10진법 표기법으로 나타내었다. 색깔이 주황색에 가까울수록 확률이 1에 가까워지고 하얀색에 가까울수록 0에 가까워진다.

그림 2(a)을 살펴보면 $|1110\rangle$ 와 $|1111\rangle$ 만 서로 교체되고 나머지 상태들은 기존 상태로 출력된다.

하지만 이 결과값을 통해 상태들 간에 존재하는 상대적 위상들은 알 수가 없다. 계산 기저의 상태가 CCCNOT 게이트를 통과하고 나오는 상태는 중첩 상태가 되지 않고 계산 기저의 상태 중 하나가 되기 때문에 각 상태들에 대한 상대적 위상은 마하-젠크 (Mach-Zender)의 간섭 실험과 동일한 원리로 측정이 가능해진다.

두번째 실험은 이 원리를 이용하여 계산용 기저 내에서 하나의 상태를 선택하고 $R_y(\pi)$ 게이트를 이용하여 다른 상태와 중첩상태로 만들고 그림 1 회로를 거친 후 $R_y(-\pi)$ 게이트를 작용한다. 예를



(a) 문제 1.1에서 주어진 보편적 게이트 집합 사용 (b) 문제 1.2에서 주어진 보편적 게이트 집합 사용

Figure 3: IonQ 하드웨어에 계산 기저의 두 상태 쌍을 간섭하여 나오는 각각의 상태들의 확률을 나타낸 그래프. 빨간 태두리와 초록 태두리의 y 축값이 간섭하는 두 상태 쌍을 10진법으로 표기한 값이다. 이를 통해 두 쌍의 상대적 위상을 구할 수 있다. 색깔이 주황색에 가까울수록 확률이 1에 가까워지고 하얀색에 가까워질수록 0에 가까워진다.

들어, $|0000\rangle$ 와 $|1000\rangle$ 의 상대적 위상을 관측하는 과정을 식으로 표현하면

$$\begin{aligned} |0000\rangle &\longrightarrow |0000\rangle + |1000\rangle \\ &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0000\rangle + e^{i\theta} |1000\rangle) \\ &\longrightarrow \cos \theta |0000\rangle + \sin \theta |1000\rangle \end{aligned} \quad (2)$$

이다. 순서대로 $|0000\rangle$ 으로 준비된 상태는 $R_y(\pi)$ 게이트를 거치고, 그림 1 회로를 거치고 $R_y(-\pi)$ 게이트를 거친다. 회로를 다 거친 이후의 최종 상태를 보면, $|0000\rangle$ 와 $|1000\rangle$ 의 상대적 위상 θ 은 두 상태의 관측 결과 평균값의 비율을 통해 구해진다. 단, CCCNOT 회로에 의해 상태 하나가 뒤집히는 $|1111\rangle$ 또는 $|1110\rangle$ 가 하나 포함되는 경우 다시 기존의 상태로 뒤집어준 이후에 관측해야 한다.

그림 3(a)는 위에서 언급한 방법으로 두 상태 간의 상대적 위상을 IonQ 하드웨어를 통해 관측한 결과를 정리한 그림이다. 가로축에 해당하는 경우(case)들은 표 2에 정리되어 있고 세로축은 출력 상태의 10진법 표기법이다. 상태 하나 당 1000번 반복하였다. 이상적인 CCCNOT 게이트일 경우, 두 상태 간의 상대적 위상이 0 이기 때문에 빨간 태두리 내부의 값이 1이고 초록색 태두리 내부의 값이 0 이 나와야 한다. 하지만 장비의 오차에 의해 상대적 위상 또한 오차가 발생한다.

표 2에 두 상태 이외로 관측되는 결과값을 제외하고 상태 쌍만을 가지고 계산한 상대적 위상을 정리했다. 이 값이 0에 근접한 것을 통해 우리가 구한 회로가 CCCNOT에 근사함을 간단하게 확인했다. 이 모 든 실험은 첨부파일 ‘Appendix_1_1_Qiskit.ipynb’에서 실행하였고 ‘Appendix_1_Mathematica.nb’ 의 섹션 1.1에서 분석하였다. 우리의 회로의 행렬 표현이 CCCNOT임을 더 정확하게 확인하기 위해서 양자 프로세스 토모그래피(quantum process tomography)를 통해 구해야 한다.

Case	Initial State	Interfered State	Relative Phase/ 2π	
			problem 1.1	problem 1.2
1	$ 0000\rangle$	$ 0001\rangle$	0.0313783	0.0214477
2	$ 0000\rangle$	$ 0010\rangle$	0.0394243	0.0409203
3	$ 0000\rangle$	$ 0100\rangle$	0.0556554	0.0453849
4	$ 0000\rangle$	$ 1000\rangle$	0.0543491	0.0645028
5	$ 0010\rangle$	$ 0011\rangle$	0.0186172	0.0257251
6	$ 0100\rangle$	$ 0101\rangle$	0.0334091	0.0272407
7	$ 0100\rangle$	$ 0110\rangle$	0.0428703	0.0510128
8	$ 0110\rangle$	$ 0111\rangle$	0.0195718	0.0222501
9	$ 1000\rangle$	$ 1001\rangle$	0.0272956	0.0258323
10	$ 1000\rangle$	$ 1010\rangle$	0.040534	0.0438119
11	$ 1000\rangle$	$ 1110\rangle$	0.0299256	0.0576992
12	$ 1010\rangle$	$ 1011\rangle$	0.0160771	0.0234017
13	$ 1100\rangle$	$ 1101\rangle$	0.02301	0.0306782
14	$ 1100\rangle$	$ 1101\rangle$	0.0373804	0.0363934
15	$ 1110\rangle$	$ 1111\rangle$	0.0308965	0.0309379

Table 2: 그림 3의 x 축에 사용한 경우들을 정리한 표. 각각의 경우에 따라 초기에 준비해 놓은 상태와 간섭시키는 상태들에 따른 상대적 위상을 정리하였다.

우리가 예상한 결과와 다르게 오차가 나는 원인은 게이트들의 정확도가 1이 아니기 때문이다. 예를 들어서 두 큐빗 게이트의 정확도가 0.98라 가정할 때, 두 큐빗 게이트를 13개 사용하는 우리의 회로의 정확도는 $0.98^{13} \approx 0.77$ 이 된다.

1.2 Task 2 (Level 1)

그림 4은 보편적 게이트 집합 $\{R_{xx}(\pi/2), R_x(\theta), R_y(\theta), R_z(\theta)\}$ 을 사용하여 CCCNOT 게이트를 실행하는 회로를 나타내는 그림이다. 이 때 사용한 $R_{xx}(\pi/2)$ 는

$$R_{xx}\left(\frac{\pi}{2}\right) := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & -i & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

이다. 여기서 첫째와 둘째 줄은 보조 큐빗들을 나타내고 상태들은 항상 $|0\rangle$ 으로 준비한다. 세번째부터 다섯번째 줄은 제어 큐빗들이고 마지막 줄은 작동 큐빗을 나타낸다. 이 회로에 사용된 게이트들은 표 1에 정리했다.

첨부파일 ‘Appendix_1_Mathematica.nb’의 섹션 1.2에서 계산 기저를 이용하여 그림 4의 행렬 표현이 CCCNOT 행렬임을 확인하였다.

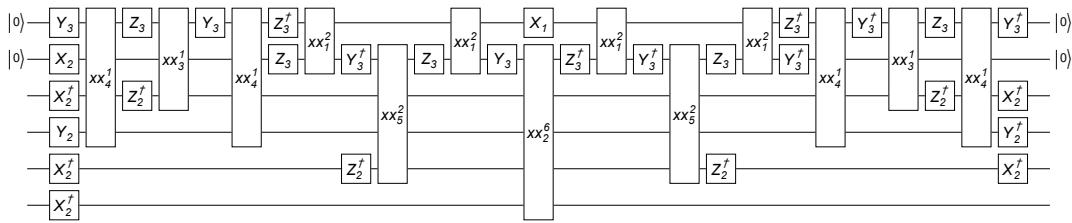


Figure 4: 문제 1.2에서 구하라고 지시한 $R_{xx}(\pi/2)$ 을 포함한 보편적 게이트 집합을 이용하여 나타낸 CCCNOT 게이트 회로도. 1,2번 큐빗은 보조 큐빗이고, 3,4,5번 큐빗은 제어 큐빗이고 마지막 큐빗은 작동 큐빗이다.

그림 4 회로를 IonQ 하드웨어에 입력하여 문제 1.1과 동일한 방법으로 분석한다. 크기와 상대적 위상에 대한 결과는 각각 그림 2(b)와 3(b)에 해당한다. 상대적 위상을 계산한 값은 표 2에 정리했다. 이 회로 또한 CCCNOT 게이트에 근사하다는 것을 확인할 수 있었다. 이 모든 실험은 첨부파일 ‘Appendix_1_2_Qiskit.ipynb’에서 실행하였고 ‘Appendix_1_Mathematica.nb’의 섹션 1.2에서 분석하였다.

오차는 그림 4의 회로가 더 크게 나온다. 이는 CNOT 와 $R_{xx}(\pi/2)$ 모두 두 개 큐빗 게이트이지만, $R_{xx}(\pi/2)$ 는 연속적인 각도 변수에 $\pi/2$ 의 값을 대입한 게이트이기 때문에 독립적으로 존재하는 CNOT 게이트에 비해 최적화가 덜 되어있을 것이라 생각되어진다. 이 때문에 $R_{xx}(\pi/2)$ 의 정확도가 CNOT 게이트에 비해 떨어지고, 그림 2(a)와 2(b), 3(a)와 3(b)의 결과 모두 그림 4의 회로가 그림 1의 회로에 비해 정확도가 떨어지는 것을 보여준다.

1.3 Task 3 (Level 2)

문제 1.1과 1.2에서 사용한 회로보다 최적화된 회로를 구현하였다. 각각의 보편적인 게이트 집합에 대하여 CCCNOT 게이트를 최적화한 회로는 각각 그림 5(b)과 5(c)이다. 여기서 위에서부터 첫째 줄은 보조 큐빗, 둘째부터 넷째 줄은 제어 큐빗들이고 마지막 줄은 작동 큐빗을 나타낸다. 또한

$$X_\alpha := R_x \left(\frac{5\pi}{4} \right) \quad (4)$$

이면 나머지 게이트들은 표 1에 정리되어져 있다. 이 회로들은 Toffoli 게이트로 분해한 CCCNOT 게이트를 나타내는 그림 6(a)의 회로에서 Toffoli 게이트들을 각각의 보편적 게이트 집합에 맞게 분해하여 구했다. 그림 5(b) 회로는 12개의 CNOT 게이트와 6개의 z 방향 회전 게이트를 제외한 단일 큐빗 게이트들로 이루어져 있고, 그림 5(c) 회로는 12개의 $R_{xx}(\pi/2)$ 게이트와 17개의 z 방향 회전 게이트를 제외한 단일 큐빗 게이트들로 이루어져 있다.

문제 1.1과 1.2와 동일한 방법으로 첨부파일 ‘Appendix 1 Mathematica.nb’의 세션 1.3에서 그림

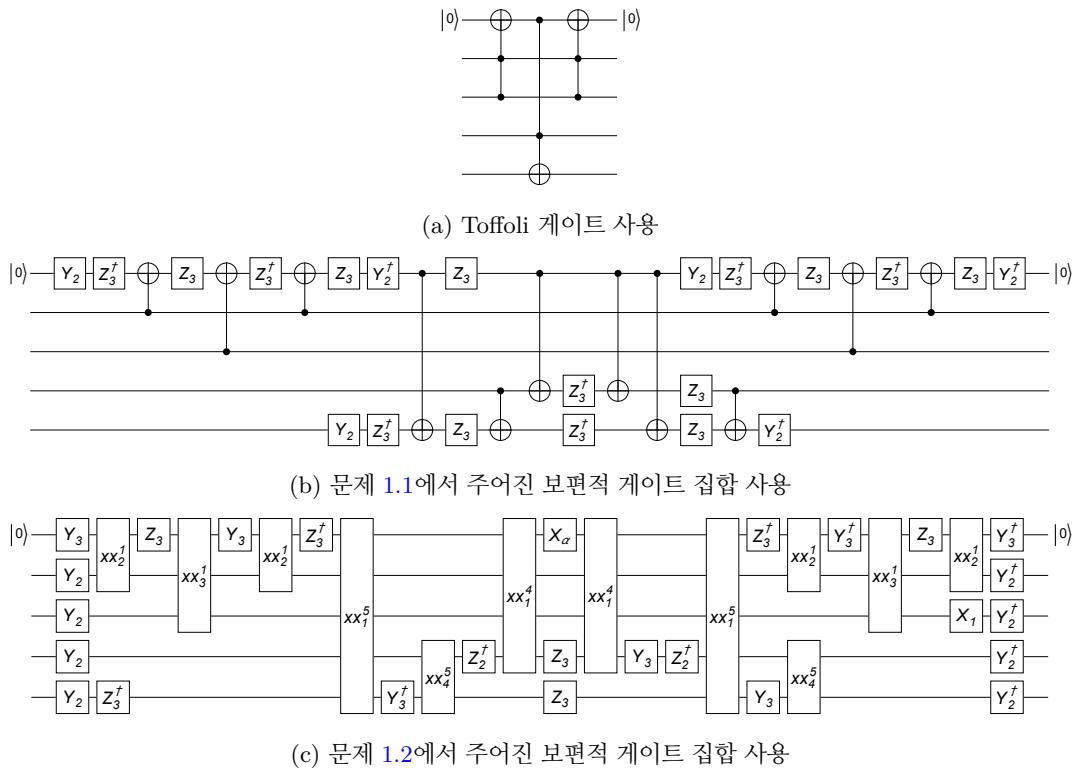


Figure 5: 문제 1.3에서 구하라고 지시한 각각 다른 보편적 게이트 집합을 이용하여 분해한 CCCNOT 게이트의 회로. 위에서부터 첫번째 큐빗은 보조 큐빗, 2,3,4 큐빗은 제어 큐빗들이고 마지막 큐빗은 작동 큐빗을 나타낸다.

5(b)와 5(c)의 회로들이 행렬 표현이 CCCNOT 행렬임을 확인하였다. 하드웨어 결과는 문제 1.1과 1.2에서 돌린 결과인 그림 2와 3으로 대체한다.

1.4 Task 4 (Level 2)

각각의 보편적인 게이트 집합에 대하여 CCCCNOT 게이트를 최적화한 회로는 각각 그림 6(b)과 6(c)이다. 여기서 위에서부터 첫째줄과 둘째줄은 보조 큐빗, 셋째부터 여섯째줄은 제어 큐빗들이고 마지막 줄은 작동 큐빗을 나타낸다. 이 회로들은 Toffoli 게이트로 분해한 CCCCNOT 게이트를 나타내는 그림 6(a)의 회로에서 Toffoli 게이트들을 각각의 보편적 게이트 집합에 맞게 분해하여 구했다. 여기서 사용된 게이트들은 표 1에 정리되어져 있다. 두 회로 모두 14개의 두 큐빗 게이트 층으로 이루어져 있다.

문제 1.1, 1.2, 1.3와 동일한 방법으로 첨부파일 ‘Appendix_1_Mathematica.nb’의 섹션 1.4에서 그림 6(b)와 6(c)의 회로들의 행렬 표현이 CCCCNOT 행렬임을 확인하였다.

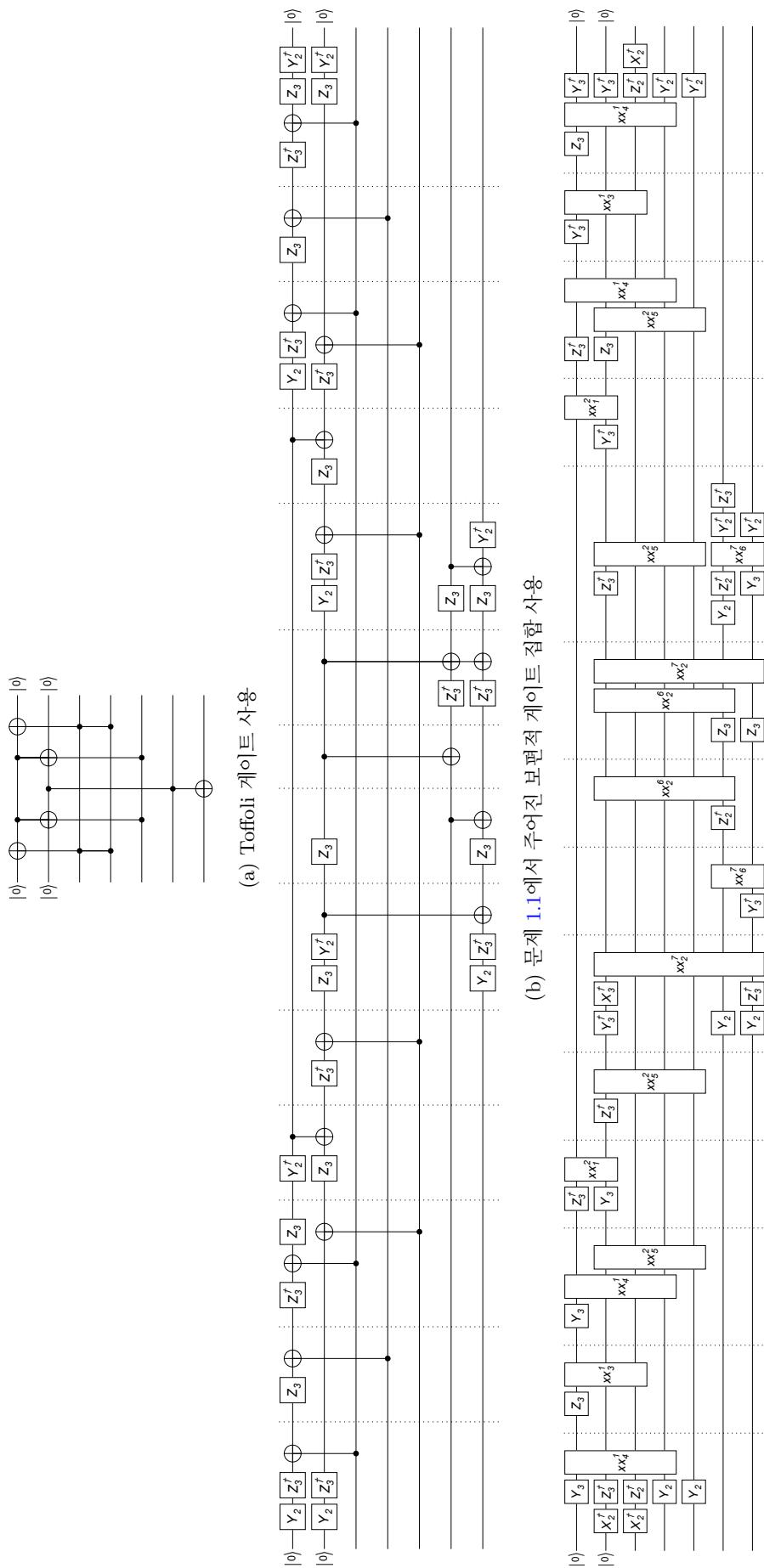


Figure 6: 문제 1.4에서 구하고 지시한 각각 다른 보편적 게이트 집합을 사용하여 문제 1.1에서 구한 CCCCNOT 게이트의 회로. 위에서부터 1,2 큐비트은 보조 큐비트, 3,4,5,6 큐비트은 전트롤 큐비트이고 마지막 큐비트은 타겟 큐비트을 나타낸다.

1.5 Task 5 (Level 3)

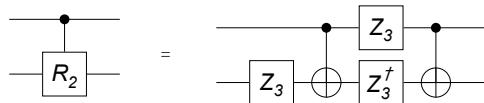
문제에서 제시한 유니터리 U 는 큐빗 3개로 이루어진 불연속 푸리에 변환 행렬이다. 그림 8(a)의 회로는

Controlled- R_k 을,

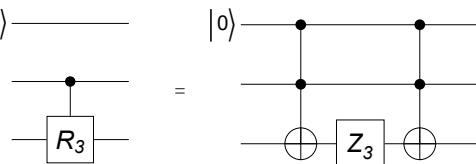
$$\text{Controlled-}R_k := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-2i\pi/2^k} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

이용하여 불연속 푸리에 변환 행렬이 될 수 있는 행렬을 구현한 회로이다[5]. 그림 8(a) 회로 뒤에 첫번째와 세번째 큐빗에 SWAP 게이트를 연결해야 정확한 푸리에 변환 행렬이 된다. 하지만 이 과정은 양자 회로에서 해결하지 않고, 결과값의 큐빗들의 순서를 처음과 역순으로 다시 재배열함으로 해결이 가능하다. 다시 말해 위에서부터 첫번째, 두번째, 세번째 큐빗으로 정했던 것을 아래로부터 첫번째, 두번째, 세번째 큐빗이라 바꾸면 된다.

이제 그림 8(a) 회로의 게이트들을 주어진 게이트들로 분해한다. 우선 Controlled- R_2 를 분해하면 그림 7(a)와 같다. 반면에 Controlled- R_3 을 동일한 방법으로 분해하기 위해서는 $R_z(\pi/8)$ 게이트가



(a) Controlled- R_2 게이트를 보편적 게이트 집합으로 구현한 회로



(b) 보조 큐빗에 해당하는 첫째줄을 추가로 이용하여 Controlled- R_3 게이트를 보편적 게이트 집합으로 구현한 회로도

Figure 7: 세 개의 큐빗으로 이루어진 불연속 푸리에 변환에 사용하는 Controlled- R_2 와 Controlled- R_3 을 분해한 회로도.

필요하지만 우리에게 주어지지 않았다. 이를 해결하기 위해 그림 7(b)과 같이 보조 큐빗 하나와 Toffoli 게이트를 이용하여 분해한다. 마지막으로 Toffoli와 CNOT 게이트들도 주어진 게이트 집합으로 분해하고 최적화하면 그림 8(b)의 회로가 된다. $R_z(\pi/4)$ 게이트는 총 15개 사용하였다.

첨부파일 ‘Appendix_1_Mathematica.nb’의 1.5섹션에서 그림 8(b)의 회로를 거친 이후에 큐빗의 순서를 역순한다면 불연속 푸리에 변환 행렬이 되는 것을 확인하였다.¹

우리는 임의의 보편적 게이트 집합을 이용하여 CCCNOT 게이트와 CCCCNOT 게이트를 구현하였다. 추가로 게이트 갯수를 줄여 최적화하고 실제 IonQ 하드웨어를 통해 관측했다. 또한, 불연속 푸리에 변환 행렬을 만들어 보았다. 이러한 과정을 통해 임의의 양자연산을 보편적 게이트 집합으로 분해하고 최적화 할 수 있게 되었다.

¹제시된 문제 1.5의 (3)식 행렬에서 3행 6열의 $-i$ 가 i 로 되어야 유니터리 행렬이고 푸리에 변환에 맞다.

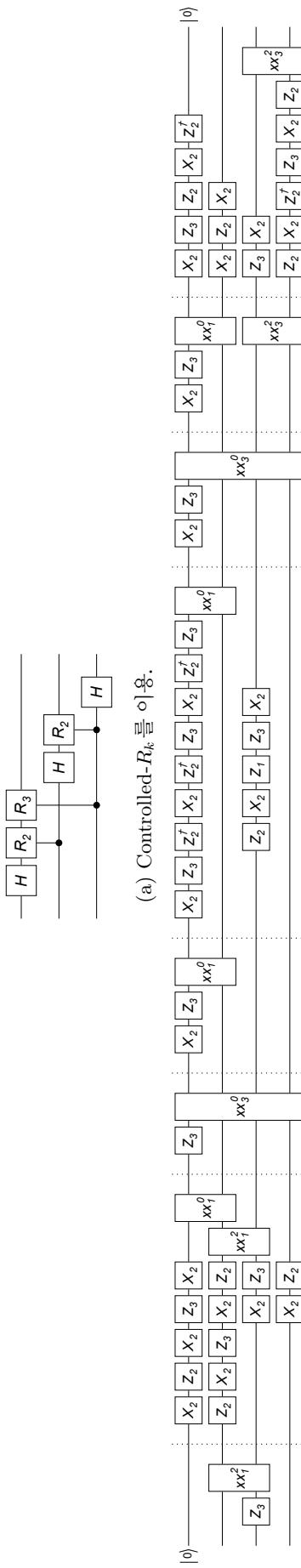


Figure 8: 문제 1.5에서 구하라고 지시한 보편적 게이트 집합으로 나타낸 유사 양자 푸리에 변환 회로. (b)의 두번째와 네번째 큐빗간에 SWAP 게이트를 사용하지 않고, 아래서부터 역순으로 큐빗의 순서를 바꿈으로써 정확한 푸리에 변환 회로를 구현한다.

2 Ion Trap Design

2.1 Task 1 (Level 1): Surface Trap Background

이 문제를 통해 3차원 전극을 2차원에 투영시켜 표면 트랩을 실현한다 [6]. 등각 (Conformal; Möbius) 맵핑을 이용하여 원통형 공간에 배열된 전극을 표면으로 투영해 그린다. 반지름이 d 인 원통 모양 가운데에 이온이 트랩 되어있다고 생각하면, 이온을 감싸고 있는 전극의 면은 $c_i = de^{i\phi_i}$ 로 정의된다. 여기서 ϕ 는 실수축(Re)으로 부터의 복소수의 각이다. 이 전극을 면으로 매핑하면 $p(c) = d \frac{2c}{d+c}$ 가 되고, 이 위치는 $r(p(de^{i\phi})) = d\hat{x} + d \tan\left(\frac{\phi}{2}\right)\hat{y}$ 로 표시할 수 있다.

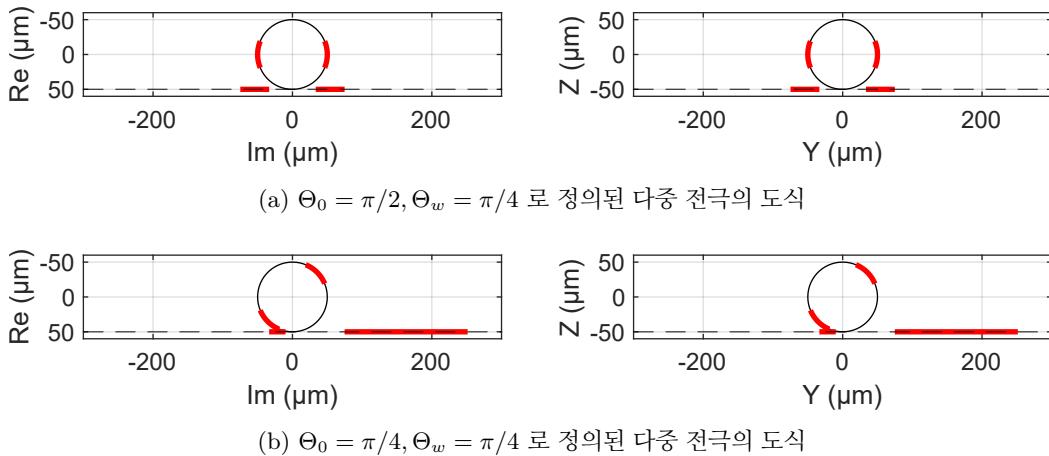


Figure 9: 2.1.1와 2.1.2의 전극의 등각맵핑 도식. 참고문헌 [6]의 그림 6의 표기법을 따른다.

2.1.1 Symmetric electrodes

대칭적인 다중 전극을 생각한다. 그림 9(a)과 같이, 이 다중 전극은 $\Theta_0 = \pi/2$ 이고, $\Theta_w = \pi/4$ 로 정의된다. 우선 원통형에서 첫번째 전극은 $\frac{3}{2}\pi - \frac{1}{8}\pi < \phi < \frac{3}{2}\pi + \frac{1}{8}\pi$ 에서 정의되고, 반대방향 전극은 $\frac{1}{2}\pi - \frac{1}{8}\pi < \phi < \frac{1}{2}\pi + \frac{1}{8}\pi$ 에서 정의된다.

전극을 평면위에 그린 결과, 좌측과 우측의 결과가 실수축을 대칭으로 그려진다. 좌측의 전극은 허수축(Im) 값이 $-75 \mu\text{m}$ 부터 $-33 \mu\text{m}$ 까지 그려지고, 우측의 전극은 그 반대에 그려진다. ($x = 0$) 인 yz 평면에서 보면 원점이 이온의 위치가 되고, 전극은 $z = -50 \mu\text{m}$, 그리고 $33 \mu\text{m} < |y| < 75 \mu\text{m}$ 에서 정의된다.

2.1.2 Asymmetric electrodes

비대칭적인 다중 전극을 고려한다. 그림 9(b)와 같이, 이 다중 전극은 $\Theta_0 = \pi/4$ 이고 $\Theta_w = \pi/4$ 로 정의된다. 우선 원통형에서 첫번째 전극은 $\frac{5}{4}\pi - \frac{1}{8}\pi < \phi < \frac{5}{4}\pi + \frac{1}{8}\pi$ 에서 정의되고, 반대방향 전극은 $\frac{1}{4}\pi - \frac{1}{8}\pi < \phi < \frac{1}{4}\pi + \frac{1}{8}\pi$ 에서 정의된다.

전극을 평면위에 그린 결과, 좌측과 우측의 전극은 비대칭적으로 그려진다. ϕ 값이 큰 좌측의 전극이 더 짧은 폭으로 투영되며 가운데 ($Im = 0$)에 더 가깝게 그려진다. 좌측 전극의 허수값이 $-33 \mu\text{m}$ 부터 $-9.9 \mu\text{m}$ 까지 그려지고, 우측 전극의 허수값이 $75 \mu\text{m}$ 부터 0.25 mm 까지 그려진다. yz 평면에서 고려한다면, $z = -50 \mu\text{m}$, 그리고 $-33 \mu\text{m} < y < -9.9 \mu\text{m}$, $75 \mu\text{m} < y < 0.25 \text{ mm}$ 에서 정의된다.

2.1.3 Conformal mapping for surface electrodes design

참고문헌 [6]의 Appendix B.2와 같이, 등각맵핑은 각도를 보존하는 맵핑 방법이다. 그렇기 때문에, 중심에서 전극사이의 구면각을 같게 유지할 수 있다. 포텐셜은 구면각에 의존하기 때문에 같은 구면각에서 유사한 포텐셜을 만들 수 있고, 또한, 전기장은 포텐셜의 기울기이므로 전기장도 유사하게 만들 수 있다.

표면 트랩을 이용하면, 표면 트랩 윗면이 뚫려 있기 때문에 위에서 이미징을 위한 높은 N.A.를 가지는 광학계를 위치할 수 있다 [7]. 기존의 선형 트랩은 전극으로 가로막혀 레이저를 비출 때 제한사항이 있지만, 표면 트랩을 이용하면 이러한 어려움을 극복할 수 있다. 마이크로 공정(fabrication)을 이용해 디자인 할 수 있다 [8, 9]. 그래서, PCB 기판 혹은 리소그래피, 혹은 실리콘 기판을 이용하면 빠르게 새로운 표면 트랩을 디자인하고, 제작 할 수 있는 장점이 있다. 그리고 DC 기판을 추가하기 용이하고, 이를 이용해 트랩 배열을 제어해 여러 큐빗을 제어하는 큰 스케일의 실험을 가능하게 한다 [10].

2.2 Task 2 (Level 2): RF Electrode Simulation

MATLAB에서 유한 비오-사바르 적분을 이용해 포텐셜을 계산했다 [6]. 계산한 코드는 코드 1에 포함되어있고, ‘Appendix_2_2_and_3_BiotSavart_V_E_U.m’ 파일에 첨부되었다. 전극의 선폭은 문제 2.1.1에서 그린 그림 9(a)을 통해 찾았다. 두 전극은 $z = 0 \mu\text{m}$ 인 면에 위치하고, $x = \pm 1500 \mu\text{m}$ 까지 뻗어있다. 그리고, 첫번째 전극은 $-75 \mu\text{m} < y < -33 \mu\text{m}$ 영역에 위치하고, 두번째 전극은 $33 \mu\text{m} < y < 75 \mu\text{m}$ 영역에 위치한다.

```

1 %% Parameters
2 v=1; % Electric potential on electrodes, units in V
3 d=50e-6; % Ion distance, units in meters
4
5 x_range=-1500e-6:1e-6:1500e-6; % X range
6 z_range=10e-6:1e-6:80e-6; % Y range
7 y_range=-100e-6:1e-6:100e-6; % Z range
8
9 %% Conformal mapping definitions
10 p=@(c) d*2*c./(d+c); % Conformal map definition
11
12 c11=d*exp(i*(3*pi/2+pi/8)); % electrode 1
13 c12=d*exp(i*(3*pi/2-pi/8)); % electrode 1
14 c21=d*exp(i*(1*pi/2+pi/8)); % electrode 2
15 c22=d*exp(i*(1*pi/2-pi/8)); % electrode 2
16
17 p11=p(c11); % Electrode 1
18 p12=p(c12); % Electrode 1
19 p21=p(c21); % Electrode 2
20 p22=p(c22); % Electrode 2

```

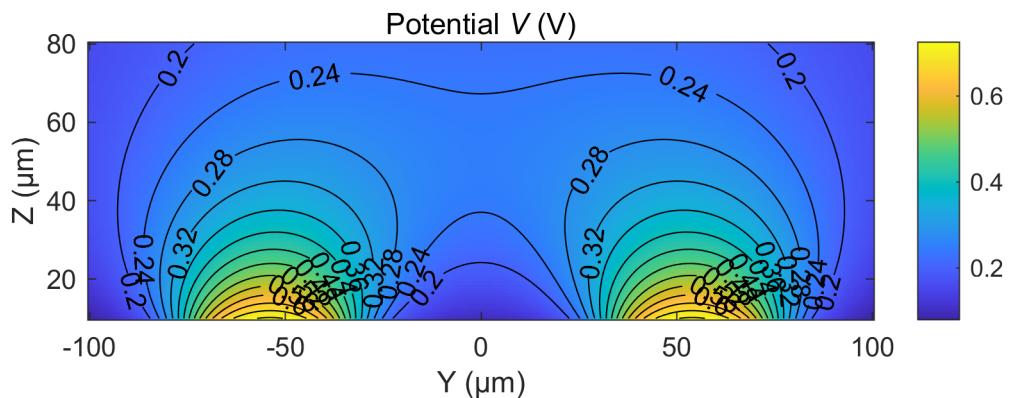
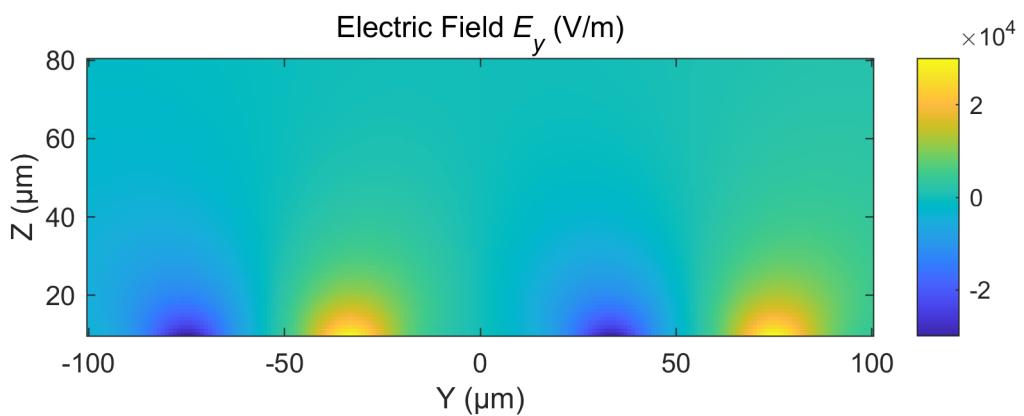
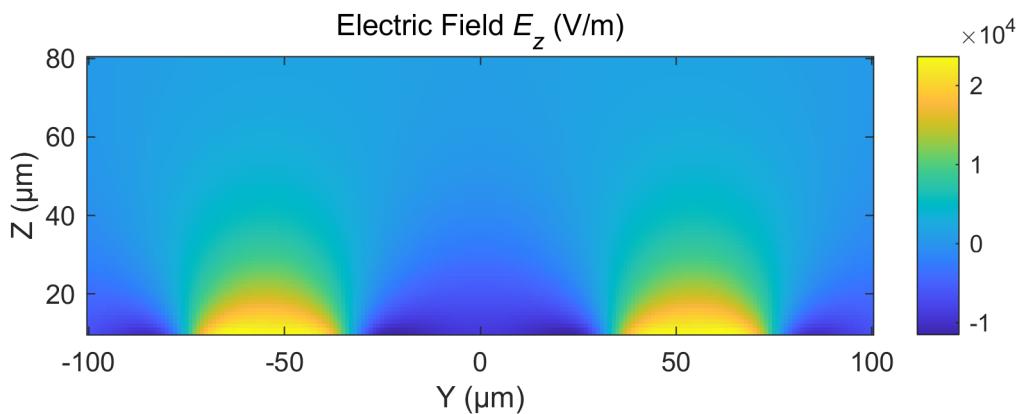
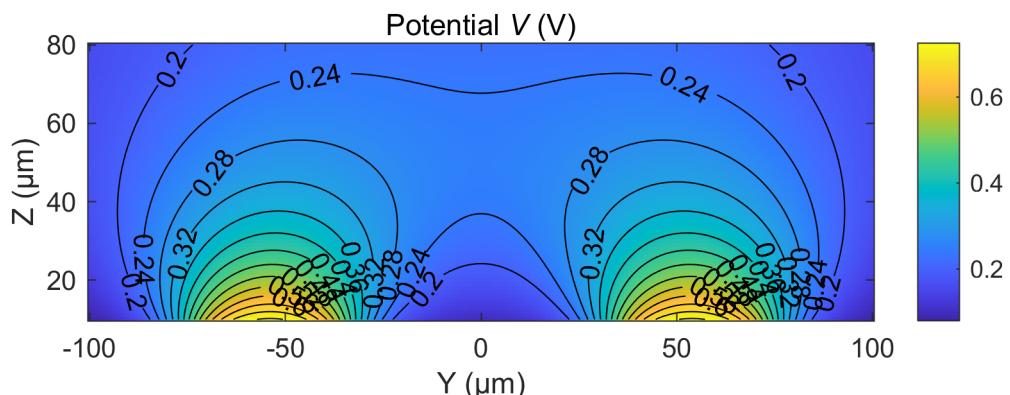
(a) 비오-사바르 법칙을 이용해 계산한 포텐셜 V 이미지 및 등고선(b) Y 방향 전기장 E_y (c) Z 방향 전기장 E_z

Figure 10: 비오-사바르 법칙을 이용해 계산한 전기적 포텐셜과 전기장

Figure 11: 해석적인 방법을 이용해 계산한 포텐셜 V 이미지 및 등고선

```

21
22 %% Calculation Solid Angle using Biot-Savart's Law
23 omega=zeros(length(z_range),length(y_range));
24 [mesh_y mesh_z]=meshgrid(y_range,z_range);
25 x=0;
26 disp('# grab a coffee! This can take up to a few minutes.')
27 for yy=1:length(y_range) % Integrate each point
28   disp(['Job status is ' num2str(yy/length(y_range)*100, '%.1f') ' %'])
29   for zz=1:length(z_range)
30     y=y_range(yy);
31     z=z_range(zz);
32     omega_func = @(xp,yp) z ./((x-xp).^2+(y-yp).^2+(z)^2).^(3/2);
33     omega_23=omega_func(x,y,z);
34     omega_23=omega_23+integral2(omega_func,x_range(1),x_range(end),imag(p12)
35 ,imag(p11));
36     omega_23=omega_23+integral2(omega_func,x_range(1),x_range(end),imag(p22)
37 ,imag(p21));
38   end
39 end
40
41 %% Calculation Potential
42 potential=v/2/pi*omega; % Calculate Potential
43
44 %% Calculation Electric Field
45 [eY,eZ]=gradient(potential,1e-6,1e-6);
46 eY=-eY;
47 eZ=-eZ;
48
49 %% Figure for Potential
50 f22A=figure('Color','w','Units','inch','Position',[1 1 6 3]);
51 imagesc(y_range*1e6,z_range*1e6,potential)
52 hold on
53 contour(mesh_y*1e6,mesh_z*1e6,potential,0.20:0.04:0.90,'LineColor','k','LineWidth',0.5,
54 'ShowText','on')
55 hold off
56 daspect([1 1 1])
57 colorbar
58 title('Potential {\it V} (V)')
59 xlabel('Y (m)')
60 ylabel('Z (m)')
61 set(gca,'YDir','Normal','FontName','Arial','Linewidth',0.5);
62
63 %% Figure for Electric field
64 f22B=figure('Color','w','Units','inch','Position',[7 1 6 3]);
65 imagesc(y_range*1e6,z_range*1e6,eY)
66 daspect([1 1 1])
67 colorbar
68 title('Electric Field {\it E_y} (V/m)')
69 xlabel('Y (m)')
70 ylabel('Z (m)')
71 set(gca,'YDir','Normal','FontName','Arial','Linewidth',0.5);
72
73 f22C=figure('Color','w','Units','inch','Position',[7 4 6 3]);
74 imagesc(y_range*1e6,z_range*1e6,eZ)
75 daspect([1 1 1])
76 colorbar
77 title('Electric Field {\it E_z} (V/m)')
78 xlabel('Y (m)')
79 ylabel('Z (m)')
80 set(gca,'YDir','Normal','FontName','Arial','Linewidth',0.5);
81
82 %% Ponderomotive Energy
83 %% Parameters
84 v_up=150; % Electric potential on electrodes, units in V
85 d=50e-6; % Ion distance in meters, units in m
86 potential_23=v_up/2/pi*omega;
87 [mesh_y mesh_z]=meshgrid(y_range,z_range);
88
89 [eY_23,eZ_23]=gradient(potential_23,1e-6,1e-6);
90 eY_23=-eY_23;
91 eZ_23=-eZ_23;
92
93 %% Natural Parameters
94 e_charge=1; % Electron charge, units in e
95 mass171Yb=171*931.5e6; % Mass of 171Yb, units in eV/c^2
96 %omega_RF=30e6;

```

```

94 omega_RF=2*pi*30e6; % RF angular freqneucy, units in rad/s
95 lightspeed=299792458; % Speed of light, units in m/s
96 plank_ev=4.1356e-15; % Plank constant in units in eV.s
97
98 %% Calculation Ponderomotive Energy
99 u_p=e_charge^2/4/(mass171Yb/(lightspeed)^2)/omega_RF^2*(eY_23.^2+eZ_23.^2); %
    Ponderomotive energy
100
101 %% Figure: Ponderomotive Potential
102 f23B=figure('Color','w','Units','inch','Position',[1 4 6 3]);
103 imagesc(y_range*1e6,z_range*1e6,log2(u_p))
104 hold on
105 contour(mesh_y*1e6,mesh_z*1e6,u_p,[2.^(-6:1:6)],'LineColor','k','LineWidth',0.5,
    'ShowText','on')
106 hold off
107 daspect([1 1 1])
108 colorbar('XTickLabel',{'2^{-8}','2^{-6}','2^{-4}','2^{-2}', '1','2^{2}', '2^{4}', '2^{6}', '2^{8}'}, ...
    'XTick',log2([2.^(-8:2:8)]))
109 title('Ponderomotive Potential \{u_p\} (eV)')
110 xlabel('Y (m)')
111 ylabel('Z (m)')
112 set(gca,'YDir','Normal','FontName','Arial','Linewidth',0.5);
113 caxis([-9 7])
114
115 %% Values at the mentioned points
116 V_0_50=potential(41,101) % Potential at (0,50)
117 V_10_50=potential(41,111) % Potential at (10,50)
118
119 u_p_0_50=u_p(41,101) % Ponderomotive at (0,50)
120 u_p_25_40=u_p(31,126) % Ponderomotive at (25,40)
121
122 %% Export Figures
123 %exportgraphics(f22A,'F_22_A_export.png','Resolution',300)
124 print(f22A,'F_22_A_print','-dpng','-r300')
125 %exportgraphics(f22B,'F_22_B_export.png','Resolution',300)
126 print(f22B,'F_22_B_print','-dpng','-r300')
127 %exportgraphics(f22C,'F_22_C_export.png','Resolution',300)
128 print(f22C,'F_22_C_print','-dpng','-r300')
129 %exportgraphics(f23B,'F_23_B_export.png','Resolution',300)
130 print(f23B,'F_23_B_print','-dpng','-r300')

```

Listing 1: ‘Appendix_2_2_and_3_BiotSavart_V_E_U.m’ Calculation for electric potential @MATLAB

비오-사바르 법칙을 이용해서, 각 위치에서 전극까지의 구면각을 계산했다. 그 결과로 포텐셜을 계산했다. 그림 10(a)과 같이 포텐셜과 그 등고선을 계산하고, 그렸다. 전극 근처에서 포텐셜이 가장 크고, 전극에서 멀어질수록 포텐셜이 줄어든다. 여기서 특별히 살펴 볼 수 있는 곳은 원점 근처이다. 원점 주변에서는 등고선의 불록한 부분이 모두 원점 근처를 향하고 있고, 이를 통해 정성적으로 원점에서 전기장은 $\vec{E} \simeq 0$ 이고, 포텐셜의 안장점(saddle point)이 있음을 알 수 있다. 문제에서 제시한 두 지점 (x, y, z) 는 $(0, 0, 50 \mu\text{m})$ 과 $(0, 10 \mu\text{m}, 50 \mu\text{m})$ 에서의 포텐셜은 $V(0, 0, 50 \mu\text{m}) = 0.250 \text{ V}$, $V(0, 10 \mu\text{m}, 50 \mu\text{m}) = 0.254 \text{ V}$ 으로 거의 같은 값이다.

힌트에 따라서 이를 x 축 방향으로 무한한 도선에서의 결과와 비교해서 검증했다. 이 경우 높이 $\sim 50 \mu\text{m}$ 나 이온의 x 방향 사이의 간격 $\sim \mu\text{m}$ 보다 $\pm 1500 \mu\text{m}$ 의 도선이 충분히 길어, 무한한 도선과의 결과가 거의 유사하다. 무한한 도선에서는 해석적인 방법으로 계산이 가능한데, 우선, 구면각 $\Omega_A(\mathbf{r})$

을 계산합니다 [6]. 표면 트랩 전극에서 구면각을 간단히 쓰면 방정식

$$\begin{aligned}\Omega_A(\mathbf{r}) &= \int_A \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{z}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d\mathbf{x}' dy' \\ \Omega_A(x = 0, y, z) &= \int_{y_1}^{y_2} dy' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{z}{(x'^2 + (y - y')^2 + z^2)^{3/2}}\end{aligned}\quad (6)$$

과 같고, 수식 6에서 y_1, y_2 은 전극의 y 방향의 위치이고, d 는 이온의 높이이다. 구면각을 해석적으로 계산하면

$$\begin{aligned}\Omega_A(x = 0, y, z) &= \int_{y_1}^{y_2} dy' \frac{2z}{(y - y')^2 + z^2} \\ &= 2 \tan^{-1} \left(\frac{Y}{z} \right) \Big|_{y_1-y}^{y_2-y} = 2 \left(\tan^{-1} \left(\frac{y_2 - y}{z} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{y_1 - y}{z} \right) \right)\end{aligned}\quad (7)$$

와 같고, 수식 7에서 변수 $Y = y' - y$ 는 적분 중간 치환에 사용한 변수이다. 이를 이용해서, 전극위의 포텐셜을 해석적으로 계산하고, 더해서 여러개 전극에서의 포텐셜을 계산할 수 있다. 해석적으로 계산한 결과의 이미지는 그림 11과 같다. 해석적인 방법으로 계산한 그림 11과 비오-사바르 적분을 이용해 계산한 그림 10(a)과 유사하다.

트랩을 표면에 투영할 때 x 방향 대칭성이 이용된다. 포텐셜이 x 방향으로 대칭이기 때문에, 반대 부호인 x 위치에서의 값이 다르거나, x 가 0 인 지점에서의 전기장값이 존재하는지 판단해 검증하고 비교하는데 활용 할 수 있다.

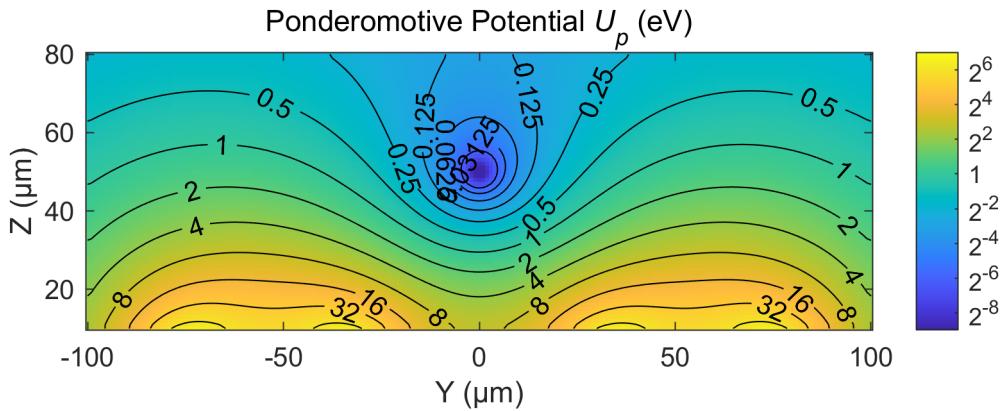
2.3 Task 3 (Level 2): Ponderomotive Potential and Pseduopotential

문제에서 제시한 참고 동영상을 보면 말안장 모양의 포텐셜이 빠르게 움직일 때, 그 가운데에서 공이 안정적으로 위치할 수 있음을 알 수 있다 [11]. 이는 $\vec{E} \simeq 0$ 위치에서 준정적으로 계산 될 수 있어, RF null 근처에서 유효하다 [12]. 그리고, RF 진동수가 충분히 큰 경우에 $\Omega \rightarrow \infty$ 시간평균적으로 유사포텐셜을 사용할 수 있다.

이 경우, ^{171}Yb 의 질량은 $171 \times 931.5 \text{ MeV}/c^2 = 159.3 \times 10^9 \text{ eV}/c^2$ 이고, RF 의 각진동수는 $\Omega = 2\pi \times 30 \text{ MHz}$, 진폭은 $V = 150 \text{ V}$ 이다. 이 값을 이용해 폰더르모티브에너지 (ponderomotive energy) 를

$$U_p(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4M\Omega^2} |\mathbf{E}_{RF}(\mathbf{r})|^2 \quad (8)$$

같이 계산할 수 있다 [1]. 수식 8에서 M 은 이온의 질량, Ω 는 RF 의 각진동수, e 는 단일전자의 전하이다. 2.2에서 계산한 그림 10(b), 10(c)의 전기장을 전위의 비율 만큼 곱해 이번 경우의 전기장을 찾을 수 있고, 이를 이용해서 공간에서의 폰더르모티브 에너지 분포를 계산할 수 있고, 그 분포는 그림 12와 같다.

Figure 12: Ponderomotive 에너지 $U_p(\mathbf{r})$

그리고, 특정한 두 지점 $(0, 0, 50 \mu\text{m}), (0, 25 \mu\text{m}, 40 \mu\text{m})$ 에서의 에너지는 $U_p(0, 0, 50 \mu\text{m}) = 2.1 \mu\text{eV}$, $U_p(0, 25 \mu\text{m}, 40 \mu\text{m}) = 0.99 \text{ eV}$ 이다. 폰더르모티브 에너지의 이미지 그림 12는 포텐셜 이미지 그림 10(a)에 비교해 공간적으로 대비가 분명하다.

2.4 Task 4 (Level 3): Challenge Trap Design

이번 트랩 디자인의 제한사항은 그림 13(a)과 같이 요약 될 수 있다. 또한 안정성 변수 $q_{y,z}$ 는

$$q_{y,z} = \frac{2eV_{RF}}{mr_0^2\Omega^2} \quad (9)$$

과 같이 정의되고, $0.1 < q_{y,z} < 0.3$ 의 값으로 제한된다.

먼저 전극의 기하학적 구조를 디자인 했다. 두 개의 이온 스트링을 정해진 범위에서 트랩하는 전극을 만들었다. 이 때, 전극의 폭과 높이, 이온 사이 간격을 고려해 N.A.가 0.1 보다 크도록 디자인했다. 마지막으로 전극의 포텐셜과 진동수를 조절해, 안정성 변수가 0.1에서 0.3 사이에 맞도록 조절했다.

그림 13(b)과 같이 전극 3개를 이용해서, 두 개의 이온 스트링을 트랩하도록 디자인했다. 전극을 3개를 사용하고, 모든 전극은 $z = 0$ 면에 있다. 맨 왼쪽부터 첫번째 전극은 $-180 \mu\text{m} < y < -85 \mu\text{m}$ 에서 정의되고, 두번째 전극은 $-16 \mu\text{m} < y < 16 \mu\text{m}$ 에서 정의되고, 세번째 전극은 $85 \mu\text{m} < y < 180 \mu\text{m}$ 에서 정의된다.

왼쪽의 이온 스트링은 가까이 있는 첫번째 전극이 왼쪽 전극의 역할을 하고, 멀리 있는 두번째와 세번째 전극이 같이 기여해 오른쪽 전극의 역할을 하도록 의도했다. 반대로, 오른쪽 이온 스트링은 첫번째와 두번째 전극이 같이 왼쪽 전극으로 기여를하고, 세번째 전극이 오른쪽 전극의 역할을 하도록 디자인했다. 그래서, 각각 두 위치에서 안장점을 생성할 수 있게한다. 정성적으로 설명하면, 두번째 전극이 만드는 포텐셜이 중심부터 좌우로 밀어내는데 기여하게 되고, 두번째 전극의 선폭이 안장점 y 방향 위치에 기여한다. 즉, 이온 스트링 사이의 최소 거리는 두번째 전극의 폭에 영향을 받는다. 그리고,

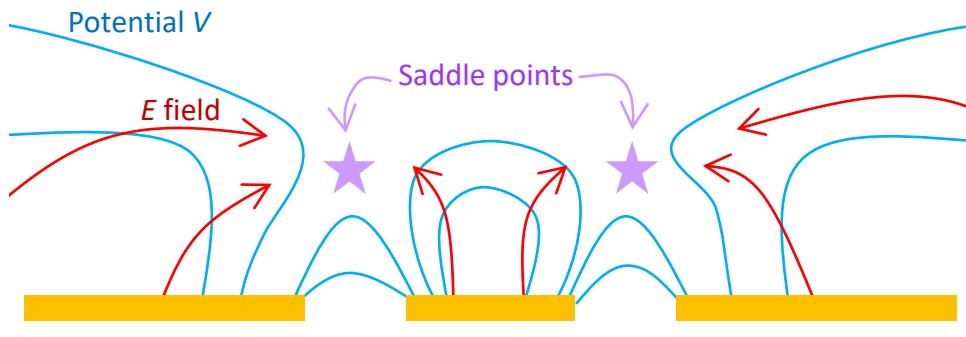
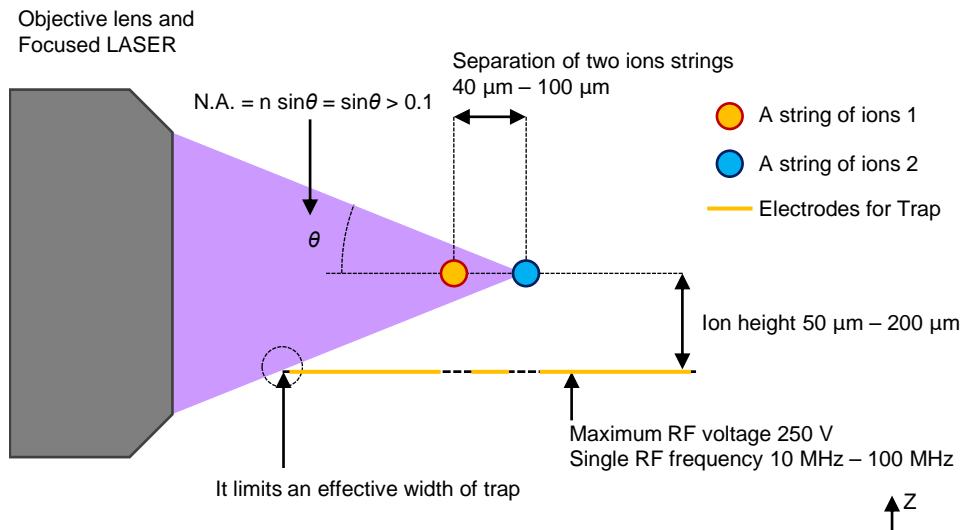


Figure 13: 트랩 디자인 도전과제

1,2번 전극과 2,3번 전극이 만드는 포텐셜은 위쪽으로 튀어나와 안장점을 만드는데 기여한다. 이는 두 이온의 높이가 정해지는데 관여 될 수 있다. 마지막으로, 1,3번 전극의 바깥쪽에서 안쪽으로 포텐셜을 만들어, 이온 간격과 높이에 기여할 수 있다. 이 1,3번 전극이 너무 길면 렌즈 등의 광학계를 위치하는데 제한사항이 생겨, 주의해야한다.

이 전극을 이용해 그린 트랩의 포텐셜과 폰더르모티브 에너지는 그림 14와 같다. 그 결과, 이온 높이 $z = 67 \mu\text{m}$ 에서 두 이온은 각각 $y = \pm 31 \mu\text{m}$ 에 트랩되어 이온 사이의 간격 62 μm 인 트랩을 실현했다. 이 트랩에서는 전극의 전압은 $V_{RF} = 140 \text{ V}$, 각진동수는 $\Omega = 2\pi \times 33 \text{ MHz}$ 이 사용되었다. 결과적으로 최대 N.A. = $\sin\theta \simeq \frac{67 \mu\text{m}}{\sqrt{(67 \mu\text{m})^2 + (180 \mu\text{m} + 31 \mu\text{m})^2}} = 0.30$ 의 광학계를 사용할 수 있고, 안정성 변수 $q_{y,z} \simeq \frac{2e(140 \text{ V})}{\frac{171 \times 931.5 \text{ MeV}}{(2.998 \times 10^8 \text{ m/s})^2} (2 \times 67 \mu\text{m})^2 (2\pi \times 33 \text{ MHz})^2} = 0.20$ 이다. 이를 정리하면 표 3와 같다.

우리가 이온 트랩을 디자인 할 때, 여러가지 선택사항이 있다. 이번 문제에서는 표면 트랩에 관해서 계산을 했지만, 이온의 종류, DC 제어, 레이저를 비추는 것, 이온의 이미지, 공정 등을 고려할 수 있다. 예를 들어, 우리가 어떤 이온을 고르는지에 따라 $^{171}\text{Yb}^+$ 와 같이 초미세구조(hyperfine) 구조를 이용한

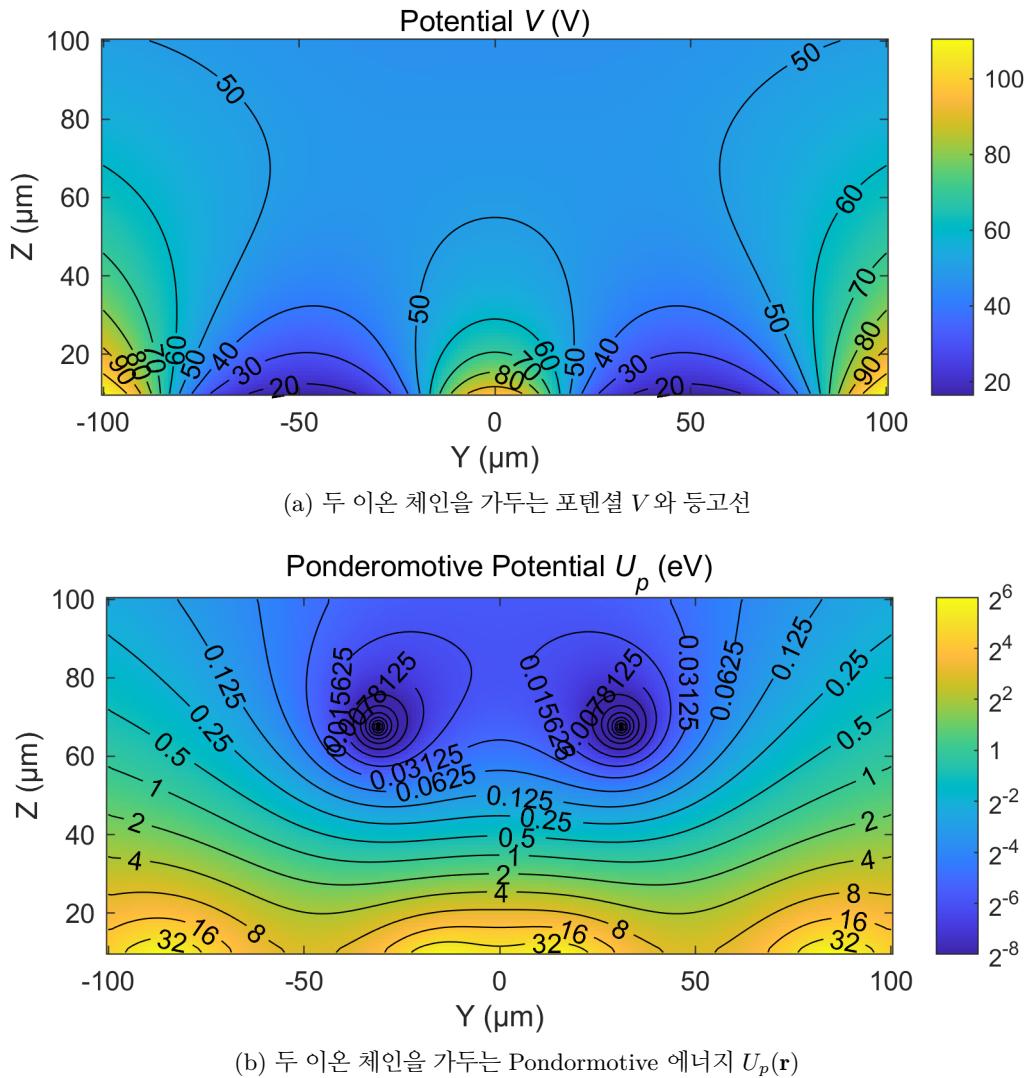


Figure 14: 두 이온 체인을 가두는 트랩의 포텐셜과 Pondormotive 에너지

Electrodes 1	$(-180 \mu\text{m}, -85 \mu\text{m})$	이온 사이 간격	$62 \mu\text{m}$	전압 V_{RF}	140 V
Electrodes 2	$(-16 \mu\text{m}, 16 \mu\text{m})$	이온 높이	$67 \mu\text{m}$	각진동수 Ω	$2\pi \times 33 \text{ MHz}$
Electrodes 3	$(85 \mu\text{m}, 180 \mu\text{m})$	최대 N.A.	0.3	안정성 $q_{y,z}$	0.2

Table 3: 두 이온체인을 만드는 트랩 디자인

큐벳을 이용할 수 도 있고, $^{40}\text{Ca}^+$ 와 같은 4극자 전이를 이용한 광학(optical) 큐벳을 이용할 수 도 있다. 어떤 큐벳을 이용하게 되던지, 양자연산을 위한 조건을 만족해야 한다 [13]. 고르는 이온의 종류에 따라 레이저의 파장을 바꿔야 하고, 큐벳 제어에 사용하는 마이크로파 대역을 바꿔야한다. 표면 트랩의 경우 이온의 종류에 따라 질량이 달라지기 때문에, 안정성을 위해 RF 의 진동수를 수정할 소요가 있고, 디자인에 수정이 필요하다. 표면 트랩과 동시에 DC 전극을 이용해야 한다. DC 전극은 이온간의 위치 조절에 사용되고, 이를 통해 양자 얹힘이 구현 된다. 실제 디자인에서는 DC 전극 배치를 고려한 최적화 가 필요하다. 표면에 트랩과 전극을 배치할 때, 트랩이 위치한 회로가 너무 크지 않도록 주의해야한다. 그림 13(a)과 같이 옆에서 광학 렌즈를 접근 시킬 경우, 트랩이 있는 회로기판이 광 경로와 닿게 되지 않도록 디자인 되어야한다. 광경로와 회로가 겹치게 되면, 광학적 측정의 신호를 줄어들게 해 높은 신호대잡음비를 제한하며, 또한 반사된 빛이 광학적으로, 혹은 산란에 의해 열적으로 시스템에 간섭할 수 있다. 일반적으로 이온이 $\text{sub-}\mu\text{m}$ 수준 떨어져 있고, 이를 이미징 하기 위해서는 충분히 큰 N.A.의 광학계가 필요하게 된다. 이는 표면 트랩 위에서 접근하는게 가장 유리하고, 옆에서 접근한다면 기판 디자인과 조율이 필요하다. 우리가 μm 보다 충분히 큰 스케일에서는 PCB 를 통해 기판을 제작하기 쉽지만, $\sim \mu\text{m}$ 수준의 기판이라면 광학적인 식각이나 화학 증착법을 통한 얇은 선폭과 균일한 표면을 가지는 트랩 제작이 필요할 수 있다. 이렇게 제작 회로에서 RF 파워가 얼마나 전달 되고, 손실 및 반사 되는지 등을 임피던스를 맞춰 최적화 할 필요가 있다. 단순히 표면 트랩을 살펴봤지만, 실제 설계에서는 위와같은 점을 고려하여 설계하는 부분이 필요할 것임을 생각 해볼 수 있다.

3 Simulating Hubbard Model with Quantum Computers

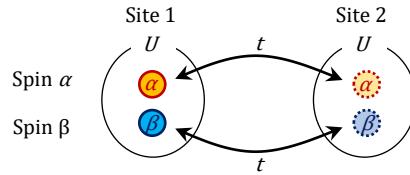


Figure 15: Hubbard 모델을 간단하게 나타낸 개념도

이 문제에서는 그림 15과 같은 Hubbard [14] 모델을 양자 계산을 이용해 전산모사(simulate)한다. 생성, 소멸연산자로 나타낸 해밀토니안을 양자컴퓨터를 이용한 계산으로 풀기 위해 큐빗 공간의 해밀토니안으로 변환한다. Hubbard 모델의 해밀토니안은

$$\hat{H} = -t \left(\hat{a}_{1\alpha}^\dagger \hat{a}_{2\alpha} + \hat{a}_{2\alpha}^\dagger \hat{a}_{1\alpha} + \hat{a}_{1\beta}^\dagger \hat{a}_{2\beta} + \hat{a}_{2\beta}^\dagger \hat{a}_{1\beta} \right) + U \left(\hat{a}_{1\alpha}^\dagger \hat{a}_{1\alpha} \hat{a}_{1\beta}^\dagger \hat{a}_{1\beta} + \hat{a}_{2\alpha}^\dagger \hat{a}_{2\alpha} \hat{a}_{2\beta}^\dagger \hat{a}_{2\beta} \right) \quad (10)$$

과 같고, \hat{a}^\dagger, \hat{a} 연산자는 생성 소멸 연산자이다. 두개의 장소 1과 장소 2가 있고, α, β 는 전자의 스플에 해당한다. 같은 스플끼리는 장소 사이에서 뛰어넘기를 할 수 있고, 이 때의 에너지를 호평 에너지 t 라고 나타낸다. 그리고, 같은 장소에 다른 스플 두 개가 있는 경우 쿨롱 상호작용에 의해 에너지가 존재하고 이를 U 라고 나타낸다. 이 오비탈의 순서는 $1\alpha, 2\alpha, 1\beta, 2\beta$ 이다.

이 문제를 풀기위해 다음의 코드들을 이용하였다. IonQ 시뮬레이터와 하드웨어를 실행하기 위해 ‘Appendix_3_Qiskit.ipynb’와 ‘Appendix_3_Reduced_Qiskit.ipynb’을 사용하였고, 회로 구성 및 데이터 분석을 위해 ‘Appendix_3_Mathematica.nb’을 이용하였다.

3.1 Task 1 (Level 1)

Jordan-Wigner Transformation(JWT)를 이용해 큐빗 해밀토니안으로 변환한다 [15, 16]. JWT를 이용해 생성, 소멸연산자를 큐빗의 파울리 연산자로 변환해주면

$$\begin{aligned} \hat{a}_{1\alpha} &= \hat{\sigma}_{1\alpha}^+ \\ \hat{a}_{2\alpha} &= \hat{\sigma}_{1\alpha}^z \otimes \hat{\sigma}_{2\alpha}^+ \\ \hat{a}_{1\beta} &= \hat{\sigma}_{1\alpha}^z \otimes \hat{\sigma}_{2\alpha}^z \otimes \hat{\sigma}_{1\beta}^+ \\ \hat{a}_{2\beta} &= \hat{\sigma}_{1\alpha}^z \otimes \hat{\sigma}_{1\beta}^z \otimes \hat{\sigma}_{2\alpha}^z \otimes \hat{\sigma}_{2\beta}^+ \end{aligned} \quad (11)$$

과 같고, $\hat{\sigma}_i^{x,y,z}$ 는 각각 오비탈 i 에 해당하는 큐벳의 x, y, z 파울리 연산자이다. 이 JWT 변환을 Hubbard 해밀토니안 수식 10에 대입하여 정리하면

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -t \left(\frac{\hat{\sigma}_{1\alpha}^x \hat{\sigma}_{2\alpha}^x + \hat{\sigma}_{1\alpha}^y \hat{\sigma}_{2\alpha}^y}{2} + \frac{\hat{\sigma}_{1\beta}^x \hat{\sigma}_{2\beta}^x + \hat{\sigma}_{1\beta}^y \hat{\sigma}_{2\beta}^y}{2} \right) \\ & + U \left(\frac{1 + \hat{\sigma}_{1\alpha}^z \hat{\sigma}_{1\beta}^z - \hat{\sigma}_{1\alpha}^z - \hat{\sigma}_{1\beta}^z}{4} + \frac{1 + \hat{\sigma}_{2\alpha}^z \hat{\sigma}_{2\beta}^z - \hat{\sigma}_{2\alpha}^z - \hat{\sigma}_{2\beta}^z}{4} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

과 같다.

3.2 Task 2 (Level 1)

기존의 해밀토니안 수식 10이 가지고 있던 보존량이 JWT으로 변환된 해밀토니안 수식 12에서도 유지된다. 보존량들은 각각의 스플과 전체 오비탈의 차 있는 개수이다. 이 성질에 의해 해밀토니안은 각각의 스플의 파울리 z 연산자의 합과 전체 파울리 z 연산자의 합과 교환법칙을 성립한다. 식으로 표현하면

$$[\hat{H}, \hat{S}_\alpha^z] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{S}_\beta^z] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{S}^z] = 0, \quad (13)$$

$$\hat{S}_\alpha^z := \hat{\sigma}_{1\alpha}^z + \hat{\sigma}_{2\alpha}^z, \quad \hat{S}_\beta^z := \hat{\sigma}_{1\beta}^z + \hat{\sigma}_{2\beta}^z, \quad \hat{S}^z := \hat{S}_\alpha^z + \hat{S}_\beta^z. \quad (14)$$

이다. 수식 13을 이용하여 분리한 각각의 힐버트 공간에서 해밀토니안들의 고유값과 고유상태들을 구하면 표 4와 같다.

$(s; s_\alpha s_\beta)$	Eigenvalues	Eigenvectors
(0;00)	0	$ 0000\rangle$
(1;01)	$\pm t$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(0001\rangle \mp 0010\rangle)$
(1;10)	$\pm t$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(0100\rangle \mp 1000\rangle)$
(2;02)	0	$ 0011\rangle$
(2;11)	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1001\rangle - 0110\rangle)$
	U	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1010\rangle - 0101\rangle)$
	$\frac{U \pm \sqrt{U^2 + 16t^2}}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2+2\kappa_\pm^2}} (0101\rangle + 1010\rangle + \kappa_\pm 0110\rangle + \kappa_\pm 1001\rangle)$
(2;20)	0	$ 1100\rangle$
(3;12)	$U \pm t$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(0111\rangle \mp 1011\rangle)$
(3;21)	$U \pm t$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1101\rangle \mp 1110\rangle)$
(4;22)	$2U$	$ 1111\rangle$

Table 4: Hubbard 해밀토니안의 고유값과 고유상태

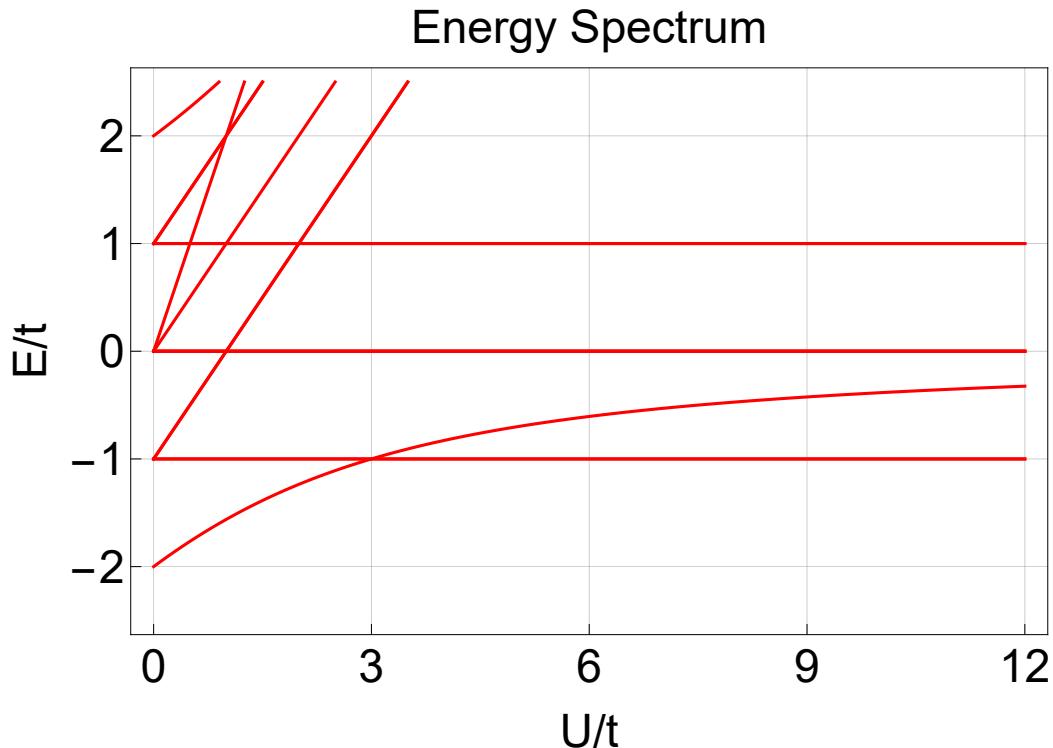


Figure 16: 주어진 해밀토니안의 바닥 에너지 근처에서 구한 U/t 에 대한 에너지 스펙트럼

여기서 s, s_α, s_β 는 순서대로 $\hat{S}^z, \hat{S}_\alpha^z, \hat{S}_\beta^z$ 의 고유값이고

$$\kappa_\pm := \frac{1}{4t} \left(U \mp \sqrt{16t^2 + U^2} \right) \quad (15)$$

이다.

그림 16은 바닥 에너지 근처에서의 U/t 에 대한 고유에너지를 나타낸다. 그림 16을 보면 $U = 3t$ 에서 바닥 상태의 특성이 달라지는 것을 확인할 수 있다. 절대온도 0에서의 바닥 상태를 밀도 연산자 $\hat{\rho}$ 로 나타내면

$$\hat{\rho} = \begin{cases} (U < 3t), & |\psi_-^{11}\rangle \langle \psi_-^{11}| \\ (U = 3t), & \frac{1}{3} [|\psi_-^{11}\rangle \langle \psi_-^{11}| + |\psi_-^{01}\rangle \langle \psi_-^{01}| + |\psi_-^{10}\rangle \langle \psi_-^{10}|] \\ (U > 3t), & \frac{1}{2} [|\psi_-^{01}\rangle \langle \psi_-^{01}| + |\psi_-^{10}\rangle \langle \psi_-^{10}|] \end{cases} \quad (16)$$

과 같다. 여기서 $|\psi_-^{11}\rangle$ 는 $(s; s_\alpha s_\beta) = (2; 11)$ 에서 고유에너지 $\frac{U-\sqrt{U^2+16t^2}}{2}$ 의 고유상태이고, $|\psi_-^{01}\rangle$ 과 $|\psi_-^{10}\rangle$ 은 각각 $(1; 01)$ 와 $(1; 10)$ 에서 고유에너지 $-t$ 의 고유상태이다.

바닥상태의 물리적 의미는 오비탈의 차 있는 수의 기댓값 (total occupation number)으로 분석한다.

오비탈 전체에 차 있는 수의 기댓값과 각각의 오비탈에 차 있는 수의 기댓값은

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \begin{cases} (U < 3t), 2 \\ (U = 3t), \frac{4}{3} \\ (U > 3t), 1 \end{cases}, \quad \langle \hat{\sigma}_{1\alpha}^z \rangle = \langle \hat{\sigma}_{2\alpha}^z \rangle = \langle \hat{\sigma}_{1\beta}^z \rangle = \langle \hat{\sigma}_{2\beta}^z \rangle = \begin{cases} (U < 3t), \frac{1}{2} \\ (U = 3t), \frac{1}{3} \\ (U > 3t), \frac{1}{4} \end{cases} \quad (17)$$

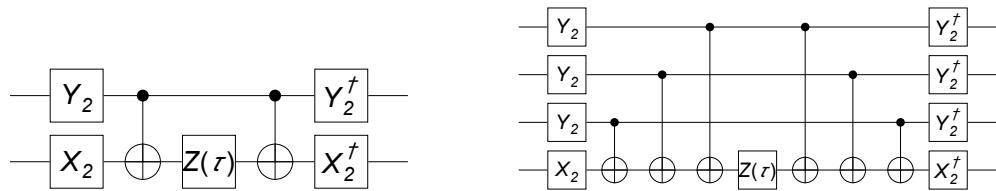
이다. 상호작용 에너지 U 가 커짐에 따라 $U = 3t$ 를 기준으로 전체 오비탈에 차 있는 수는 2개에서 1개로 줄어든다. 이는 다른 스플이 같은 위치에 존재하는 전자들의 상호작용이 커져서 하나만 존재할 때 안정한 상태를 유지하기 때문에 일어나는 현상이다. 또한 해밀토니안에서 위치 1과 2가 구분이 되지 않고 스플 α 와 β 도 구분이 되지 않는 성질이 바닥상태에서도 유지해서 모든 오비탈에서의 차 있는 수가 동일하다.

3.3 Task 3 (Level 2)

파울리 행렬의 텐서 곱 형태의 단일항을 지수승으로 가지는 모든 유니터리 연산자는 각각의 파울리 행렬의 고유상태를 기저로 하는 전체 홀짝성 (parity)에 따라 위상이 반대로 가진다는 성질을 이용하면

$$\left\{ \text{CNOT}, R_x \left(\pm \frac{\pi}{2} \right), R_y \left(\pm \frac{\pi}{2} \right), R_z(\theta) \right\} \quad (18)$$

의 게이트 집합들로 간단하게 분해할 수 있다. 문제에서 주어진 시간 변화 연산자 $\exp[-i\tau \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^y]$ 와 $\exp[-i\tau \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_3^x \hat{\sigma}_4^y]$ 는 각각 그림 17(a)와 17(b)의 회로로 나타내어진다.



(a) 양자회로로 구현한 $\exp[-i\tau \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^y]$ 시간변화 연산자. 위에서부터 1,2번 큐빗이다.
 (b) 양자회로로 구현한 $\exp[-i\tau \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_3^x \hat{\sigma}_4^y]$ 시간변화 연산자. 위에서부터 1,2,3,4번 큐빗이다.

Figure 17: 임의의 시간 τ 에 대한 시간변화 연산자 회로 디자인

여기서 17(a)는 위에서부터 1,2 번 큐빗이고 17(b)는 위에서부터 1,2,3,4 번 큐빗이다. 회로에 사용한

게이트를 문제 1.1의 수식 1의 단일 큐빗 회전 게이트 형태로 표현하면

$$\begin{aligned} X_2 &:= R_x \left(\frac{\pi}{2} \right), & X_2^\dagger &:= R_x \left(-\frac{\pi}{2} \right), \\ Y_2 &:= R_y \left(\frac{\pi}{2} \right), & Y_2^\dagger &:= R_y \left(-\frac{\pi}{2} \right), \\ Z(\tau) &:= R_z(-2\tau) \end{aligned} \quad (19)$$

와 같다.

3.4 Task 4 (Level 2)

1차 Trotter 근사한 시간 변화 연산자(time evolution operator)는

$$e^{-i\phi(\hat{\sigma}_{1\alpha}^z \hat{\sigma}_{1\beta}^z + \hat{\sigma}_{2\alpha}^z \hat{\sigma}_{2\beta}^z - \hat{\sigma}_{1\alpha}^z - \hat{\sigma}_{2\alpha}^z - \hat{\sigma}_{1\beta}^z - \hat{\sigma}_{2\beta}^z)} e^{i\theta(\hat{\sigma}_{1\alpha}^y \hat{\sigma}_{2\alpha}^y + \hat{\sigma}_{1\beta}^y \hat{\sigma}_{2\beta}^y)} e^{i\theta(\hat{\sigma}_{1\alpha}^x \hat{\sigma}_{2\alpha}^x + \hat{\sigma}_{1\beta}^x \hat{\sigma}_{2\beta}^x)} \quad (20)$$

이다 [17, 18]. 여기서

$$\theta := \frac{t\tau}{2}, \quad \phi := \frac{U\tau}{4} \quad (21)$$

이다. 각각의 동일한 지수승에 존재하는 파울리 연산자들의 텐서곱 연산자끼리는 교환법칙이 성립한다. 또한 둘째항과 셋째항끼리도 교환법칙이 성립한다. 3.3에서 사용했던 방식을 이용하여 수식 20을 회로로 나타내면 그림 18이 된다. 여기서 X_2 , X_2^\dagger , Y_2 , Y_2^\dagger 는 수식 19와 동일하고 나머지 게이트들을

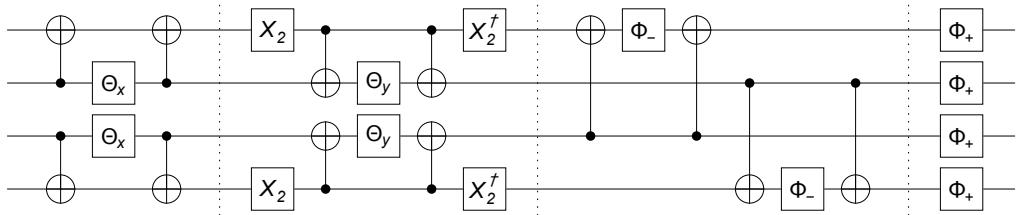


Figure 18: 1차 Trotter 근사한 시간 변화 연산자를 구현한 양자 회로

수식 1의 단일 큐빗 회전 게이트 형태로 표현하면

$$\Theta_x := R_x(-t\tau), \quad \Theta_y := R_y(-t\tau), \quad \Phi_{\pm} := R_z \left(\mp \frac{U\tau}{2} \right) \quad (22)$$

와 같다. 회로는 세 개의 구간으로 분리하여 그렸다. 각각의 구간을 연산자로 나타내면 왼쪽부터 순서대로 수식 20의 세번째 지수연산자, 두번째 지수연산자 그리고 첫번째 지수연산자에 해당된다.

3.5 Task 5 (Level 2)

$U = 0$ 인 조건에서 수식 20은

$$e^{i\theta(\hat{\sigma}_{1\alpha}^y \hat{\sigma}_{2\alpha}^y + \hat{\sigma}_{1\beta}^y \hat{\sigma}_{2\beta}^y)} e^{i\theta(\hat{\sigma}_{1\alpha}^x \hat{\sigma}_{2\alpha}^x + \hat{\sigma}_{1\beta}^x \hat{\sigma}_{2\beta}^x)} \quad (23)$$

으로 간단하게 된다. 그림 19(a)은 초기 상태를

$$|\psi(0)\rangle = |0101\rangle \quad (24)$$

으로 준비하고 여러 τ 의 값들에 대하여 오비탈의 차있는 수(occupation number)의 평균값을 그린 그래프이다. 시간에 따른 상태가

$$|\psi(\tau)\rangle = \cos^2(t\tau)|0101\rangle - \sin^2(t\tau)|1010\rangle - \frac{1}{2}\sin(2t\tau)[|0110\rangle + |1001\rangle] \quad (25)$$

이고 각각의 오비탈에 대한 차있는 수의 평균값 $n_{1\alpha}, n_{2\alpha}, n_{1\beta}, n_{2\beta}$ 은

$$n_{1\alpha} = n_{1\beta} = \sin^2(t\tau), \quad n_{2\alpha} = n_{2\beta} = \cos^2(t\tau) \quad (26)$$

이기 때문에 호평 에너지 t 를 이용하여 무차원 시간 $\frac{t\tau}{2\pi}$ 으로 축척을 바꾸어 살펴보았다. 그래프에서 검은선은 해밀토니안에 대한 정확한 시간연산자를 이용하여 구한 기댓값이다. 빨간점은 시간을 등분하지 않은 trotter 1차 근사 수식 23을 이용하여 시뮬레이터를 통해 구한 기댓값이고 파란점은 같은 방식으로 IonQ 하드웨어(qpu)를 통해 구한 기댓값이다. 여기서 데이터 하나당 200번 실행하였다. 수식 23의 두 지수항이 교환법칙을 성립하기 때문에 시간 연산자의 1차 trotter 근사는 정확한 시간 연산자와 동일하다. 이 때문에 정확하게 구한 기댓값과 회로로 구한 기댓값이 일치하게 된다.

우리가 회로에 사용한 CNOT 게이트는 총 8개이다. 이는 문제 1.1에서 사용한 CNOT 게이트 수 13개보다 적기 때문에 여기서 구한 결과는 오차가 더 적을 것을 예상했다. 실제 IonQ 하드웨어 결과는 그림 19(a)을 통해 시뮬레이터 결과와 유사한 것을 확인할 수 있었다.

3.6 Task 6 (Level 3)

그림 19은 문제 3.5와 동일한 초기 조건에서 다양한 상호작용 에너지 U 에 대하여 그린 오비탈들의 차있는 수 기댓값이다. 19(b)부터 19(f)의 빨간점과 파란점은 시간을 4등분한 1차 trotter 근사 회로를 각각 시뮬레이터와 IonQ 하드웨어(qpu)로 실행하여 구한 기댓값이다. 19(b)는 $U = 0.5t$, 19(c)는

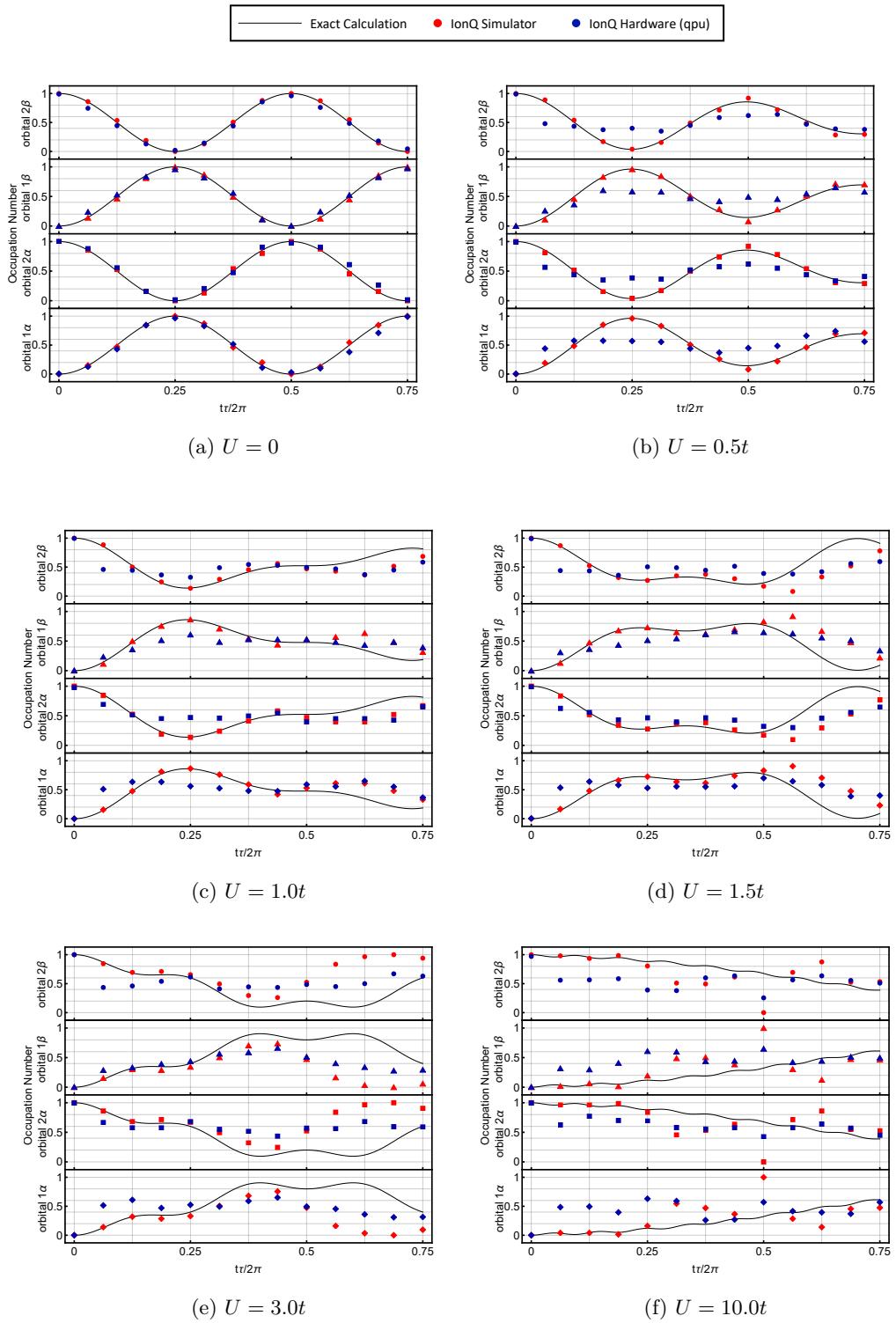


Figure 19: 초기 상태 $|0101\rangle$ 일 때 1α , 2α , 1β , 2β 오비탈에서의 차있는 수의 기댓값을 흐핑 에너지 t 로 재축척한 무차원 시간에 대하여 그린 그래프. 상호작용 에너지 U 는 (a)부터 (f)의 순서대로 0 , $0.5t$, $1.0t$, $1.5t$, $3.0t$, $10.0t$ 이다. 검은 실선은 헤밀토니안에 대한 정확한 시간 연산자로 구한 기댓값이다. 빨간점과 파란점은 1차 trotter 근사한 시간 연산자의 회로를 각각 시뮬레이터와 IonQ 하드웨어(qpu)로 실행하여 구한 기댓값이다. (a)는 시간을 등분하지 않고, (b)부터 (f)는 시간을 4등분하여 ($N = 4$) 구했다.

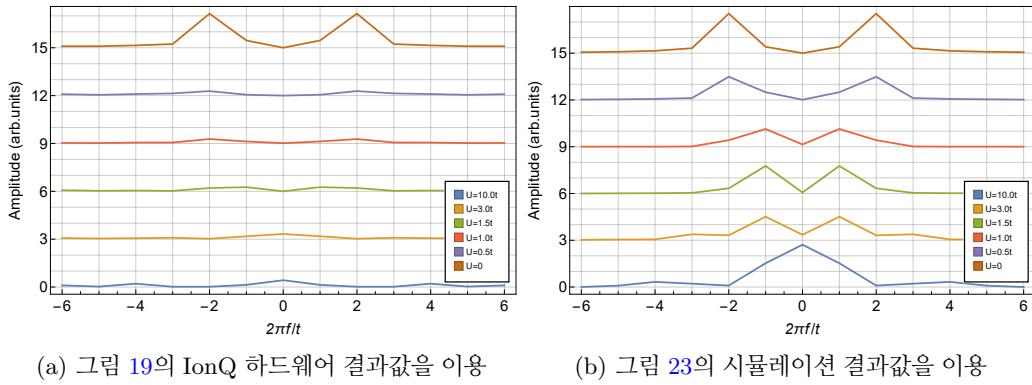


Figure 20: 진동수 공간에서 나타낸 위치 2에 차 있는 수의 기댓값의 그래프. 위에서부터 $U = 0, 0.5t, 1.0t, 1.5t, 3.0t, 10.0t$ 를 순서대로 3의 간격을 가지고 그렸다.

$U = 1.0t$, 19(d)는 $U = 1.5t$, 19(e)는 $U = 3.0t$, 19(f)는 $U = 10.0t$ 이다.

먼저 1차 trotter 근사에 의한 오차부터 분석한다. 1차 trotter 근사는

$$\frac{tU\tau^2}{N} \ll 1 \quad (27)$$

일 때 성립한다 [17]. 따라서 상호작용 에너지 U 의 크기가 커짐에 따라 시뮬레이터를 통해 구한 기댓값이 정확한 기댓값과 일치하는 시간 영역이 짧아진다. 19(a)와 19(b)에서는 전체 시간 영역에서 기댓값이 유사하지만, 19(c)와 19(d)는 $t\tau/2\pi = \frac{9}{16}$, 19(e)와 19(f)는 $t\tau/2\pi = \frac{5}{16}$ 이후부터 기댓값에 차이가 생기기 시작한다.

Trotter 근사에 의한 오차 뿐만 아니라 IonQ 하드웨어에서 구한 기댓값을 보면 추가적인 오차가 크게 발생한다. 여기서 사용한 회로는 4등분한 1차 trotter 근사된 시간 연산자를 나타내는 회로로써 그림 18의 회로의 τ 를 $\tau/4$ 로 바꾸고 4번 반복한 회로이다. 따라서 회로에 사용한 CNOT 게이트는 총 48개이다. 이는 문제 1.1에서 사용한 CNOT 게이트 수 13개보다 많다. 그림 19(b) - 19(f)의 빨간점과 파란점을 확인하면 기댓값이 대부분 시간 영역에서 오차가 지속적으로 발생하는 것을 확인할 수 있다.

그림 20(a)와 20(b) (풀이 3.6.1 참조)는 각각 그림 19의 IonQ 하드웨어와 그림 23의 시뮬레이션의 위치 2에 차 있는 수의 기댓값을 푸리에 변환을 통해 진동수 공간에서 나타낸 그래프이다. 푸리에 변환을 할 때 기댓값의 기준점을 1로 잡았다. 그림 20(b)를 통해 $U = 1.0t$ 에서 기댓값이 가장 큰 진동수 $\frac{2\pi f}{t} = 2$ 가 급격하게 작아지고, 상호작용의 세기가 더 커질수록 기댓값이 가장 큰 진동수가 0으로 근접하는 것을 확인할 수 있다. 따라서 우리는 전이의 주기가 급격하게 바뀌게 하는 임계 U_c 를

$$U_c = 1.0t \quad (28)$$

으로 잡는다. 같은 방법으로 그림 20(a)를 통해서는 전이의 주기가 급격하게 바뀌게 하는 상호작용

세기가 $0.5t$ 가 되는 것을 볼 수 있다. 하지만 이 값은 게이트들에 의한 오차와 trotter 근사에 의해서 나오는 오차가 크게 발생하여 얻은 결과이다.

3.6.1 Advanced Analysis

임계 U_c 값을 찾기에는 유효한 기댓값을 주는 시간 영역이 너무 짧다. 따라서 이를 해결하기 위해서 전체 힐버트 공간에서의 해밀토니안으로 분석하지 않고 보존량을 이용하여 표 4 $(s; s_\alpha, s_\beta) = (2; 11)$ 의 부분 공간을 살펴본다. 기저를

$$\{|0101\rangle, |0110\rangle, |1001\rangle, |1010\rangle\} \quad (29)$$

으로 선택했을 때, 부분 공간에서의 해밀토니안

$$H_r = \begin{pmatrix} U & -t & -t & 0 \\ -t & 0 & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & -t \\ 0 & -t & -t & U \end{pmatrix} \quad (30)$$

이다. e^{-iH_rt} 의 1차 trotter 근사를 행렬 형태로 가지는 회로는 그림 21이다. 여기서

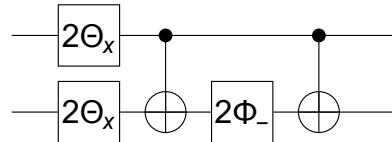


Figure 21: 초기상태 $|0101\rangle$ 이 존재하는 부분 공간에서 나타낸 줄어든 해밀토니안에 대한 시간 연산자를 1차 trotter 근사하여 나타낸 회로.

$$2\Theta_x := R_x(-2t\tau), \quad 2\Phi_- := R_z(U\tau) \quad (31)$$

이다.

IonQ 하드웨어의 결과를 보기 전에 우리는 물리적 의미를 가지는 임계 U_c 를 찾아보았다. 그림 22는 부분 공간에서 고유에너지들을 상호작용 에너지에 대하여 그린 그래프이다. 여기서 그래프의 색깔은 초기상태 $|0101\rangle$ 가 해당 고유 에너지의 상태에 존재하는 확률을 나타낸다. 빨간색에 가까울수록 확률이

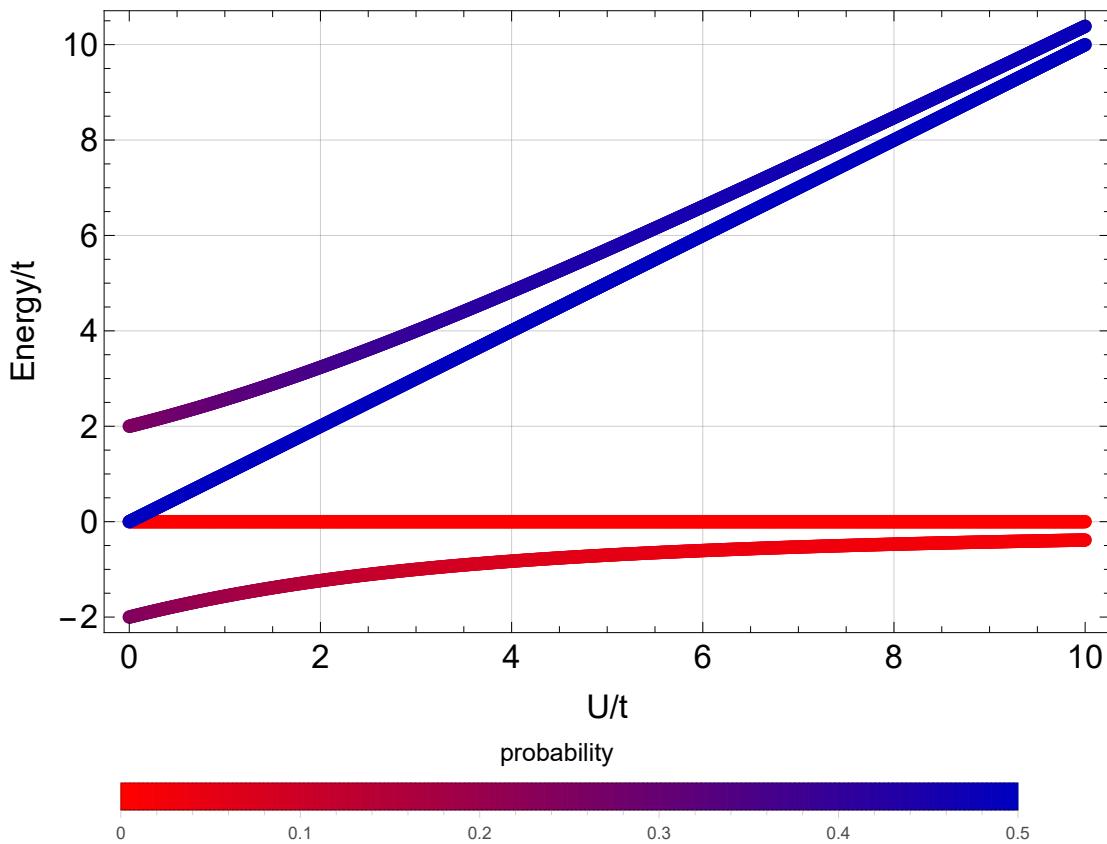


Figure 22: 상호작용 에너지에 대하여 부분 공간의 고유에너지를 그린 그래프. 여기서 색깔은 해당 고유 에너지에 초기상태 $|0101\rangle$ 가 존재하는 확률을 나타낸다. 빨간색에서 파란색의 그라데이션은 $[0, \frac{1}{2}]$ 의 확률을 의미한다.

0이고 파랑색에 가까울수록 확률이 $\frac{1}{2}$ 이다. 상호작용 에너지 U 가 없을 때는 가장 낮은 고유에너지

$$\frac{U - \sqrt{U^2 + 16t^2}}{2} = -2t \quad (32)$$

의 상태가 $\frac{1}{4}$ 의 확률로 존재한다. 반면에 상호작용 에너지가 커질수록 이 상태는 확률이 0으로 수렴한다.

따라서 상호작용 에너지가 큰 영역에서 시간 변화는 큰 것 부터 차례대로 두 개의 고유 에너지

$$\frac{U + \sqrt{U^2 + 16t^2}}{2}, \quad U \quad (33)$$

의 상태에 의해 이루어진다. 이 두 에너지의 차는 $U \gg t$ 에서

$$\frac{1}{2} \left(\sqrt{U^2 + 16t^2} - U \right) \approx \frac{4t^2}{U} \quad (34)$$

으로 근사 된다.

위에서 언급한 특성에 의해 위치 1에 놓여 있던 초기상태 $|0101\rangle$ 가 다른 위치로 전이되는데 걸리는 시간은 상호작용의 세기에 따라 달라지게 된다. 약한 상호작용에서 전이되는데 걸리는 시간은 $\frac{1}{t}$ 의

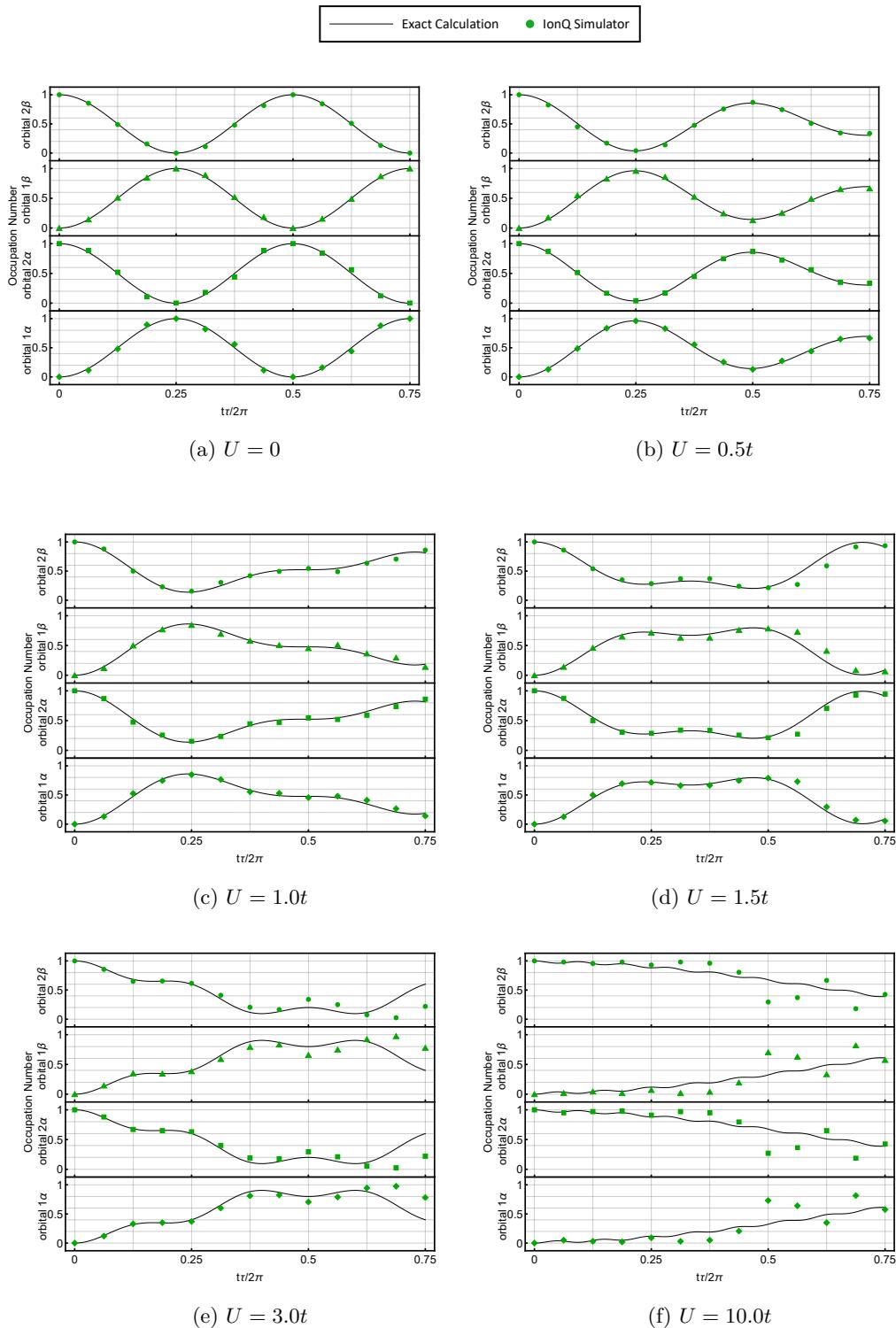


Figure 23: 7등분($N = 7$)한 그림 21 회로를 이용하여 그림 19에서 사용한 동일한 조건으로 얻은 결과. 여기서 초록점은 시뮬레이터로 실행하여 구한 기댓값이다.

축척을 가지고, 강한 상호작용에서는 $\frac{U}{4t^2}$ 의 축척을 가진다. 이렇게 시간의 축척은 상호작용 에너지의 크기에 따라 바뀌게 된다. 따라서 우리는 임계 U_c 를 해당 축척이 급격하게 바뀌는 에너지의 세기로 정하였다.

본 실험에서 7등분($N = 7$) 한 1차 trotter 근사된 시간 연산자 회로를 사용했고, 동일한 조건을 가지는 실험에 대해서 각각 200번(counts=200)씩 반복하였다. 그림 23는 각각 오비탈에 차있는 수의 기댓값을 서로 다른 상호작용 에너지 $U = 0, 0.5t, 1.0t, 1.5t, 3.0t, 10.0t$ 에 대하여 그런 그래프이다. 여기서 검은선은 정확한 시간 연산자로 구한 기댓값, 초록점은 시뮬레이션으로 구한 기댓값이다. $U = 10.0t$ 의 결과를 제외하고 두 기댓값이 시간 전체 영역에서 유사한 것을 통해 유효한 데이터임을 확인했다.

4개의 큐빗으로 이루어진 회로에 대한 결과(그림 19)와 2개의 큐빗으로 이루어진 회로에 대한 결과(그림 23)를 비교하자. 4개의 큐빗으로 이루어진 회로는 48개의 CNOT 게이트를 이용하여 4분할된 시간 연산자를 나타낸다. 이에 비해 2개의 큐빗으로 이루어진 회로는 14개의 CNOT 게이트를 이용하여 7분할된 시간 연산자를 나타낸다. 따라서 CNOT 게이트를 적게 사용하여 더 많이 분할된 큐빗 개수가 적은 회로가 정확도를 더 높게 가지는 것을 확인하였다.

$U = 0, 0.5t, 1.0t$ (그림 23(a), 23(b), 23(c)) 일 때, 위치 2로 준비된 초기 상태가 위치 1으로 전이가 일어나는데 걸리는 시간은

$$\frac{t\tau}{2\pi} \approx \frac{1}{4} \quad (35)$$

이다. 이 때 전이는 호평 에너지에 의해 일어나기 때문에 걸리는 시간은 호평 에너지의 역수 $1/t$ 의 척도를 가지고 일어났다. 반면에 $U = 10.0t$ 에서는 우리가 설정한 시간 영역 $\frac{t\tau}{2\pi} \in [0, \frac{3}{4}]$ 에서 전이가 일어나지 않는다. 이는 상호작용 에너지 U 에 의해 에너지 차가 호평 에너지보다 커지게 되어 다른 위치로 전이가 일어나는 것을 막기 때문이다.

우리는 Hubbard 모델을 풀기 위해 JWT 변환을 이용하여 페르미온 연산자를 큐빗 연산자로 변환했다. 그리고 변환된 해밀토니안의 고유 에너지와 그에 해당하는 고유상태들을 구했다. 추가로 바닥상태에서의 물리를 살펴보았다. 시간 연산자를 1차 Trotter 근사한 후, 시뮬레이터와 IonQ 하드웨어를 통해 시간에 따른 차있는 수의 기댓값 변화를 확인했다. 마지막으로 상호작용 에너지를 바꾸어가며 기대값의 특성이 급격하게 바뀌는 임계 에너지를 확인하였다.

Appendix: Attached Files

Task	Language	File Name	Note
1	Mathematica	Appendix_1_Mathematica.nb	
1.1	Python	Appendix_1_1_Qiskit.ipynb	그림 2, 3
1.2	Python	Appendix_1_2_Qiskit.ipynb	그림 2, 3
2.1	MATLAB	Appendix_2_1_Electrodes_Mapping.m	그림 9
2.2, 2.3	MATLAB	Appendix_2_2_and_3_BiotSavart_V_E_U.m	그림 10, 12
2.2	MATLAB	Appendix_2_2_Infinite_Electrodes.m	그림 11
2.4	MATLAB	Appendix_2_4_Trap_Design_for_Two.Strings.m	그림 14
3	Mathematica	Appendix_3_Mathematica.nb	
3.5, 3.6	Python	Appendix_3_Qiskit.ipynb	그림 19
3.5, 3.6	Python	Appendix_3_Qiskit_Subspace.ipynb	그림 23

Table 5: 첨부파일 목록

첨부된 파일들은 다음 방식으로 열어보거나 실행할 수 있다.

- Mathematica: ‘*.nb’ 파일은 Mathematica 의 노트북 파일이다. Mathematica를 이용해서 형식에 맞게 읽고, 실행할 수 있다. 혹은 Wolfram player를 이용해 형식에 맞게 읽을 수 있다. 문제 1, 3의 양자 회로를 설계하고 행렬 표현을 확인할 때 사용되었다.
- Python: ‘*.ipynb’ 파일은 Python 실행 프로그램인 Jupyter의 노트북 파일이다. Jupyter 환경에서 형식에 맞게 읽고, 실행할 수 있다. 문제 1, 3의 양자 회로를 IonQ 시뮬레이터 및 하드웨어로 실행시킬 때 사용되었다.
- MATLAB: ‘*.m’ 파일은 일반적인 텍스트 에디터나 MATLAB의 에디터로 읽을 수 있다. MATLAB 을 이용해 실행할 수 있다. 문제 2의 표면 트랩의 수치계산에 사용되었다.

References

- [1] “IonQ & QCenter Quantum Challenge.” Quantum Information Research Support Center (QCenter), 2021.
- [2] M.-S. Choi, “Q3 Application.” GitHub: [Q3App](#).
- [3] M.-S. Choi, *A Quantum Computation Workbook*. Springer, GitHub: [QuantumWorkbook](#), 2022.
- [4] “IonQ Quantum Cloud.” [IonQ](#).
- [5] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, 10th anniversary ed., 2010.
- [6] J. H. Wesenberg, “Electrostatics of surface-electrode ion traps,” [arXiv:0808.1623](#), 2008.
- [7] R. F. Spivey, I. V. Inlek, Z. Jia, S. Crain, K. Sun, J. Kim, G. Vrijen, C. Fang, C. Fitzgerald, S. Kross, T. Noel, and J. Kim, “High stability cryogenic system for quantum computing with compact packaged ion traps,” [arXiv:2108.05290](#), 2021.
- [8] L. N. Egan, *Scaling quantum computers with long chains of trapped ions*. PhD thesis, University of Maryland, 2021.
- [9] M. Niedermayr, *Cryogenic surface ion traps*. PhD thesis, University of Innsbruck, 2015.
- [10] K. Wright, K. M. Beck, S. Debnath, J. M. Amini, Y. Nam, N. Grzesiak, J.-S. Chen, N. C. Pisenti, M. Chmielewski, C. Collins, K. M. Hudek, J. Mizrahi, J. D. Wong-Campos, S. Allen, J. Apisdorf, P. Solomon, M. Williams, A. M. Ducore, A. Blinov, S. M. Kreikemeier, V. Chaplin, M. Keesan, C. Monroe, and J. Kim, “Benchmarking an 11-qubit quantum computer,” [arXiv:1903.08181](#), 2019.
- [11] Allen, “Rotating Saddle.” Youtube: [Harvard Natural Sciences Lecture Demonstrations](#), 2013.
- [12] H. G. Dehmelt, “Radiofrequency spectroscopy of stored ions i: Storage,” in *Advances in atomic and molecular physics*, vol. 3, pp. 53–72, Elsevier, 1968.
- [13] D. P. DiVincenzo, “The physical implementation of quantum computation,” [arXiv:quant-ph/0002077](#), 2000.
- [14] Editorial, “The hubbard model at half a century,” *Nature Physics*, vol. 9, p. 523, 2013.
- [15] Google Quantum AI, “The Jordan-Wigner and Bravyi-Kitaev Transforms.” [Google Developers Site](#).
- [16] Azure Quantum documentation, “Jordan-Wigner Representation.” [Microsoft Docs](#).
- [17] M. Heyl, P. Hauke, and P. Zoller, “Quantum localization bounds trotter errors in digital quantum simulation,” [arXiv:1806.11123](#), 2018.
- [18] B. Şahinoğlu and R. D. Somma, “Hamiltonian simulation in the low-energy subspace,” [arXiv:2006.02660](#), 2020.

List of Figures

1	문제 1.1에서 구하라고 지시한 CCCNOT 게이트의 회로. 위에서부터 1,2 번 큐빗은 보조 큐빗, 3,4,5 큐빗은 제어 큐빗들이고 마지막 큐빗은 작동 큐빗을 나타낸다.	2
2	IonQ 하드웨어에 계산 기저의 상태들을 입력하여 나오는 각각의 상태들의 확률을 나타낸 그래프. 가로축 새로축은 각각 입력과 출력 상태의 10진법 표기법으로 나타내었다. 색깔이 주황색에 가까울수록 확률이 1에 가까워지고 하얀색에 가까워질수록 0에 가까워진다.	3
3	IonQ 하드웨어에 계산 기저의 두 상태 쌍을 간섭하여 나오는 각각의 상태들의 확률을 나타낸 그래프. 빨간 태두리와 초록 태두리의 y 축값이 간섭하는 두 상태 쌍을 10진법으로 표기한 값이다. 이를 통해 두 쌍의 상대적 위상을 구할 수 있다. 색깔이 주황색에 가까울수록 확률이 1에 가까워지고 하얀색에 가까워질수록 0에 가까워진다.	4
4	문제 1.2에서 구하라고 지시한 $R_{xx}(\pi/2)$ 을 포함한 보편적 게이트 집합을 이용하여 나타낸 CCCNOT 게이트 회로도. 1,2번 큐빗은 보조 큐빗이고, 3,4,5번 큐빗은 제어 큐빗이고 마지막 큐빗은 작동 큐빗이다.	6
5	문제 1.3에서 구하라고 지시한 각각 다른 보편적 게이트 집합을 이용하여 분해한 CCC-NOT 게이트의 회로. 위에서부터 첫번째 큐빗은 보조 큐빗, 2,3,4 큐빗은 제어 큐빗들이고 마지막 큐빗은 작동 큐빗을 나타낸다.	7
6	문제 1.4에서 구하라고 지시한 각각 다른 보편적 게이트 집합을 사용하여 분해한 CCC-CNOT 게이트의 회로. 위에서부터 1,2 큐빗은 보조 큐빗, 3,4,5,6 큐빗은 컨트롤 큐빗들이고 마지막 큐빗은 타겟 큐빗을 나타낸다.	8
7	새 개의 큐빗으로 이루어진 불연속 푸리에 변환에 사용하는 Controlled- R_2 와 Controlled- R_3 을 분해한 회로도.	9
8	문제 1.5에서 구하라고 지시한 보편적 게이트 집합으로 나타낸 유사 양자 푸리에 변환 회로. (b)의 두번째와 네번째 큐빗간에 SWAP 게이트를 사용하지 않고 아래서부터 역순으로 큐빗의 순서를 바꿈으로써 정확한 푸리에 변환 회로를 구현한다.	10
9	2.1.1와 2.1.2의 전극의 등각맵핑 도식. 참고문헌 [6]의 그림 6의 표기법을 따른다.	11
10	비오-사바르 법칙을 이용해 계산한 전기적 포텐셜과 전기장	13
11	해석적인 방법을 이용해 계산한 포텐셜 V 이미지 및 등고선	13
12	Ponderomotive 에너지 $U_p(\mathbf{r})$	17
13	트랩 디자인 도전과제	18

14	두 이온 체인을 가두는 트랩의 포텐셜과 Pondermotive 에너지	19
15	Hubbard 모델을 간단하게 나타낸 개념도	21
16	주어진 해밀토니안의 바닥 에너지 근처에서 구한 U/t 에 대한 에너지 스팩트럼	23
17	임의의 시간 τ 에 대한 시간변화 연산자 회로 디자인	24
18	1차 Trotter 근사한 시간 변화 연산자를 구현한 양자 회로	25
19	초기 상태 $ 0101\rangle$ 일 때 $1\alpha, 2\alpha, 1\beta, 2\beta$ 오비탈에서 차 있는 수의 기댓값을 흐핑 에너지 t 로 재축척한 무차원 시간에 대하여 그린 그래프. 상호작용 에너지 U 는 (a)부터 (f)의 순서대로 $0, 0.5t, 1.0t, 1.5t, 3.0t, 10.0t$ 이다. 검은 실선은 해밀토니안에 대한 정확한 시간 연산자로 구한 기댓값이다. 빨간점과 파란점은 1차 trotter 근사한 시간 연산자의 회로를 각각 시뮬레이터와 IonQ 하드웨어(qpu)로 실행하여 구한 기댓값이다. (a)는 시간을 등분하지 않고, (b)부터 (f)는 시간을 4등분하여 ($N = 4$) 구했다.	27
20	진동수 공간에서 나타낸 위치 2에 차 있는 수의 기댓값의 그래프. 위에서부터 $U = 0, 0.5t, 1.0t, 1.5t, 3.0t, 10.0t$ 를 순서대로 3의 간격을 가지고 그렸다.	28
21	초기상태 $ 0101\rangle$ 이 존재하는 부분 공간에서 나타낸 줄어든 해밀토니안에 대한 시간 연산자를 1차 trotter 근사하여 나타낸 회로.	29
22	상호작용 에너지에 대하여 부분 공간의 고유에너지를 그린 그래프. 여기서 색깔은 해당 고유 에너지에 초기상태 $ 0101\rangle$ 가 존재하는 확률을 나타낸다. 빨간색에서 파란색의 그라데이션은 $[0, \frac{1}{2}]$ 의 확률을 의미한다.	30
23	7등분($N = 7$)한 그림 21 회로를 이용하여 그림 19에서 사용한 동일한 조건으로 얻은 결과. 여기서 초록점은 시뮬레이터로 실행하여 구한 기댓값이다.	31

List of Tables

1	문제에 주어진 모든 게이트들과 Mathematica에 사용한 명령어 그리고 회로 그림 내의 표기법들 간의 관계를 나타내는 표.	2
2	그림 3의 x 축에 사용한 경우들을 정리한 표. 각각의 경우에 따라 초기에 준비해 놓은 상태와 간접시키는 상태들에 따른 상대적 위상을 정리하였다.	5
3	두 이온체인을 만드는 트랩 디자인	19
4	Hubbard 해밀토니안의 고유값과 고유상태	22
5	첨부파일 목록	33