

# Aquila—中性原子计算机的前沿研发样例

焦天晟, 罗添一, 林英凡, and 张桐硕

浙江大学竺可桢学院, 杭州 310058

(Dated: June 9, 2024)

中性原子量子计算机利用中性原子的天然一致性和低误差率, 通过激光冷却和光学捕获技术实现高精度的量子信息处理。其关键技术包括里德堡态、超稳定激光器和可重构的光学镊子阵列, 能够有效地解决复杂优化问题、模拟化学和材料科学行为, 并加速机器学习算法。尽管存在能态衰变、测量误差和激光噪声等挑战, 中性原子量子计算机凭借其高保真度和灵活性, 展现出广阔的应用前景。

## I. 选题背景及意义

### A. 选题背景

- 超导量子比特或硅自旋量子比特需要精密的制造工艺, 以确保每个量子比特的物理性质尽可能相同。然而, 制造过程中的微小差异会导致量子比特之间的不一致性, 从而引发误差。
- 许多早期的量子比特架构在扩展到大规模时面临严重的技术挑战。例如, 超导量子比特需要复杂的低温环境和高精度的控制电路, 这在扩展到数千甚至更多量子比特时变得非常困难和昂贵。

### B. 中性原子量子计算机的优点

- 一致性和同质性:**  
中性原子是天然的量子比特单元, 所有原子在相同的条件下具有完全相同的物理性质。这种一致性大大减少了误差率, 提高了量子计算的精确度。
- 低误差率**  
由于中性原子是自然界中的基本粒子, 它们不易受到制造过程中的不一致性影响, 相比人工制造的量子比特具有更低的误差率。
- 高连接性:**  
中性原子阵列能够通过光学手段实现高效的多量子比特操作, 这使得实现复杂的量子门操作和多量子比特纠缠变得更加容易。
- 控制灵活:**  
中性原子量子处理器既可以在数字模式下操作, 也可以在模拟模式下操作, 通过操控哈密顿量直接实现量子态的演化。这种灵活性使得它们在处理不同类型的量子计算任务时具有很大的优势。

## II. 相关知识:

### A. 中性原子:

中性原子是指其核内的质子数与核外的电子数相等, 整体呈电中性的原子。由于没有电荷, 它们不会像离子那样受到电场的直接影响, 因此可以在磁场、激光场等控制下实现精确操作。中性原子在量子计算中具有重要应用, 因为它们可以通过激光冷却和光学捕获等技术被

精确控制, 并且其内在的电子态可以用于编码量子信息。此外, 中性原子间的相互作用(如里德堡态)也为实现量子比特之间的相互作用提供了基础。通过这些技术, 能够创建稳定且高保真度的量子比特阵列, 推动量子计算的发展。

### B. 里德堡态 (Rydberg State)

Rydberg 态通常使用碱金属, 通过激发价电子到距离原子核非常远的高能态, 使电子云的半径大幅扩展。Rydberg 态的原子之间存在较强的偶极相互作用, 具有良好的纠缠效应。同时, Rydberg 态还具有一个显著的阻塞效应, 相邻的原子无法同时被激发到 Rydberg 态, 因为激发后的原子半径较大, 对相邻原子的同性干扰较大。这种特性使得在热原子气体中实现单原子靶标成为可能。

### C. Rydberg 态的哈密顿量计算:

单原子的哈密顿量取决于拉比频率即激光强度、激光频率与跃迁频率差值。

多原子则额外还要考虑原子间范德华力作用的强度, 通常取决于原子间的距离。

另外, 多原子系统在阻塞半径内拉比频率也即激光强度会按照根号 N 倍增强, 影响到纠缠。

$$H(t) = \frac{\Omega(t)}{2} \sum_i e^{i\phi(t)} |g_i\rangle\langle r_i| + e^{-i\phi(t)} |r_i\rangle\langle g_i|$$

$$-\Delta(t) \sum_i \hat{n}_i + \sum_{i<j} \frac{C_6}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^6} \hat{n}_i \hat{n}_j.$$

- Rydberg 变化中的哈密顿量可简单表示为  $H = H_0 + H_{laser} + H_{int}$
- $H_0$ : 固有能量
- $H_{laser}$ : 激光与原子相互作用能量
- $H_{int}$ : 原子间的相互作用能量

### D. L-P 门 (Levine-Pichler gate analogues)

上图是 Levine-Pichler 门的示意图。通过选择特定的相位跳变, 一个全局场使用依赖状态的动态相位实现了一个 CZ 门。

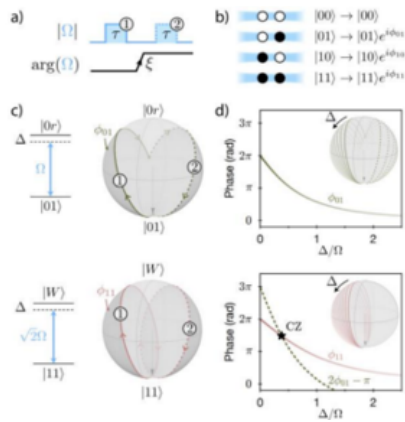


FIG. 1. L-P 门

应用 Rydberg 态的中性原子构成 C2 门，通过局域光场操控实现。这种方法使得中间态 Rydberg 原子纠缠的放松时间更长，态的超稳态密度较低，通常可达到 95% 以上。

### III. 中性原子进行量子计算的理论描述

### A. 微观角度的计算过程描述

Aquila 所使用中性原子是 Rb-87，这种原子属于碱金属，因为外围只有一个孤电子，活性较强，在跃迁后稳定性也较高，因此被选作 Aquila 的主要活动载体。Rb-87 的跃迁并不仅仅是用能量激发原子使电子脱离原子，而是要让原子达到 Rydberg 态——一种特定的高能级态，在这样的能级态势下原子的电子云半径扩大为原来的 1000 倍，这让本来相距离很远的原子变得接近了，也因此他们之间本来非常脆弱的范德华力成为了原子间的主要作用力，这样 Aquila 的研发者们突破了原子间长距离相互作用的桎梏，可以用各种办法来对原子阵列进行特定的操作了。原子间本来作为主要作用力的偶极矩，也即电磁力由于力的大小与半径（原子间距离）成反比，使得这个作用力不够大。Rydberg 态的应用改变了困境。同时我们注意到 Rydberg 态下的 Rb-87 模型不仅可以用于双原子间作用力的分析，还可以简单的就延拓到多原子情景中。

由于跃迁到 Rydberg 态需要提前计算好的可控能量源, 目前使用最多的是激光, 调整好特定频率然后使用光镊技术, 将其作为“镊子”来控制哪些原子需要被跃迁到 Rydberg 态。所以在 Aquila 中如果要改变中性原子的阵列并不需要真的将其改变成需要的形状, 只需要在一块足够大的底板上, 像画画那样使用光镊作为画笔对照需要的图形将对应的原子激活即可。因此整台量子计算机的占用面积极小, 除去占据绝大部分的光学控制系统, 真正作为计算中心的区域是平方毫米级别的。用户只需要根据自己的特性化需求定制出对应的激活序列, 使用光镊进行控制即可。在改变逻辑电路时也不需要将整个硬件替换, 而是像计算机软件编程那样用光镊进行“编程”, 在整块底板上更改被激活的序列, 就可以实现硬件上的替换。而光镊技术作为量子计算机搭建中最为重要的基础科技之一<sup>[1]</sup>。

应用 Rydberg 态和光镊技术, 还可以实现量子比特穿

梭, 基于量子能级的适当选择, 可以做到相干地将原子与不同态中移动。基本原理是先应用 Ion trap (阱) 实际上就是电磁场 (交变电磁场) 来将原子限制在某个限定的三维空间中, 然后再使用物理方法进行转移 (穿梭), 在穿梭的过程中由于 Rydberg 态原子的相干性, 使得原子可以成对定向移动, 从而实现相干穿梭。

同时在逻辑电路的搭建上，中性原子的计算没有采用传统的对单比特或双比特的基础逻辑电路门的重复应用的 Digital mode（数字电路开发），而是使用了更为自由灵活的 Analog quantum mode，其基本原理是：通过对哈密顿量精准的操控实现直接演算，可以跳过门运算直接得到答案。同样，由于重复门演算的模式在重复演算的同时对误差也进行了重复累计，而基于中性原子的 quantum 模式则可以绕开误差累计问题，更加稳定。<sup>[2]</sup>

### B. 宏观角度的计算过程描述

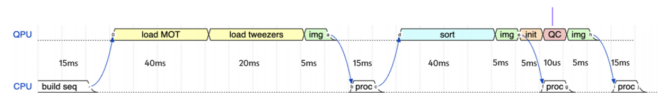


FIG. 2. 中性原子量子计算机的过程描述

- **初始原子捕获:**  
加载磁光陷阱 (MOT), 从中捕获原子到静态陷阱中。对每个随机填充的陷阱进行成像和处理, 确定原子位置。
- **光学捕获与排列:**  
动态激光夹持器将原子阵列排序为用户指定的配置。拍摄图像确定排序成功, 并作为预序列数据密钥返回。
- **量子计算执行:**  
在微秒时间尺度上执行量子计算, 通过激光脉冲驱动原子量子态变化。控制激光的拉比驱动、失调和相位, 实现量子比特操作。
- **测量与重新捕获:**  
重新打开光学陷阱, 捕获基态原子, 通过荧光成像进行测量。原子占用情况通过成像解释为比特串测量数据。

- **光学捕获与排列:**  
动态激光夹持器将原子阵列排序为用户指定的配置。拍摄图像确定排序成功，并作为预序列数据密钥返回。

- **量子计算执行:**  
在微秒时间尺度上执行量子计算，通过激光脉冲驱动原子量子态变化。控制激光的拉比驱动、失调和相位，实现量子比特操作。

- **测量与重新捕获:**  
重新打开光学陷阱，捕获基态原子，通过荧光成像进行测量。原子占用情况通过成像解释为比特串测量数据。

### C. 利用中性原子进行计算的优势

1. **占用面积小**: 所有光学设备可以集中在一个小区内, 最终的核心区域面积可控制在平方毫米量级.
2. **重新组装成本低**: 因为中性原子的 Rydberg 态需要由激光激活, 因此无需改变硬件组装方式, 只需要改变激光照射的顺序和区域, 就可以实现硬件上功能的改变.
3. **量子比特穿梭**: 基于量子能级的适当选择, 可以做到相干地将原子与不同态中移动. 基本原理是先应

2. **重新组装成本低:** 因为中性原子的 Rydberg 态需要由激光激活, 因此无需改变硬件组装方式, 只需要改变激光照射的顺序和区域, 就可以实现硬件上功能的改变.

3. **量子比特穿梭：**基于量子能级的适当选择，可以做到相干地将原子与不同态中移动。基本原理是先应

用 Ion trap (阱) 实际上就是电磁场 (交变电磁场) 来将原子限制在某个限定的三维空间中, 然后再使用物理方法进行转移 (穿梭), 在穿梭的过程中由于 Rydberg 态原子的相干性, 使得原子可以成对定向移动, 从而实现相干穿梭。

4. **Analog quantum mode:** 不同于 Digital mode 的新演算模式, 跳过多重门的搭建。通过对哈密顿量精准的操控实现直接演算, 可以跳过门运算直接得到答案。同样, 由于重复门演算的模式在重复演算的同时对误差也进行了重复累计, 而基于中性原子的 quantum 模式则可以绕开误差累计问题, 更加稳定。

#### D. 误差分析

##### 1. 能态衰变

- 激发的 Rydberg 态通过非共振中间态衰减回到基态或其他中间态。
- 双光子跃迁实现高保真度的双量子比特纠缠门。

##### 2. 测量误差

- 测量过程中重新捕获误差导致状态读数错误。
- 测量过程具有破坏性, 每次测量后需重新构建原子阵列。

##### 3. 激光噪声与原子运动

- 尽管使用稳定的激光器, 仍然存在一定的相位和幅度噪声, 这是由于光量子的量子特性导致的。
- 激光幅度噪声影响量子比特的操作精度。
- 原子在光陷阱中存在热运动, 导致多普勒频移。频移导致测量平均值偏离同时影响测量精度。

#### IV. 中性原子量子计算机实例

早期的研究 Jaksch2000<sup>[3]</sup> 提出了中性原子作为量子计算平台的概念, 主要讨论了如何为中性原子实现快速的两量子比特门操作。作者提出了一种利用在恒定电场中激发至最低能里德堡态的原子的偶极-偶极相互作用来提供所需的大能量相互作用, 以此实现门操作时间远短于原子在囚禁势中的外部运动时间。文章还对门操作的各种不完美进行了详细分析, 包括相互作用引起的机械力和相关退相干机制。

随后展开了一系列使用 Rydberg 原子的验证实验。其中较为关键的结果如 Endres2016<sup>[1]</sup> 指出的通过单个原子的操控和反馈技术, 构建无缺陷的一维冷原子阵列。通过光镊从冷却云中提取单个原子并实时调整其位置, 形成规则且无缺陷的阵列。这种方法为实现大规模、可控的量子系统提供了平台, 可用于量子信息处理、量子模拟和精密测量等领域, 为中性原子的操控开辟了道路。

最近, 又有一系列进展, 包括高保真度的双量子比特门 Levine2019<sup>[4]</sup>、大型纠缠态的制备 Omran2019<sup>[5]</sup>、二维量子相的展示 Ebadi2020<sup>[6]</sup> 等等许多成就。

#### A. 关键要素:

阿奎拉是一个室温量子器件, 其中使用中性铷-87 原子通过激光束在真空室内冷却至微开尔文温度。这些个体原子本身具有量子特性, 在其电子态中编码量子比特, 并通过精确控制的激光脉冲进行操作。这些态被用来处理量子信息, 并可通过状态相关的荧光进行检测。阿奎拉的核心是一个直径为 2 厘米的玻璃真空室, 一个显微镜物镜和低噪声摄像头, 周围环绕着大多数现成的光学元件, 将激光束传递给原子, 并配备了数据中心风格的机架, 用于控制激光束和数据采集系统。显微镜物镜将光聚焦到玻璃室内不到 200 微米宽的区域内, 那里原子本身被排列成一个二维图案。

Aquila 进行量子计算依赖四个关键要素:

- 铷-87 原子作为物理量子位
- 可重构的光学镊子阵列, 以实现最多 256 个原子的任意排列
- 超稳定激光器 (ultra-stable lasers) 驱动原子电子轨道中的量子动力学
- 里德堡态 (Rydberg states), 使得原子能够相互作用。

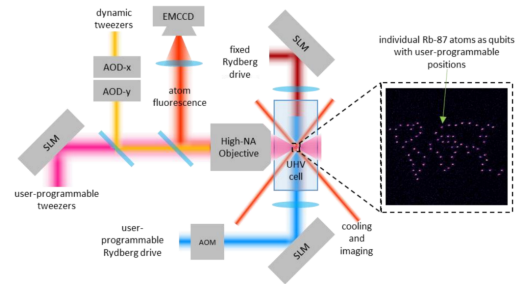


FIG. 3. Aquila 功能模块图

#### B. 物理量子位:

有两组状态对于在 Rb-87 原子上表示一个量子比特是有意义的: 基态-里德堡量子比特 (ground-Rydberg qubit), 它相对寿命较短但能够产生强烈的量子比特之间相互作用, 这些相互作用负责纠缠; 以及超精细量子比特 (The hyperfine qubit), 它不产生相互作用但是具有较长的存储时间。在单个原子中同时具有这两种量子比特类型, 并且能够通过激光脉冲在它们之间切换, 是中性原子平台的巨大优势。虽然 Aquila 目前仅使用基态-Rydberg 量子比特作为模拟量子计算机, 但超精细量子比特将成为后续门控操作的关键组成部分。



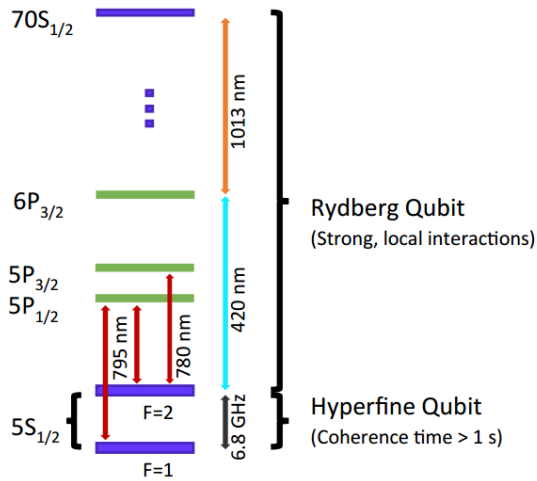


FIG. 4. Rb-87 原子电子结构

超精细量子比特由两个超精细基态  $|0\rangle = |g\rangle = |5S_{1/2}, F=1\rangle$  和  $|1\rangle = |g'\rangle = |5S_{1/2}, F=2\rangle$  表示，它们之间的能量差由一个约为  $6.8\text{GHz}$  的跃迁频率分隔。这些量子比特由于与环境和其他量子比特的弱相互作用而具有极端稳定性和长时间相干性（1 秒）。对于 Rydberg 量子比特， $|0\rangle \equiv |g\rangle = |5S_{1/2}\rangle$  表示一个基态，而  $|1\rangle \equiv |r\rangle = |70S_{1/2}\rangle$  表示一个高度激发的  $S$  轨道，称为 Rydberg 态。这种 Rydberg 态具有许多有用的性质，可以用来产生纠缠态。为了执行纠缠门，原子被临时激发到 Rydberg state 的方式，这是为了对错误具有鲁棒性。

Rydberg 基态测量是通过重新捕获原子来实现的。在量子演化过程中，光学陷阱被关闭，以确保它们不影响量子。演化结束后，光学陷阱被重新打开，将波函数坍缩到特定的逻辑基态。基态通过激光重新捕获，而 Rydberg 态通过激光反捕获，迅速将原子推出阵列。然后通过荧光成像来测量状态，通过原子的存在或缺失来判断：没有原子 (0) 表示 Rydberg 态，而有原子 (1) 表示基态。这种测量过程可能存在一些误差，因为陷阱可能会意外地重新捕获一个已经衰变的 Rydberg 态，或者未能重新捕获一个基态。

测量是“破坏性的”，因为每次测量原子处于 Rydberg 态时，都会丢失原子，这意味着每个实验周期都需要从头开始重新构建原子阵列。虽然这个过程相对较慢 ( $< 10\text{Hz}$ )，但它突显了平台的任意可重构性，因为原则上可以在每次测量中选择完全不同的几何形状，从而在每次测量中有效地构建一个不同的量子处理器。

### C. 光学捕捉技术

Aquila 是一个可编程场量子比特阵列 (field-programmable qubit array)。FPQA 能力的一个重要部分是使用被称为光学镊子的聚焦激光束来捕获和重新排列单个原子，也被称为光学捕获，使用一个接近共振的激光来诱导原子中的偶极矩。通过将激光紧密聚焦在一个单一点上，中性原子被困住。另一组激光会将每个原子初始化到基态。Aquila 使用两种光学捕获模式：

第一种模式使用称为空间光调制器 (SLM) 的设备，创

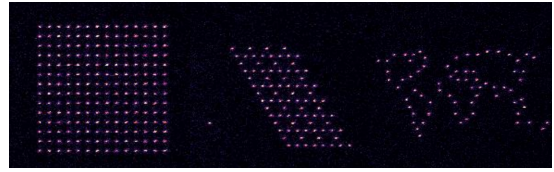


FIG. 5. 通过可重构的镊子来进行任意定位的原子排列

建了数百个个体陷阱的准静态阵列。SLM 使用类似于典型演示投影仪的技术，利用液晶阵列来设置激光波前的相位作为傅里叶平面位置的函数。通过精心设计相位掩模，即所谓的全息术，激光场在聚焦平面上形成数百个紧密的点，这些点作为单个原子的陷阱位置。虽然 SLM 的响应时间对于量子演化的微秒时间尺度来说太长，但相位掩模可以在测量之间更改以设置陷阱的位置，因此原子的位置可以是任意几何形状。在 Aquila 上，由于 SLM 的分辨率，任何两个位置不能相距小于  $4\text{m}$ ，而由于聚焦光学器件的尺寸，陷阱可以放置的区域受到限制，必须在一个  $75\text{m} \times 76\text{m}$  的正方形内。在设计原子位置时，这些约束必须是一个重要考虑因素。这种方法简单来说，就是直接投影并捕获。

光学束缚的第二种模式使用一组声光偏转器 (AOD) 动态移动原子。AOD 利用横穿晶体的声波产生衍射光栅，通过声波频率控制光的偏转量。通过使用两个交叉的 AOD，可以控制原子阵列中多个束缚点的位置，并在微秒时间尺度上移动它们。这使得在附近的陷阱之间移动原子成为可能，这对于确定性地加载阿基拉的原子阵列至关重要。这种方法简单来说，就是利用衍射控制两束光，交叉点即可捕获。

## V. 应用前景

- 优化问题求解：**旅行商问题 (TSP) 和最大割问题 (Max-Cut) 等复杂的组合优化问题在经典计算机上求解非常困难，而量子计算机能够利用量子叠加和纠缠的特性进行更高效的求解。
- 化学和材料科学模拟：**量子计算机可以模拟分子和材料的量子行为，帮助科学家理解和设计新的化学反应和材料。
- 凝聚态物理学：**量子计算可以解决研究微观粒子排列成几何形状时相位特性、系统哈密顿量变化中的系统动力学以及例子耦合等，为这些研究提供了参考以及方便模拟的材料。
- 高能物理和核物理：**对中性原子的极高精度的操控使对该领域理论的验证可行性提升。
- 量子机器学习：**量子计算机有潜力加速机器学习算法的训练和推理过程。中性原子量子计算机可以通过量子增强的支持向量机 (SVM)、量子神经网络等，实现更快速、更高效的机器学习应用。
- 量子通信和量子网络：**量子计算机可以用于量子通信网络的核心处理节点，支持量子密钥分发 (QKD) 和量子隐形传态等应用，提供更高的安全性和隐私。

保护。中性原子量子计算机由于其低误码率和高一致性，非常适合作为量子网络中的节点设备。

## VI. 论文总结

1. **研究进展:** 中性原子量子计算机在过去十年中取得了显著进步。这些研究成果包括高保真度的双量子比特门、大型纠缠态的制备以及拓扑量子相的实现，展示了中性原子平台在量子模拟和量子计算中的巨大潜力。
2. **技术要素:** 阿奎拉 (Aquila) 是一个使用中性钾-87

原子的量子计算设备。关键技术包括超稳定激光器、里德堡态以及可重构的光学镜子阵列，这些技术共同实现了高精度的量子信息处理和测量。

3. **具体实现:** 中性原子量子计算机利用基态-里德堡态和超精细态作为量子比特，通过激光脉冲进行态的切换和操作。光学捕获技术包括使用空间光调制器和声光偏转器，实现原子的精确排列和动态移动。
4. **结果分析:** 尽管使用稳定的激光器，仍存在相位和幅度噪声，影响量子比特操作精度。此外，原子在光陷阱中的热运动导致多普勒频移，影响测量精度。我们在测量精度上还有改进空间。

- 
- [1] Endres M, Bernien H, Keesling A, et al. Atom-by-atom assembly of defect-free one-dimensional cold atom arrays[J]. Science, 2016, 354(6315): 1024-1027.
  - [2] Argüello-Luengo J, González-Tudela A, Shi T, et al. Analogue quantum chemistry simulation[J]. Nature, 2019, 574(7777): 215-218.
  - [3] Jaksch D, Cirac J I, Zoller P, et al. Fast quantum gates for neutral atoms[J]. Physical Review Letters, 2000, 85(10): 2208.
  - [4] Levine H, Keesling A, Semeghini G, et al. Parallel implementation of high-fidelity multiqubit gates with neutral atoms[J]. Physical review letters, 2019, 123(17): 170503.
  - [5] Omran A, Levine H, Keesling A, et al. Generation and manipulation of Schrödinger cat states in Rydberg atom arrays[J]. Science, 2019, 365(6453): 570-574.
  - [6] Ebadi S, Wang T T, Levine H, et al. Quantum phases of matter on a 256-atom programmable quantum simulator[J]. Nature, 2021, 595(7866): 227-232.