

中国科学技术大学

博士学位论文



利用核磁共振量子计算机实验实现 量子模拟

作者姓名： 鲁大为
学科专业： 量子计算与量子信息
导师姓名： 杜江峰 教授
完成时间： 二〇一二年六月二日

University of Science and Technology of China
A dissertation for doctor degree



Implementing Quantum Simulation
Tasks Using Nuclear Magnetic
Resonance

Author: Dawei Lu
Speciality: Quantum Computation and Quantum Information
Supervisor: Prof.Dr. Jiangfeng Du
Finished Time: June 2nd, 2012

利用核磁共振量子计算机实验实现量子模拟

微尺度国家实验室

鲁大为

中国科学技术大学

中国科学技术大学学位论文原创性声明

本人声明所呈交的学位论文, 是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成果。除已特别加以标注和致谢的地方外, 论文中不包含任何他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确的说明。

作者签名: _____

签字日期: _____

中国科学技术大学学位论文授权使用声明

作为申请学位的条件之一, 学位论文著作权拥有者授权中国科学技术大学拥有学位论文的部分使用权, 即: 学校有权按有关规定向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版, 允许论文被查阅和借阅, 可以将学位论文编入《中国学位论文全文数据库》等有关数据库进行检索, 可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。本人提交的电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。

保密的学位论文在解密后也遵守此规定。

公开 保密 _____ 年

作者签名: _____

导师签名: _____

签字日期: _____

签字日期: _____

摘要

量子信息及量子计算是以量子力学为基础，与数学、计算机学、材料学等众多学科相结合而产生的一门新兴交叉学科。量子计算研究的根本目标是建造一台基于量子力学原理，能够充分展示新奇的，独一无二的，同时大大超越经典计算能力的量子特性的新型计算机。例如，分解一个 512 位的整数，用每秒处理百万次运算的经典计算机我们需要 8400 年，但用量子计算机我们只需要 3.5 个小时！虽然这个目标看上去很诱人，但由于在实际的物理实现中，我们要对脆弱的量子体系进行精确的相干控制，以目前的技术手段要真正做到这点是极其困难的。以现在的眼光来看，最切实际的任务是实验验证一个能真正超越经典计算机极限的量子计算实例。量子模拟已经被证明，大概 30 到 100 个量子比特我们就可以完成这个目标，而要体现出量子算法的优越性则大概需要成百上千个量子比特。因此，量子模拟是目前国际上最热门的研究方向之一，也是本论文主要关注的量子计算分支领域。

另一方面，在所有潜在的量子计算机的物理实现中，核磁共振毫无疑问是进展最迅速的一个。迄今为止拥有最复杂的逻辑门操作的量子计算实验— 12 量子比特相干调控就是在该平台完成的。同时，大量的量子算法和量子模拟任务也已在核磁共振上得到了演示，而在核磁共振上发展出的许多精确控制技术也被移植到了诸如离子阱、超导等其他平台上。虽然核磁共振有着像可扩展性等其他方面的问题存在，但它依然是最接近于实现超越经典计算机的量子计算实验的平台。本论文中的实验工作正是在该平台完成的，虽然它们还没有达到超越经典的目标，但已经是朝这个目标迈出的关键一步了。

本论文围绕利用核磁共振实现量子模拟任务这个目标，循序渐进的介绍了本人在攻读博士学位期间取得的一些实验成果。具体内容如下：

1. 前三章主要是背景介绍。首先，我们回顾了量子计算的前世今生，并简要描述了量子计算机的工作模式，以求在大脑中先建立起量子世界的图像；在第二章，我们着墨于量子计算的两大分支领域之一—量子模拟（另一个为量子算法），从它的历史讲起，涉及其原理，分类，以及应用，同时还叙述了目前量子模拟的理论和实验进展。第三章则围绕着核磁共振技术，用量子计算的语言来重新阐释这一发展成熟了数十年的学科。在本章的最后，我们还描述了强耦合体系进行量子计算实验的方法，相对于传统的弱耦合核磁共振体系这部分内容是相对新颖的。
2. 第四章主要介绍实验上如何利用量子随机行走算法实现数据库搜索问题的

指数加速。虽然它的加速和著名的 Grover 算法一样都是二次加速，但它的实用范围更加广泛，而该工作也是 2003 年自从量子随机行走搜索算法提出以来的首次实验验证。我们选择了三比特强耦合液晶体系，成功解决了从哈密顿量确定，初态制备，幺正演化到测量读出等众多的实验难题，高精度的证明了量子随机行走搜索算法的优越性。

3. 第五章集中于我们如何在实验上分解当今世界上分解的最大的数 — 143。我们首先回顾了分解 15 和 21 的实验，接着引出利用改进的绝热量子分解算法，我们在四比特强耦合液晶体系上分解了这个肉眼很难直接看出质因子的三位数 — 143。虽然距离攻破各大政府、军队、银行的安保系统还差很远，但我们一直在朝这方面努力。
4. 第六章是关于利用核磁共振量子计算模拟量子化学问题的工作。从静态的问题开始，我们首先模拟了自然界最简单的分子 — 氢分子的基态能级；进而我们把模拟对象延展到了动态，成功模拟了一维势场的化学反应；最后我们把相位估计算法进行了拓展，实验证明了如何得到一个海森堡哈密顿量模型的本征值和本征态。在本章的最后，我们介绍了一些近期关于量子化学模拟的理论方案，并给出了实验上的预期。

5. 最后

总之，我们完成了很多验证量子计算优越性的实验，朝量子计算机的真正物理实现迈出了坚实的一步。或许这些实验依然只是演示性的，并不能确切给出量子计算机确实超越经典的证据，但我们期望这些实验中用到的技术、技巧及方法可以扩展到其他的实验，甚至其他的物理体系中，为人们在量子计算研究的道路上坚定地走下去提供思路及信心。

关键词： 量子信息处理，量子计算，量子模拟，量子算法，核磁共振

ABSTRACT

Quantum information and quantum computation is a new developing subject, which is based on quantum mechanical theories, and combined with mathematics, computing science and material science etc. The ultimate goal of quantum computation is to establish a new version of computer, which relies on quantum theories, and can exhibit novel, unique and fast quantum properties. For instance, to factor a 512-bit integer, we need 8400 years if we use a MIPS (Million Instructions Per Second) classical computer. However, by utilizing quantum computer it is just required 3.5 hours! It seems very attractive, but the physical realization, which requires us to control the fragile quantum systems very precisely, is very difficult at current technique. The most feasible task at present is finding and demonstrating an example in experiment, which can really surpass the capacity of classical computers. Quantum simulation has been proven to be able to outperform the classical computers in just 30 to 100 qubits, while it may take thousands of qubits to finish this goal if we choose quantum algorithms. Therefore, quantum simulation is one of the hot fields in quantum computation, and is also the main object in this thesis.

In all potential physical systems which might be used to build quantum computers, NMR (nuclear magnetic resonance) is supposed to be the most rapid one in progress. Till now, the most complicated experiment which consists of hundred of logical gates on a 12-qubit system is implemented in NMR. In the mean while, humorous proposals of quantum algorithms and quantum simulation have been demonstrated in NMR platform, and many control techniques developed in NMR have been extended to other systems, such as ion traps and superconducting circuits. Although there are some difficulties like the scalable problem, NMR is still the most promising system to perform the first experiment to outperform the classical computers. All the experiments in this thesis are implemented in NMR, and expected to be a key step towards the goal of surpassing the capacity of classical computers.

The goal of this thesis is implementing quantum simulation tasks using NMR systems, and contains the experimental achievements obtained during my PhD period. The concepts are as follows:

1. Introduction of background from Chapter 1 to Chapter 3. First, we reviewed the history of quantum computation, and described the basic principles of quantum computers. We tried to establish the picture of quantum world in the beginning. In Chapter 2, we introduced one major application of quantum computation-quantum simulation (the other one is quantum algorithms), including the theories, categories, applications and recent progress. In Chapter 3, we reproduced the NMR techniques using the language of quantum computation. In the end of this chapter, we described the methods of implementing experiments with the strong coupling system, which is relatively novel compared to the traditional weak coupling systems.
2. Chapter 4 is mainly focused on the experiment of solving the database searching problem by quantum random walk searching algorithm. Although the speedup is similar to the famous Grover searching algorithm, the quantum random walk searching algorithm is more widely used. This is the first experiment since this algorithm was proposed in 2003. We chose a 3-qubit strong coupling liquid crystal NMR sample, and solved the problems including the Hamiltonian fitting, initial state preparation, unitary evolution and measurement.
3. Chapter 5 is about how to factor the largest number in the world in experiment. After reviewing the experiments about factoring 15 and 21, we proposed a new adiabatic factoring algorithm and factored 143 in 4-qubit strong coupling liquid crystal system. Despite of the long distance from hacking the security system of governments, militaries and banks, we are always working hard towards this target.
4. Chapter 6 is simulating quantum chemistry using NMR quantum simulators. Starting from the static case, we simulated the ground state energy of the hydrogen molecule, which is the simplest molecule in nature. Then we succeeded in simulating the dynamical problem, which is a one-dimensional chemical reaction. Finally we extended the phase estimation algorithm, and obtained the eigenvalues and eigenvectors of a Heisenberg model in experiment. In the last section of this chapter, we introduced some further proposals of simulating quantum chemistry, and gave the experimental expectations.

5. Chapter 7

In summary, we have completed many experiments of demonstrating the superiority of quantum computation. Although these experiments are proof-of-principle, we expect that some techniques and methods used in these experiments can be expanded to other systems, and provide some confidences in the way towards real quantum computers.

Keywords: Quantum Information Processing, Quantum Computation, Quantum Simulation, Quantum Algorithm, Nuclear Magnetic Resonance

目 录

摘 要	I
ABSTRACT	III
目 录	VII
表 格	IX
图表目录	XII
第一章 量子计算简介	1
1.1 经典计算机将到达极限	1
1.2 量子计算的应运而生	3
1.3 量子计算机的工作原理	5
1.3.1 量子比特	5
1.3.2 量子纠缠	8
1.3.3 量子态的演化和量子逻辑门	9
1.3.4 量子态的测量	12
1.4 量子计算机的物理实现	13
1.4.1 量子计算机的要求	14
1.4.2 光学量子计算	15
1.4.3 囚禁原子量子计算	15
1.4.4 超导线路量子计算	16
1.4.5 固态自旋量子计算	17
1.4.6 核磁共振量子计算	17
1.4.7 各体系间的比较及展望	18
1.5 小结	20
第二章 量子模拟	21
2.1 量子模拟理论	21
2.1.1 量子模拟的提出及发展	21
2.1.2 量子模拟的定义及分类	22
参考文献	23

表格

插图

1.1 (左) 乔布斯以及薄如蝉翼的 Macbook Air; (右) 摩尔定律的提出者戈登 · 摩尔在演讲	2
1.2 从非相干光到相干光, 人类的生活发生了巨大的改变。从非相干的经典图灵机到相干的量子计算机, 人类又将迎来怎样的变化呢?	5
1.3 (a) 单比特态 $ \psi\rangle$ 可以用 Bloch 球上的一个点来表示。(b) Bloch 球上的 4 个重要的点。一般我们把 $ 0\rangle$ 态定义为 $+z$ 方向。	6
1.4 要储存 45 个自旋 $1/2$ 的粒子, 我们需要 45 个量子比特或者 2^{45} 个经典比特。用这些经典比特组成的硬盘我们可以做很多事情, 比如存放 160 个《魔兽世界》, 800 部《阿凡达》, 40 万本《时间简史》或者 200 万首《永恒的东风》。仅仅从存储量上看, 经典计算机已经输了。	8
1.5 几种常用的两比特量子门 (a) CNOT ₁₂ 门, (b) SWAP 门, (c) 控制 U 门, (d) 0 控制 U 门。	11
1.6 加拿大 D-Wave 公司宣称他们已经制造出第一台 128-qubit 的超导量子计算机, 但谁也不知道这个售价高的吓人 (1000 万美金) 的超大黑盒子里藏的是什么。	13
1.7 光学量子计算机的示意图, 一个微芯包含几块硅制波导干涉仪以及光控制相移器。绿色的线是光波导, 黄色部分是金属制接触器。取自 [Nature Photon. 3, 346 (2009) ^[32]]	15
1.8 (a) 在周期光势阱中囚禁中性原子的方案。每一个中性原子是一个 qubit, 被囚禁在每个晶格中; (b) 可行的在中性原子中产生多粒子纠缠的方案, 两个处于不同自旋态的原子束缚于同一个晶格中; (c) 线性势阱的示意图。处于同一个势阱中的离子拥有相同的振动模式, 可以用来传递能量从而实现纠缠; (d) 平面势阱的示意图。近期发展的微米级离子阱技术对于在二维和三维上操控离子位置提供了相当大的便利。取自 [Rep. Prog. Phys. 74, 104401 (2011) ^[44]]	16

-
- 1.9 (a) 最小的超导线路模型, Josephson 结用蓝色的“X”来表示;
(b)-(d) Charge, flux 和 phase qubit 中的势能(红色)以及能级
(黑色); (e)-(h) 超导量子比特的微型照片。整个线路都是用铝薄
膜制作的。e,f 为 charge qubit, g 为 flux qubit, h 为 phase qubit。
取自 [Nature 464, 45 (2010)^[53]] 17
- 1.10 (a) 两个电子的自旋态囚禁在半导体的双量子点结构上可以构成
很好的 qubit。传统的方法中, 用磁场来操控 qubit, 但最近也
发展了用电场操控的技术。取自 [Rep. Prog. Phys. 74, 104401
(2011)^[44]]。 (b) 金刚石中的 NV 色心, 电子自旋可以通过磁场和
可见光频率的电磁场来进行操控。取自 [Phys. Rev. Lett. 93,
130501 (2004)^[64]] 18
- 1.11 (a) 核磁共振中 TCE 分子的示意图。该分子中有三个可以用作
自旋 $1/2$ 的原子核, ^1H 和两个 ^{13}C 。(b) 核磁共振中典型的脉
冲序列示意图。该序列为耦合重聚的序列。取自 [arXiv: 0207172
v1^[71]] 19
- 1.12 各体系的 T_2 时间, 以及逻辑门操作的保真度之间的比较。典型
值给出的是单比特门和两比特门的错误概率, 带 * 标记的数值
是通过量子态重构或量子门重构得到的实验值, 用 100% 减去
该值即为保真度。带 † 标记的数值是通过随机基准 (randomized
benchmarking) 过程获得。其他的数值则是粗略的对实验中操作
误差的估计。取自 [Nature 464, 45 (2010)^[53]]。 19

第1章 量子计算简介

很久很久以前，在一个不知名的国度，一个男人被判了死刑。他要求觐见国王，国王也同意听这个男人最后说几句话。“如果你让我再活一年，”男人说道，“我保证我会让您的马飞起来。”国王非常好奇，也非常期待能拥有一匹这个国家唯一的能飞的马，于是他就给了这个男人一年的生命。

当男人回到家把这个事情告诉他的妻子的时候，她大喊道：“你疯了！你不可能让马飞起来的！”男人很从容地解释道：“你说的是对的，马是不会飞的。但你要知道一年的时间什么都有可能发生。国王可能会死，国家可能会卷入战争，国王的马也可能会死，但我至少可以再多活一年。”

在本章中，我们会先介绍经典计算机遭遇的瓶颈，然后会回顾量子计算发展的历史，并简要阐述量子计算机的工作模式。最后，我们会介绍量子计算机的各种可能的物理实现的进展，这正是开始故事的寓意所在。

1.1 经典计算机将到达极限

“当价格不变时，在一块集成电路上可容纳的晶体管数目，大概每隔 18 个月会翻一倍，而其性能也会翻倍。”

——戈登·摩尔

让我们把时钟拨回到四年前。

2008 年 2 月 19 日，苹果公司产品发布会。当时依然精神矍铄的苹果总裁史蒂夫·乔布斯正在致勃勃的和全世界谈他今天要讲的第四件事情。他神秘的拿出了一个牛皮信封，告诉大家产品就在这个信封里。所有现场的观众都感到好奇，可能全世界的观众也在好奇，魔术师一般的乔帮主这次到底要拿出什么震惊世界的产品。大家凝神屏息之时，乔布斯从牛皮信封里缓缓抽出了一张炫目的银色画图板。恐怕谁都不会想到，这居然是一台性能优秀的笔记本电脑，而它又是如此之轻薄，最薄之处仅有 4mm，最厚也不过 19.4mm，拿在手里就像一个银色的树叶一样。

关于苹果家族的新成员 Macbook Air 的这段传奇搬的历史在此已无需赘述，苹果早已以其无限的创意和惊人的实力震撼了全世界。如今，乔老爷子已经仙逝，众多知名的电脑公司也已经可以惟妙惟肖地模仿 Air 的造型。但人们还是不禁要问，我们的电脑在不损失性能的前提下，到底还能瘦身到什么程度？1965 年，时任 Intel 名誉总裁的摩尔早就有了一个非凡的论断：在单个集成电路芯片上能够放置的晶体管数目，大约在一年半内翻一番。迄今为止，这个定

律还没有饱和，但是如果利用摩尔定律往下推论，大概到 2020 年，我们必须要用原子尺寸来储存单个比特的信息。学过量子力学的人都知道，量子效应在那时候将占支配性的地位。

经典计算机遇到的第二个不可回避的问题是，它在本质上是耗散的。换句话说，经典计算机所有的计算过程都是不可逆的，每擦除一个比特的信息，都要再损耗能量上付出一定的代价。很多人都有过把笔记本电脑当做小型电暖气来使用的经历，也曾碰到因为散热问题过于严重导致电脑罢工的情况。当芯片的尺寸做的更小时，这个损耗会更加明显。Landauer 在 1961 年就已提出^[1]，如果要擦除一个比特的信息，耗散的周围环境的热能至少是 $k_B T \ln 2$ 。其中， k_B 是 Boltzman 常数， T 是经典计算机周围环境的温度。事实上，当前的计算机每执行一个经典逻辑门的能量要比这个值高一个数量级以上。

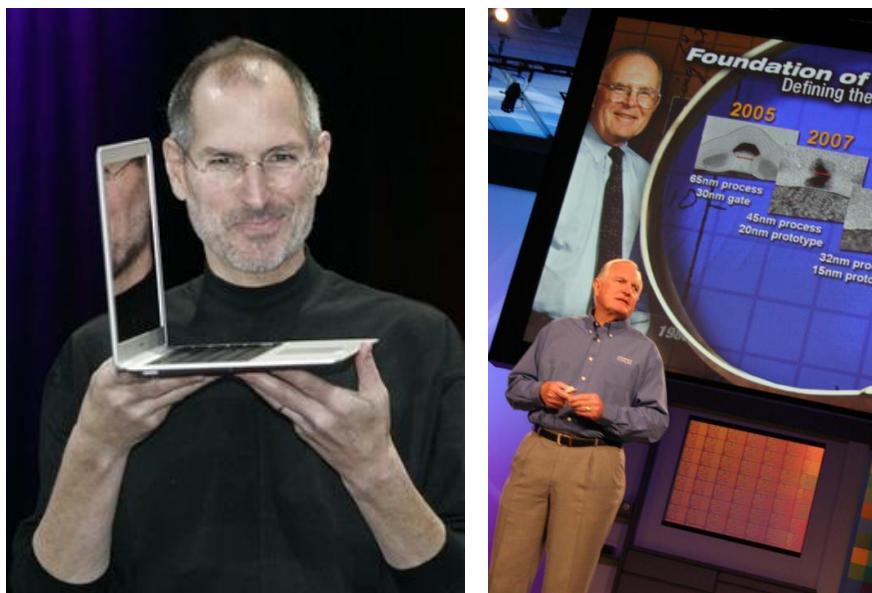


图 1.1 (左) 乔布斯以及薄如蝉翼的 Macbook Air；(右) 摩尔定律的提出者戈登 · 摩尔在演讲

量子效应和热耗散是经典计算机继续发展下去不可回避的问题。其实，还有一个问题是：经典计算机的计算能力极限是多少？一个简单的例子就能说明问题。3 乘 5 等于 15，这是一个六七岁的孩子都能回答上的问题。但反过来，15 等于几乘几呢？虽然这依然是个简单的问题，但它却蕴含了一个可怕的事实：原则上来说经典计算机对这个问题是无能为力的！用科学点的话来讲，如果要用经典计算机处理质因数分解的问题，它所需求的时间是指数增长的，在数学上这种问题属于不可求解问题。我们不妨利用一下所谓的质因数分解问题来考验一下经典计算机。

20 世纪 50 年代，真空管计算机大概能够进行每秒 1000 次的浮点运算，而

到了 2005 年，超级计算机已经可以每秒执行百万亿次的浮点运算，这是一个非常惊人的数字。那么，如果我们要分解一个 512 位的整数需要多久呢？这看上去对我们信赖的计算机应该不是什么难事，但答案却是令人诧异的。如果我们选择每秒能够处理百万次运算的芯片，那么这个时间将是 8400 年！即使使用最强劲的超级计算机，时间花费依然要一个小时之久。如果我们要分解的整数位数增加，计算机分解它所耗费的时间更是指数增加的、所以，质因数分解算法是当前最主流的加密算法 RSA 公钥所采用的加密形式，理论上来说它是牢不可破的，也广泛被应用于政府、军队、银行等重要部门。

1.2 量子计算的应运而生

“底下的空间还大得很。”

——理查德 · 费曼

其实用应运而生这个词并不准确。量子计算的概念并不是因为经典计算即将到达瓶颈而提出来的。当 1959 年量子计算的概念第一次提出时^[2]，经典计算机也只能算刚刚起步（第一台经典计算机 Eniac 问世于 1946 年）。在这次著名的演讲中，费曼给物理学家和工程师们提出了一个有趣的挑战：在很小的尺度上进行操作和控制。特别地，他让听众思考我们能不能建立一种计算机，它的导线直径只有约 10 到 100 个原子，而电路仅有几百纳米这么大？五十年过去了，现在的半导体工艺已经很接近这个尺度，但费曼的本义并不仅仅是指小，而是非常非常的小，小到人们要开始考虑量子力学法则：

“当我们涉及非常，非常小的世界时，比如说 7 个原子的电路，就会有些有趣的事情出现，可能给予我们新的设计思路。小尺度上的原子行为和大尺度上一点都不相同，因为它们仅仅满足量子力学法则。所以，当我们涉足这个世界的时候，我们必须改变我们的看法，因为我们在和不同的法则一起工作，而这很可能导致我们可以做很多不同的事情。当然，不仅是电路，我们也可以采用一些其他的系统，比如分离的能级，自旋间的相互作用等等。”

这应该是最早具有量子计算雏形的思想，它充分结合了当时最热门的学科—量子力学的各种推论，描绘了一幅非常诱人的图景。而费曼更是同时给了一个著名的论断：

“我并不是想违背什么法则。这只是原则上我们可以做到的事情，我们现在还没做到是因为我们实在太小了。”

经典计算机碰到的下一个问题是热耗散。既然 Landauer 认为热耗散来自于逻辑门的不可逆性，那只要说明量子计算是可逆的就可以完全避免这个问题了。Lecerf^[3] 和 Bennett^[4] 证明，确实可以找到普适的可逆计算，不需要擦除信

息，从而也不会产生热耗散。后来，Benioff^[5] 发现量子力学的哈密顿量可以被用作普适的经典图灵机模型。换句话说，基于量子力学哈密顿量演化的量子计算是无热耗散的。

真正提出量子计算优越性的还是费曼^[6,7]。他认为量子计算机依靠有效模拟其他量子系统的演化，可以做到很多经典图灵机做不到的事情。接着 Deutsch 发展完善了所谓的量子图灵机模型，并指出量子计算机具有通过量子并行性来加速计算的潜力^[8]。

十年之后，量子计算领域第一个真正通过量子并行性取得指数加速的算法，也是让全世界感到震惊的算法 — Shor 算法^[9] 横空出世。之所以说让全世界感到震惊，是因为如上一小节所说，大多数的部门机构都是采用 RSA 密钥系统加密，而 RSA 密钥系统的依据就是大数不能在经典上被有效分解。相对于每秒百万次运算的经典计算机需要 8400 年来分解一个 512 位的整数，Shor 算法仅需 3.5 个小时就能做到这一点！正是由于量子计算的特殊叠加和相干性质，Shor 算法可以在多项式的时间复杂度内解决大数分解问题，这在算法上被称作是有效的。该算法提出后，每个国家都会担心自己的安危，一旦在这场信息战中输掉，可能整个国家最重要的机密就泄露了。也正是由于 Shor 算法，很多国家都大大增加了量子计算实验研究的投入，因为它的回报实在太大了。

在开始量子计算的全面介绍之前，我们先通过一个耳熟能详的例子展望下量子计算机将怎样改变人们的生活。在文明出现以前，人类就学会了使用光。从最早的摩擦生火产生的火光，到后来的蜡烛和灯笼，再到电发明后产生的灯泡，所有这些光都有一个共同的性质：非相干性 (incoherence)。20 世纪 60 年代，第一台激光器问世了。可能当时谁都不会想到这个在中国被音译为“镭射”的东西会在接下来的半个世纪内给人类带来这么多变化，甚至于夸张点说，改变了这个世界。最快的刀，最准的尺，最亮的光，无穷无尽的应用，无穷无尽的奇思妙想。你可以用它来逗一下自己的小猫，也可以看球时带着它干扰一下对方的球员；你可以在枪上安装个瞄准镜做到“十步杀一人，千里不留名”，也可以模仿一下阿纳金，玩一把《星球大战》的 cosplay 秀。这些都是科学外的应用，一切都源于激光的一个性质 — 相干性 (coherence)。

就如同激光并不是一种新型的经典光，量子计算机也不是新型的经典计算机。它并不能说是快的，或者小的进化型经典计算机，它的进化决不是从电脑到笔记本电脑再到平板电脑的进化这么简单，它将会是一种具有全新模式的计算机。指导它工作的不再是长串的 01 编码，而是量子力学演化。我们想象不到有了量子计算机后生活将发生怎样翻天覆地的变化，目前我们最主要的任务只是让这个变化尽早发生。

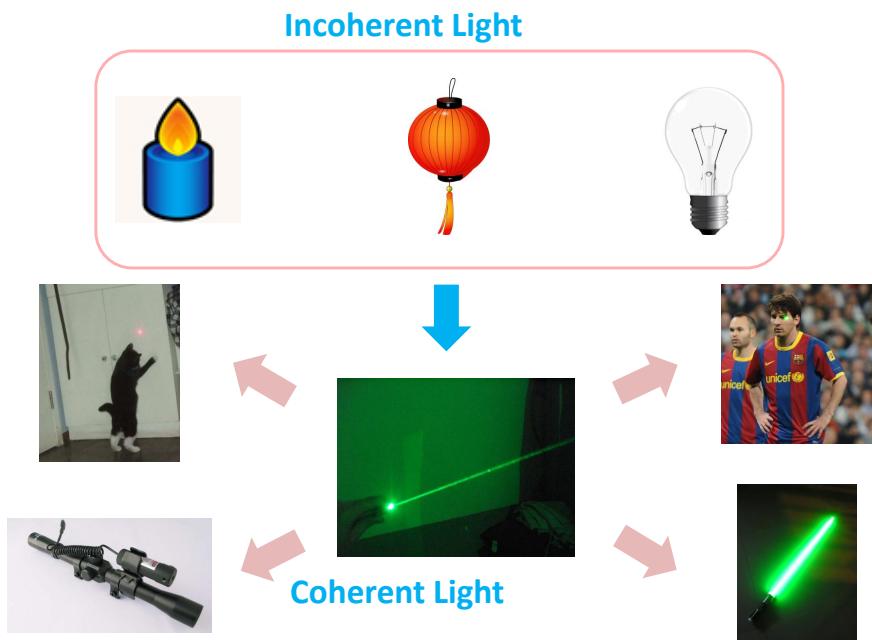


图 1.2 从非相干光到相干光，人类的生活发生了巨大的改变。从非相干的经典图灵机到相干的量子计算机，人类又将迎来怎样的变化呢？

1.3 量子计算机的工作原理

“当你改变你观看世界的方法的时候，你看到的世界也在改变。”

——马克·普朗克

在本节中，我们将讨论量子计算的线路模型。事实上，也有更抽象的图灵机模型，两者在物理上是等价的。

1.3.1 量子比特

在经典图灵机模型中，储存经典信息的基本单位叫做比特。它是一个二进制变量，其数值一般记做二进制的 0 或者 1。一个比特要么是 0，要么是 1，正如向空中抛起一枚硬币，那么它落下后要么正面朝上，要么反面朝上。我们用二进制的比特理论上可以储存任何信息，最简单的，像储存十进制整数就可以利用二进制和十进制的转换。 $3=11$, $4=100$, $50=110010$ 等等。当然，非整数也是可以写成二进制的形式，像 $5.5=101.1$ ，也就是说任意实数都可以按精度要求用二进制来表示。而在电子学中，很多器件是非常适合二进制表示的，像电压的高低和开关，电容器的带电荷与否等等，都可以来作为一个比特的载体。

但在量子世界，一切都发生了改变。一个量子的硬币不仅可以正面或反面朝上，它甚至可以同时正反面都朝上，在你观测它之前。著名的薛定谔的猫就是这个道理，这只猫在开箱子，也就是观测之前，它又是死的又是活的，处于

生和死的叠加态 (superposition state) 上。正是叠加性这个奇妙的性质引出了量子比特 (quantum bit, qubit) 的概念。一个量子比特可以认为是一个在二维希尔伯特空间 (Hilbert space) 中描述的两能级量子体系，它可以在数学上被表示为

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle. \quad (1.1)$$

其中，振幅 α 和 β 是任意复数，且满足归一化条件

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (1.2)$$

$|\psi\rangle$ 就是一个 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的叠加态。 $|\psi\rangle$ 的定义中含有一个不能被任何测量手段观测到且没有物理意义的整体相位，因此我们可以把 $|\psi\rangle$ 写成

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle. \quad (1.3)$$

在几何上，我们可以把这个态表示为一个球面上的点，这个球就叫做 Bloch 球，见 Fig. 1.3。这种基于量子力学的表示形式很容易让人联想到拥有两个自由度 θ 和 ϕ 的经典模拟变量 (analog variable)，但一个量子比特和经典模拟变量有本质的不同：一个处于 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的叠加态上的量子比特，从某种意义上来说，是同时处在 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态上的！薛定谔的猫的概念就是用一种很通俗的说法描述了量子比特这种奇妙的叠加性。更进一步讲，在一个 n -qubit 的态上，它的自由度是和 n 成指数增长关系的。很快我们就会看到这一点。

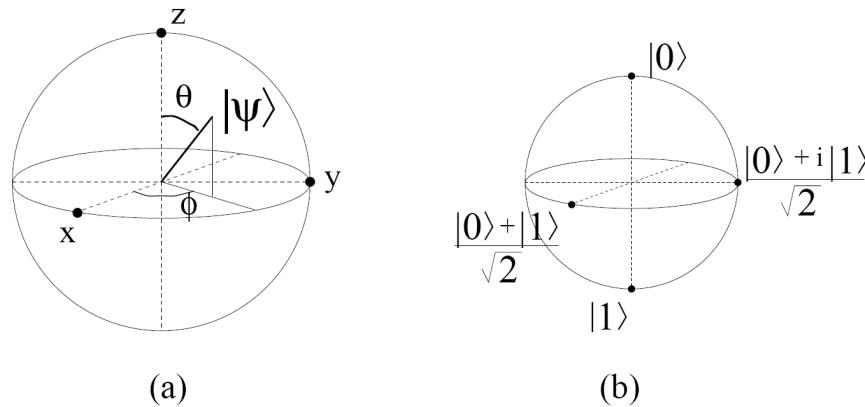


图 1.3 (a) 单比特态 $|\psi\rangle$ 可以用 Bloch 球上的一个点来表示。(b) Bloch 球上的 4 个重要的点。一般我们把 $|0\rangle$ 态定义为 $+z$ 方向。

两个比特的态，假设每一个都处于任意叠加态 $|\psi\rangle_1 = \alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle$ ，

$|\psi\rangle_2 = \alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle$ ，则这两个比特的状态可以写成

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = (|\psi_1\rangle = \alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle) \otimes |\psi_2\rangle = \alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle, \quad (1.4)$$

其中 \otimes 是张量积符号，或者叫做直积符号 (Kronecker product)。把上式展开，我们能够得到

$$|\psi\rangle = \alpha_1\alpha_2|0\rangle \otimes |0\rangle + \alpha_1\beta_2|0\rangle \otimes |1\rangle + \beta_1\alpha_2|1\rangle \otimes |0\rangle + \beta_1\beta_2|1\rangle \otimes |0\rangle. \quad (1.5)$$

为了方便，后面我们将省略直积符号 \otimes ，并把 $|0\rangle \otimes |0\rangle$ 简记为 $|00\rangle$ ，以此类推。因此，

$$|\psi\rangle = \alpha_1\alpha_2|00\rangle + \alpha_1\beta_2|01\rangle + \beta_1\alpha_2|10\rangle + \beta_1\beta_2|11\rangle. \quad (1.6)$$

那么，对一个 n -qubit 的寄存器，它的状态可以写成 2^n 个态的叠加，

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{2^n-1} c_i |k\rangle. \quad (1.7)$$

对这个态的唯一约束条件是归一化条件：

$$\sum_{i=0}^{2^n-1} |c_i|^2 = 1. \quad (1.8)$$

和单比特情形类似，整体相位是可以忽略的。因此，要描述一个 n -qubit 的纯态需要 $2^n - 1$ 个复变量 (混态情形是 $4^n - 1$ 个自由度，此处不作详细讨论)。

在物理实现上，原则上具有叠加性质的两态量子系统都适用做 qubit。目前的实验室里，像 NMR 中处于磁场中的自旋 $1/2$ 粒子 (自旋向上和向下)，空腔中的原子的态 (原子的基态和激发态)，超导结之间隧穿的库珀对 (Cooper pairs 处于一个结和另外一个结时)，都可以被用作 qubit。当然，如果一个硬币可以同时向上和向下也是可以的，在量子随机行走中我们就会看到这种量子硬币 (quantum coin)。

现在我们可以回过头来在看一下经典计算机和量子计算机的差距，这次是存储容量上的。考虑一个简单的情况，我们要储存 45 个自旋 $1/2$ 的粒子，这在量子系统中只是一个很小的体系，只需要 45 个 qubit 就可以实现。但如果我们要用经典计算机完成这个任务，约需要 2^{45} 个经典比特，也就是大概 4 个 TB 的硬盘！这里有些典型的数据来跟它比较，4TB 大概是 4,000G 或者 4,000,000M，而一部高清蓝光影碟大概是 10G，一本书大概是 5M，编写本论文的 Tex 软件包也只有 2G。另外一些比较有意思的数据是，美国国会图书馆的

所有藏书总容量大概为 160TB 或者说 50 个 qubit，而 2007 年人类所拥有的信息量总和为 2.2×10^9 个 TB^[10]，也仅相当于 71 个 qubit 的存储容量。

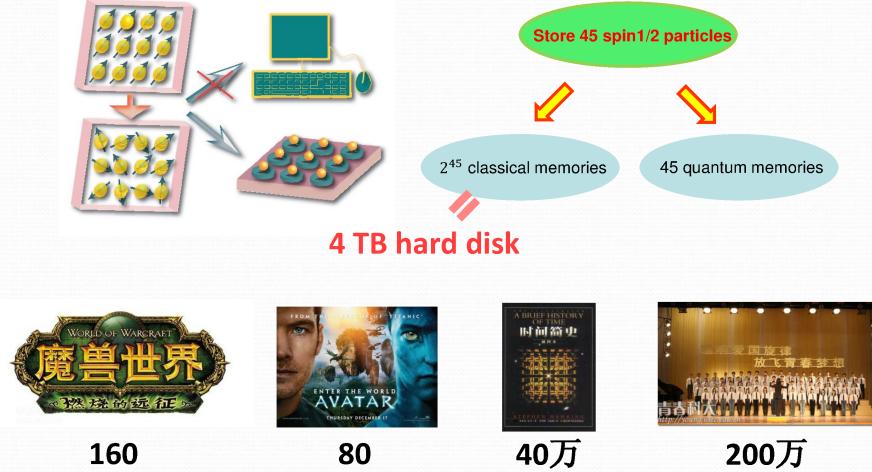


图 1.4 要储存 45 个自旋 1/2 的粒子，我们需要 45 个量子比特或者 2^{45} 个经典比特。用这些经典比特组成的硬盘我们可以做很多事情，比如存放 160 个《魔兽世界》，800 部《阿凡达》，40 万本《时间简史》或者 200 万首《永恒的东风》。仅仅从存储量上看，经典计算机已经输了。

1.3.2 量子纠缠

虽然叠加原理赋予了量子计算机可以在一次运行中完成指数次运算的机会，也就是并行性计算模式，但并不是叠加性并不是量子系统独有的。事实上，也存在满足叠加性原理的经典波，比如两端固定的弦震动方程。但和量子系统不同的是，这些所谓的叠加能级必须属于同一个系统，属于不同系统的经典态是永远不能叠加起来的，也就是没有**纠缠** (entanglement) 的。如果一个多比特量子态能够被写成各个比特的态的直积形式，那么我们就说这个态是可分离 (separable) 的，比如 Eq. 1.4。

相反地，我们总可以找到合适的 α_1, β_1 和 α_2, β_2 ，使得 $|\psi\rangle_1 = \alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle$ 和 $|\psi\rangle_2 = \alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle$ 直积之后的结果为

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (1.9)$$

那么不论我们如何分解，它都是不可能被写成两个 qubit 的态的直积形式的。这种情况我们就称这个态是不可分离 (non-separable) 的或者**纠缠** (entangled) 的。后面我们会看到，纠缠是量子计算中最重要的资源之一，绝大部分的量子算法加速都源于量子纠缠。当然，近些年有理论研究表明纠缠并不是量子算法

加速必不可少的资源，还存在着一种叫做量子无序 (quantum discord) 的资源比纠缠的实用范围更加广泛，具体这部分研究可以参考其他文献。

1.3.3 量子态的演化和量子逻辑门

前面我们给出了量子比特的**静态**性质，讲了量子寄存器的存储方法以及重要的量子纠缠资源。这一小节我们将着重于研究怎么用一种可控的方式来实现我们的计算任务，也就是量子比特的**动态**性质。

在一个封闭的量子系统中，态的演化是满足薛定谔方程的

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle, \quad (1.10)$$

其中 \hbar 是普朗克常数， H 是整个系统的哈密顿量。对于不含时 (time-independent) 的哈密顿量来说，薛定谔方程有很简单的解

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi_0\rangle, \quad (1.11)$$

ψ_0 是 $t = 0$ 时系统所处的态。一般，我们用么正算子 U 来定义时间演化算子，即

$$U = e^{-iHt/\hbar}, \quad (1.12)$$

也就是说，

$$|\psi(t)\rangle = U|\psi_0\rangle. \quad (1.13)$$

如果用密度矩阵的语言，那么量子系统的密度矩阵演化可以写成

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = U\rho_0U^\dagger. \quad (1.14)$$

在后面的章节中，为了方便我们将省略普朗克常数 \hbar 。

一般来说，在简单的量子系统中，一般包含单粒子项和两粒子间的相互作用项。三体及以上的相互作用至今还没在实验中被观测到。因此，我们能够实现的量子逻辑门都是单比特门或两比特门。很幸运的是，后面我们将看到，任何么正操作 U 都是可以拆解成单量子门和受控两比特门的组合的^[11? -13]。我们将在下面分别讨论单量子们和两比特门。

最简单的单比特门是非门 (NOT gate)。和经典情况类似，非门的作用是可

可以把 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 相互翻转。非门的矩阵形式是

$$U_{NOT} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

如果输入态是任意态

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (1.16)$$

那么非门作用后

$$U_{NOT} |\psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

另外一种重要的单比特量子门叫做 Hadamard 门，其定义为

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

经过 Hadamard 门后， $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 将分别变成 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ ，即

$$\begin{aligned} H|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \equiv |+\rangle, \\ H|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \equiv |-\rangle. \end{aligned} \quad (1.19)$$

实际上。任意的单比特操作都可以写成如下形式

$$U = e^{i\alpha} R_{\hat{n}}(\theta), \quad (1.20)$$

其中 $R_{\hat{n}}(\theta)$ 对应于 Bloch 球上的旋转操作，绕 $\hat{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 轴旋转 θ 角。在定义了泡利矩阵 (Pauli matrices) 后

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

我们就可以把单比特旋转操作用泡利算子展开

$$R_{\hat{n}}(\theta) \equiv e^{-i\frac{\theta \vec{n} \cdot \vec{\sigma}}{2}} = \cos(\theta/2)\sigma_I - i\sin(\theta/2)[n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z]. \quad (1.22)$$

两比特门中最常见的是控制非门 (controlled-NOT gate, CNOT gate)。在 CNOT 门中第一个比特起控制作用，第二个比特为目标比特。当控制比特处于 $|0\rangle$ 时，受控非门不进行操作。当控制比特处于 $|1\rangle$ 时，目标比特进行翻转操作。CNOT 门的作用可以表示成

$$U_{CNOT} |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_1 \oplus \psi_2\rangle (\psi_1, \psi_2 = 0, 1), \quad (1.23)$$

\oplus 是模 2 操作。写成矩阵形式的话，CNOT 门是 4×4 的

$$U_{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

该形式为比特 1 控制比特 2 的 CNOT 门形式。还有一种重要的两比特门叫做 SWAP 门，它的作用是把两个比特的状态进行交换，值得注意的是 SWAP 门不是受控的。它的矩阵形式是

$$U_{SWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.25)$$

主要的两比特门在量子线路图中用如下符号表示：

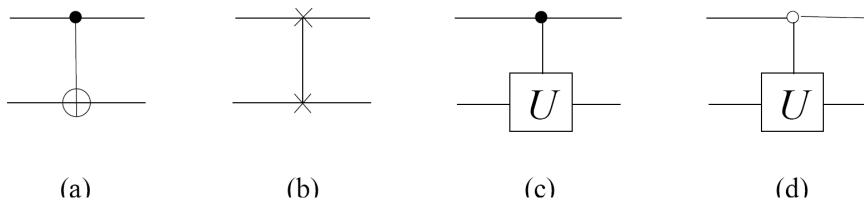


图 1.5 几种常用的两比特量子门 (a) CNOT₁₂ 门，(b) SWAP 门，(c) 控制 U 门，(d) 0 控制 U 门。

事实上，对于多比特系统，更重要的是如下关于量子线路分解的定理：
任意的量子门都可以分解为 CNOT 门和单比特旋转门的组合。
有了以上定理，如果我们能找到有效的分解算法，那么原则上我们可以实现任意复杂的量子线路图。

1.3.4 量子态的测量

在量子力学的假设中，对一个量子系统的任意测量操作总可以用一组测量算子 P_m 来描述。对一个处于 $|\psi\rangle$ 态的量子系统，经过观测算子 P_m 后得到结果为 m 的概率为

$$p(m) = \langle\psi|P_m|\psi\rangle. \quad (1.26)$$

测量后，该量子系统将塌缩为

$$\frac{P_m|\psi\rangle}{\langle\psi|P_m|\psi\rangle}. \quad (1.27)$$

这组测量算子的集合必须满足完备性关系

$$\sum_m P_m = I, \quad (1.28)$$

才能保证所有概率 p_m 之和为 1。特别的，对于投影测量 (projective measurement)，我们还要求 P_m 是厄米算子并且

$$P_m P_{m'} = \delta_{mm'} P_m. \quad (1.29)$$

因此，我们可以利用一组正交基 $|m\rangle$ 来定义任意投影算子的集合，简单的比如 $P_m = |m\rangle\langle m|$ 。在这组投影测量下，得到 m 的概率为

$$p(m) = |\langle m|\psi\rangle|^2, \quad (1.30)$$

且测量后的态为 $|m\rangle$ 。

如果我们在 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 基中测量单比特态 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ，那么我们得到 $|0\rangle$ 的概率为 $|\alpha|^2$ ，得到 $|1\rangle$ 的概率为 $|\beta|^2$ 。

当然 Stern-Gerlach 实验早就证明对于量子系统被测量后的塌缩性质，也就是我们不可能通过对一个 qubit 进行连续测量来得到其系数 α 和 β 。当然，一个直接的想法是如果我们可以在大量该粒子的拷贝上进行足够多的投影测量，总能通过统计规律得到 α 和 β 的值。但很遗憾，不可克隆定理 (no-cloning theorem)^[14,15] 告诉我们这也是不行的，因为我们不能对一个处于未知态的 qubit 进行精确的拷贝 (或许可以预见盗版量子计算机的软件将是一个技术活)。总结来说，

没有测量手段可以完全揭示一个处于未知态的量子比特的状态。

关于量子计算的基本原理的参考书目及文献很多。值得推荐的有：

Nielsen 和 Chuang 的名作《量子计算与量子信息》^[16]，国内被昵称为“黄

书”(因其中文版封面为黄色); 非常基础的 Steane 写的 review^[17], 当然这篇文献的部分内容已经非常过时; Preskill 的讲稿^[18]; Bennett 和 DiVincenzo 写的权威性评述^[19]; Benenti, Casati 和 Strini 合著的《量子计算与量子信息原理》^[20](中文版为王文阁, 李保文等译)。

1.4 量子计算机的物理实现

“我们要记住, 或许有一天量子理论会被证明是失败的, 因为它和我们日常的生活经验、哲学是如此的不同。”

——理查德 · 费曼

上一节的内容已经从理论上大致描绘了一台量子计算机的蓝图, 但在真正的量子计算机问世之前, 一切都是空话。理论上已经提出了很多方案可以物理实现量子计算, 但对大规模量子系统的精确控制存在着很多困难, 比如退相干效应。在宏观世界中, 我们很难观测到量子行为的一个重要原因就是退相干已经把量子性彻底给退光了。但是, 随着技术的日新月异以及更有潜力的量子计算方案的提出, 人们距离真正的量子计算机还是越来越近的。2011 年, 加拿大的 D-Wave 公司就宣称他们已经成功研制了世界上第一台通用量子计算机^[21], 包含 128 个 qubit, 售价为 1000 万美金。美国的 Lockheed Martin 公司斥巨资购买了一台, 但业内人士对这个号称基于绝热量子计算的庞然大物普遍存在质疑, 认为它并不能做到真正的单 qubit 控制, 且能解决的任务非常有限。本文不会对这个争议颇多的“量子计算机”作更多的讨论, 更重要的是分析当前各量子计算方案的利弊, 力图给出各方案的发展前景。



图 1.6 加拿大 D-Wave 公司宣称他们已经制造出第一台 128-qubit 的超导量子计算机, 但谁也不知道这个售价高的吓人(1000 万美金)的超大黑盒子里藏的是什么。

1.4.1 量子计算机的要求

或许对量子计算机最苛刻，也是最普遍的要求是所谓的“封闭盒子”(close box)条款：在操作人员的控制下所执行的量子计算机的内部操作，必须和整个宇宙的其他部分孤立开来。即使一点点的干扰都可能让我们脆弱的量子计算机产生毁灭性的衰亡，也就是**退相干**(decoherence)。

退相干有多种来源。在大量实验的系综测量中，由于哈密顿量是含时的，导致每次的振荡频率总会有差别，统计下来整个设备就会有信号衰减，这个时间尺度叫做 T_2^* ；实验中，系统总会被附加一些随机的过程或者放出能量，导致统计结果为系统朝热平衡态演化，这个时间尺度叫做 T_1 ；而系统也可能和外界环境通过相互作用让振荡产生相位扰动，导致相干的衰减，这个时间尺度叫做 T_2 。一般来说， $T_2 \leq 2T_1$ ，而且在绝大多数系统中， $T_1 \gg T_2$ ，所以在量子计算中 T_2 是更加重要的。

没有什么系统是完全的退相干不变的，但是少量的退相干影响是可以通过各种技术消除的，著名的比如**量子纠错**(quantum error correction)。早期的对容错量子计算机的物理实现要求有著名的 DiVincenzo 五条定则^[22]，这里不再赘述。如果我们假设物理体系的退相干效应足够小的话，一个物理实现方案只需要满足下面三个条件就可以用做量子计算机的潜在体系了。

首先是**可扩展性**(scalability)。量子计算机的操作都是在 Hilbert 空间中进行的，而 Hilbert 的空间维度是指数形式增长的，这就要求我们的物理体系要有非指数的资源，但缺能反应出 Hilbert 空间的指数增长，例如时间，空间，能量等。标准的做法就是遵循 DiVincenzo 的第一条定则：可以简单的对一个系统增加新的且可分辨的 qubit。当然要宣称一个方案是“可扩展的”确实非常难，因为用来定义和操控 qubit 的资源总是多种多样的，这会涉及到很多经典技术，比如微芯，微波，激光，低温等。为了证明该方案可扩展，必须同时要把这些技术做到可扩展，这可能就需要非常复杂的工科知识了。

其次是该体系有能执行**普适的逻辑操作**。也就是，在大的 Hilbert 空间中的操作必须能够分解成一系列简单的操作，而这些简单操作的需求资源不能是指数增长的。当然，前面已经说过，任意角度的单比特旋转门和两比特 CNOT 门就可以组合成任意的逻辑操作，也就是说只要该体系能够有效实现这两个门就可以了。当然，除了基于逻辑门的量子计算，还有其他的量子计算模式，比如绝热量子计算(adiabatic quantum computation)^[23]，单向量子计算(one-way quantum computation)^[24]等。这些量子计算模式中和基于逻辑门的量子计算是等价的，但执行它们并不需要拆解逻辑门。

最后是**纠错能力**(correctability)。该方案必须能够萃取计算机的信息熵来

得到有用的量子态，比如有效的初态制备和测量。初态制备其实就是把一个量子系统迅速地冷却到低熵的状态，而测量就是迅速地以较高的精度得到量子系统的状态的能力，这两者在某种意义上是相似的，且已经被统一到了量子纠错理论中。

目前建造量子计算机最主要的挑战就是操控，测量量子系统的能力，以及阻止系统和外界环境的相互作用的能力，我们将对目前主流的备选方案进行基本介绍。

1.4.2 光学量子计算

相比于其他系统，光子的退相干效应要小很多，非常适合用作 qubit。qubit 的信息可以编码到光子的极化状态上，而单比特旋转可以通过线性光学器件，如分束器，相移器等轻松实现，但如何达到需求的相互作用从而实现两比特门一直是一个难题，采用非线性 Kerr 介质中的原子来传递在技术上非常困难。2001 年，著名的 KLM(Knill-Laflamme-Milburn) 方案出现^[25]，表明通过单光子源，单光子探测器以及线性光学线路是可以实现普适量子计算的。其条件是在量子计算过程中的任意阶段，都可以用单光子探测器进行测量，且测量结果可以用来控制其他光学单元。目前，实验上已经有一些简单的量子算法在线性光学系统上得到了验证^[26,27]。最近的工作主要集中在如何实现高效率的单光子源^[28,29] 和单光子探测器^[30,31] 上。

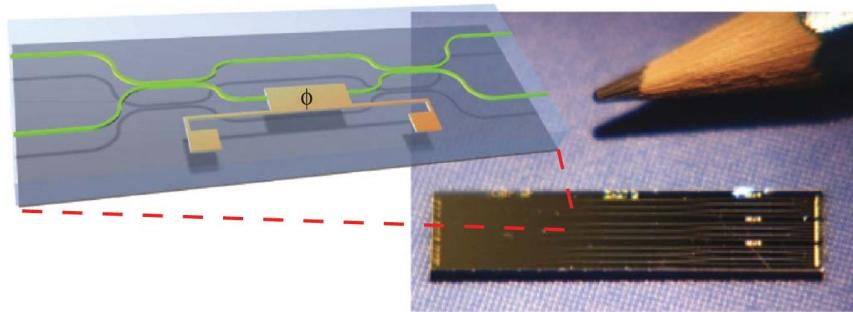


图 1.7 光学量子计算机的示意图，一个微芯包含几块硅制波导干涉仪以及光控制相移器。绿色的线是光波导，黄色部分是金属制接触器。取自 [Nature Photon. 3, 346 (2009)^[32]]

1.4.3 囚禁原子量子计算

相对于其他体系，在囚禁原子和离子中，由于与环境的相互作用非常弱，所以该体系的退相干时间非常长，典型的 T_2 已经为几秒，这是该体系作为量子计算方案的最大优势。

在囚禁原子中，首先出现的是离子阱量子计算。把一个静电场和交变电场联合起来，然后将一串离子束缚于一个线性势阱之中。这些离子构成了 qubit，而离子的两个能级则对应于 qubit 的两个态。单量子比特门可以通过对离子施加激光脉冲实现，而 qubit 之间的相互作用可以通过离子串的集体振动模式来传递，从而形成受控两比特门^[33,34]。2001 年，Cirac 和 Zoller^[35] 构想了利用许多独立离子阱以及一个用作探头的独立离子形成一个二维阵列，然后利用适当的激光脉冲可以将独立离子和选定的离子纠缠起来，从而实现可扩展的离子阱计算机。目前，实验上已经相继实现了八离子纠缠^[36] 以及十四离子纠缠^[37]。

中性原子的 qubit 和离子阱类似。首先激光束交叉构成一个光晶格，而中性原子就被囚禁在这些光晶格中^[38]。qubit 被编码在原子的能级上，可以通过光泵浦和激光冷却进行初始化，用电磁辐射进行操控，然后通过激光诱导荧光谱读出。但是目前为止，对光晶格中的中性原子的单独控制和测量在实验上还是非常困难的，但很多实验结果已经在这方面给出了相当广阔的前景^[39? -43]。

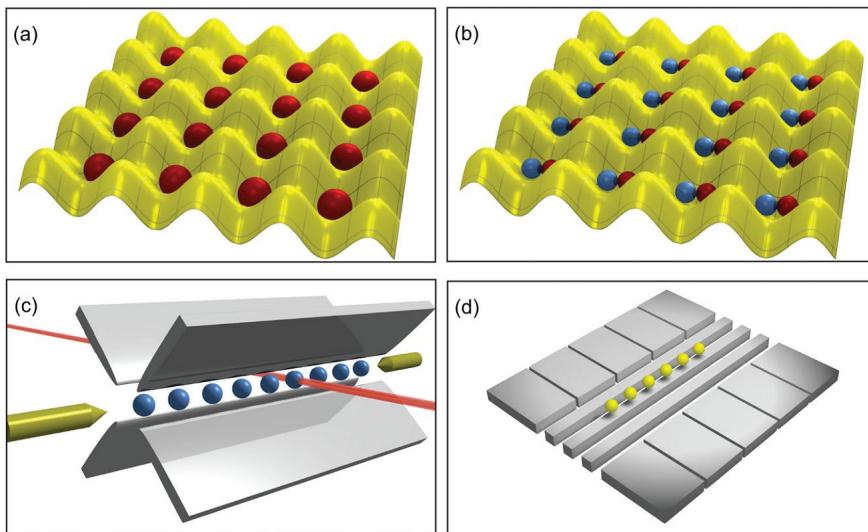


图 1.8 (a) 在周期光势阱中囚禁中性原子的方案。每一个中性原子是一个 qubit，被囚禁在每个晶格中；(b) 可行的在中性原子中产生多粒子纠缠的方案，两个处于不同自旋态的原子束缚于同一个晶格中；(c) 线性势阱的示意图。处于同一个势阱中的离子拥有相同的振动模式，可以用来传递能量从而实现纠缠；(d) 平面势阱的示意图。近期发展的微米级离子阱技术对于在二维和三维上操控离子位置提供了相当大的便利。取自 [Rep. Prog. Phys. 74, 104401 (2011)^[44]]

1.4.4 超导线路量子计算

超导线路典型的是 μm 尺度，并且是在 mK 温度下操作。虽然超导线路是肉眼可见的，但它依然表现出很多可以用来作量子计算的量子行为^[45-48]。在超导线路中，qubit 有很多种编码的方式：在孤立的岛上超导电子的数目可以用作

电压 (charge) qubit；电流的方向可以用作磁通 (flux) qubit；线路中的振荡态可以用作相位 (phase) qubit。这些 qubit 可以通过微波，电压，磁场，电流等进行高精度控制，从而实现量子计算任务。目前超导线路中已经可以实现一些简单的量子算法^[49] 并产生三比特的纠缠态^[50-52]。

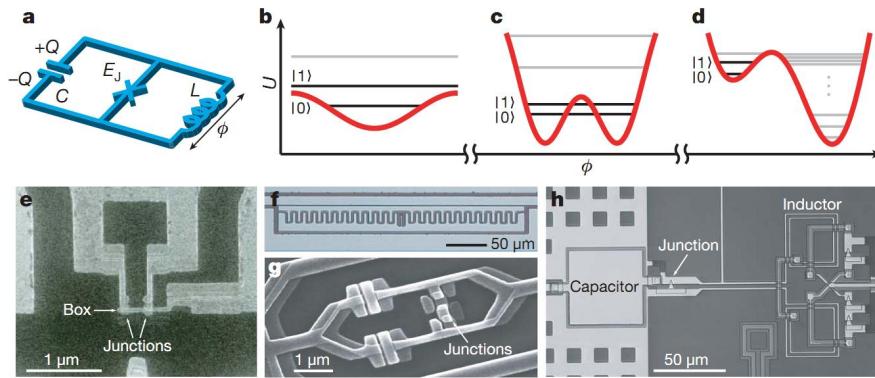


图 1.9 (a) 最小的超导线路模型，Josephson 结用蓝色的“X”来表示；(b)-(d) Charge, flux 和 phase qubit 中的势能 (红色) 以及能级 (黑色)；(e)-(h) 超导量子比特的微型照片。整个线路都是用铝薄膜制作的。e,f 为 charge qubit, g 为 flux qubit, h 为 phase qubit。取自 [Nature 464, 45 (2010)^[53]]

1.4.5 固态自旋量子计算

当前的技术已经可以对固体中的单自旋进行相干操控和测量^[54,55]，因此产生了利用量子点中的电子自旋^[56] 或者 NV 色心中的电子自旋及核自旋^[57] 作量子计算的方案。相比于其他体系，固态 qubit 的吸引力在于它们可以根据需要进行设计并且在大的阵列上进行扩展。而且，固态方案要求的温度一般可以到几 K 的量级，NV 色心更是可以在室温下进行操控。操控和读出的方法既可以是电学手段^[58]，也可以是光学手段^[59-61]。

虽然目前 Rabi 振荡已经在实验上被观测到^[62,63]，但目前只有 NV 色心可以实现两比特门^[64]，量子点中只有一个逻辑态间的 SWAP 门在实验上实现了^[65]。NV 色心中电子与核自旋之间纠缠起来也已在实验上实现^[66]。

1.4.6 核磁共振量子计算

液体溶剂中分子的核自旋非常适合做量子计算。分子的快速运动保证了该方案的 T_2 时间可以达到几秒的量级，媲美离子阱。1997 年，第一次提出可以用已经存在发展了超过 50 年的核磁共振技术做量子计算^[67,68]。在把样品置于核磁谱仪的强磁场中后，处于不同化学环境的核自旋可以通过 Larmor 进动频

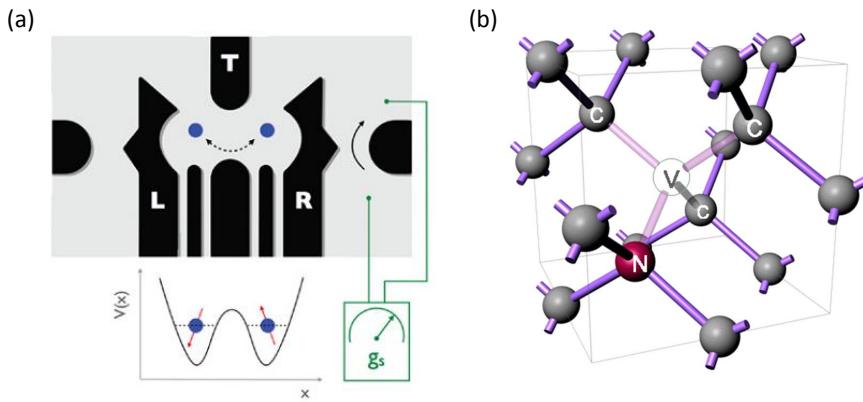


图 1.10 (a) 两个电子的自旋态囚禁在半导体的双量子点结构上可以构成很好的 qubit。传统的方法中，用磁场来操控 qubit，但最近也发展了用电场操控的技术。取自 [Rep. Prog. Phys. 74, 104401 (2011)^[44]]。 (b) 金刚石中的 NV 色心，电子自旋可以通过磁场和可见光频率的电磁场来进行操控。取自 [Phys. Rev. Lett. 93, 130501 (2004)^[64]]。

率分开。单比特门可以通过外加射频脉冲实现，而两比特门可以通过核与核之间的相互作用来实现。目前，液体核磁已经可以实现最大到十二个 qubit 的量子计算^[69]，也已经验证了很多量子算法方案^[70]。核磁共振遭遇的主要是可扩展性问题，想做到几十到上百个 qubit 理论上非常困难。

1.4.7 各体系间的比较及展望

展望未来，到底哪一个体系是最有希望实现真正的大尺度的量子计算机呢？这个问题非常难于回答，但我们首先要比较的就是各个体系的相干时间。我们给出了一个各体系之间的比较，总结于下图中。这些 T_2 时间可能随着技术的发展而增加，目前来看离子阱体系是最长的。当然，每个 qubit 的 T_2 还要和该体系的初始化，控制，以及测量时间相比较。

除了相干时间，在 qubit 的操控中的误差也是量子计算机必须考量的因素，这些数值也被总结在上表中。同时在逻辑门操作的时间内退相干的影响也是对逻辑门的误差有贡献的。还有各体系的量子纠错能力也是要被考虑的因素，不过这个条件非常难以量化，它和机制复杂的噪声过程有关。

由于量子计算的实验进展是日新月异的，所以相关的参考文献最好选择最新的，比较推荐的有 2010 年 Nature 上的综述^[53] 以及 2011 年 Rep. Prog. Phys. 上的综述^[44]。

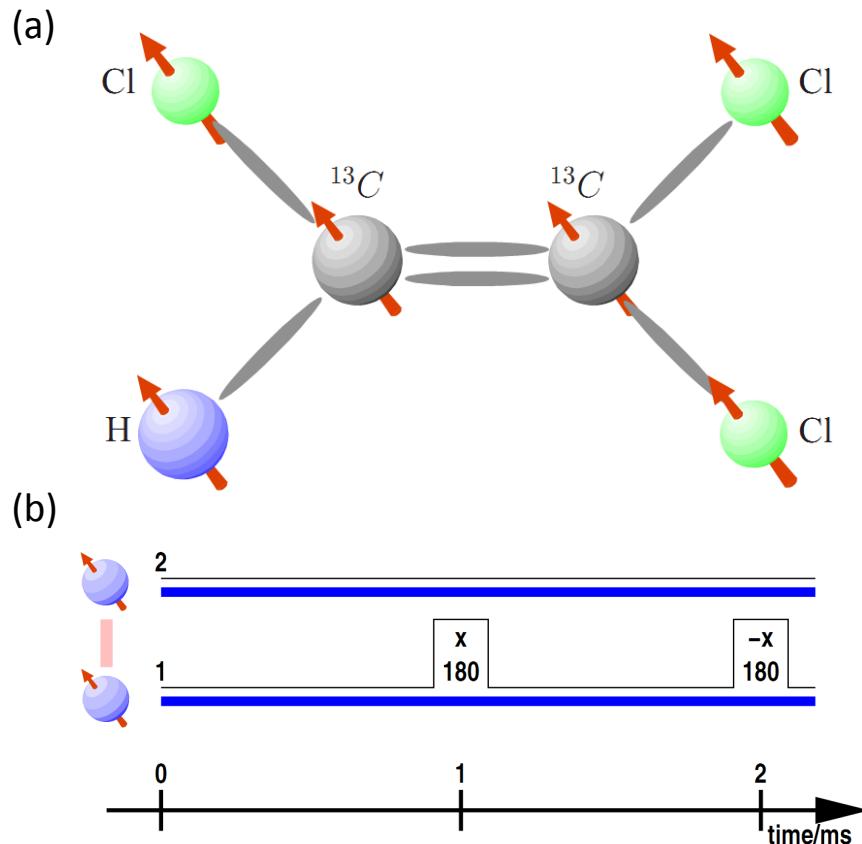


图 1.11 (a) 核磁共振中 TCE 分子的示意图。该分子中有三个可以用作自旋 $1/2$ 的原子核, ^1H 和两个 ^{13}C 。(b) 核磁共振中典型的脉冲序列示意图。该序列为耦合重聚的序列。取自 [arXiv: 0207172 v1^[71]]

Type of qubit	T_2	Benchmarking (%)	
		One qubit	Two qubits
Infrared photon	0.1 ms	0.016	1
Trapped ion	15 s	0.48 [†]	0.7*
Trapped neutral atom	3 s	5	
Liquid molecule nuclear spins	2 s	0.01 [†]	0.47 [†]
e^- spin in GaAs quantum dot	3 μs	5	
e^- spins bound to ^{31}P : ^{28}Si	0.6 s	5	
^{29}Si nuclear spins in ^{28}Si	25 s	5	
NV centre in diamond	2 ms	2	5
Superconducting circuit	4 μs	0.7 [†]	10*

图 1.12 各体系的 T_2 时间, 以及逻辑门操作的保真度之间的比较。典型值给出的是单比特门和两比特门的错误概率, 带 * 标记的数值是通过量子态重构或量子门重构得到的实验值, 用 100% 减去该值即为保真度。带 † 标记的数值是通过随机基准 (randomized benchmarking) 过程获得。其他的数值则是粗略的对实验中操作误差的估计。取自 [Nature 464, 45 (2010)^[53]]。

1.5 小结

本章的任务是简略的回顾量子计算的发展历史，介绍量子计算机的工作原理以及当前实验上的进展。如果把经典计算机比喻为单一乐器的话，量子计算机就是一个交响乐团，你可以同时听到很多美妙的音乐；如果把经典计算机比喻为手动进水、漂洗、甩干的洗衣机的话，量子计算机就是一台全自动洗衣机，只要“哗”的按下去脏衣服就一件一件变白了。但是，虽然量子计算机看上去很美好，但从目前的实验进展来看建造一台真正的量子计算机的目标依然还是很虚无缥缈的。这大概就和一个世纪前人们看待经典计算机的感觉一样。虽然很难，但我们一直在努力寻找新的方案，发展新的技术，创造新的手段，等待所有的瓶颈都被突破的那一天。正如本章开始所说，创造一个会飞的马很难，但我们有一年的时间来努力，而一年确实是什么都有可能发生的，更何况我们用来建造量子计算机的时间可不止一年，只要我们一直朝这个方向努力，总有一天我们会说，过去的电脑简直弱爆了，我们要玩量子并行版的 Dota，我们要模拟自己的人生运势，当然闲来无事还要破解一下对门女孩子的 QQ 密码。

号称卖量子计算机的 D-wave 的广告词确实说的不错：

”Yes, you can have one.”

第2章 量子模拟

当 1946 年世界上第一台电子计算机 ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer) 诞生时，这个占地 170 平方米，重达 30 吨的庞然大物仅仅能在一秒中之内进行 5000 次加法运算，而现在富士通研发的超级计算机 K-Computer 可以每秒执行 8.16 千万亿次浮点运算！万事开头难，在 40 年代总投资高达 48 万美元的巨款最终促使了 ENIAC 的诞生，开启了一个新的时代，很难想象短短六十多年间计算机硬件已经进化到了如此的程度。

让我们转到量子计算的话题上来。其实当今量子计算的境遇和当时 ENIAC 诞生前很像：各国都在拨款，全世界都在竞赛，希望打赢这场新的信息战。Shor 的大数分解算法和量子通信中的 BB84 协议让人们认识到了量子计算机无比广阔的前景，但同时几十年来实验技术的滞后又让人们不禁泛起一丝疑虑。至少目前为止，量子计算的水平还是远远落后于经典计算的，所以人们迫切需要找到一个例子来打败经典计算机，重拾人们的信心。

话虽如此，想做到这一点依然十分困难。如果我们从量子算法着手，比如 Shor 算法，我们大概需要成百上千个 qubit 才有希望打败经典计算，这个难度就和 40 年代的人妄想着建造一台可以每秒执行千万次运算的电子计算机一样。幸好，量子计算除了量子算法这个大领域以外，还有另外一个很有影响力的领域—量子模拟。现在已经证明，利用量子模拟的手段，我们只需要 30 到 100 个 qubit 就可以超越经典计算！因此，量子模拟的相关研究是实验上非常热门的领域，因为每个人都希望自己是第一个真正看到量子计算优越性的人。

本章中，我们将系统全面的介绍量子模拟这个领域，从它的历史和发展说起，阐述量子模拟的定义和分类，以及它的物理实现和在各学科的应用。当然，我们会紧跟量子模拟的实验进展，给出未来几年量子模拟的发展前景。

2.1 量子模拟理论

“让我们建造一台充满量子力学气息的、依循量子力学规则的新型计算机吧。”

——理查德 · 费曼

2.1.1 量子模拟的提出及发展

其实和著名的 Shor 算法比起来，量子模拟的提出要早的多。

三十年前，也就是 1982 年，费曼就认识到如何模拟量子系统是非常有挑战性的问题^[6]。这个问题根本上来说就是计算复杂度的问题：随着量子体系维度的增长，为了存储量子态所需的经典寄存器是指数增加的。不仅如此，模拟量子系统的演化也需要指数增长的逻辑门操作。这种“指数爆炸”困难是不可回避的，除非用一些经典随机或近似方法，例如 Monte Carlo 方法，平均场理论，密度泛函理论及格林函数方法等。但遗憾的是这些方法并不总是有效的，而且还面临许多限制。为了多存储一个自旋 $1/2$ 的粒子，经典计算的存储空间就要加倍，毫无疑问即使对于今日的超级计算机来说模拟量子系统依然非常头痛的。

上述问题的可能的解决方案也是费曼在同一篇文章中提出：利用基于量子力学规则建造的新型计算机应该可以^[6]。在费曼的文章中并没有涉及具体的要用到什么函数或者什么手段，他只是猜测这种计算机应该是可以有效解决这类问题的。十多年后，Lloyd 终于证明一台量子计算机是可以作为普适的量子模拟器，来模拟这些问题的^[72]。当然，针对某些特殊的问题有时并不需要一台真正的量子计算机，一些简单的设备也是有可能模拟需求的问题的（当然这些肯定不是普适的量子模拟器）。

最近量子模拟变得热门主要是两个方面的原因。第一，理论上很多学科的问题，只要牵涉到量子行为，都可以通过量子模拟来解决。不仅仅是物理和化学，生物，材料学等看似毫不相干的学科中也已经诞生了很多量子模拟的方案。比如在凝聚态物理中，量子模拟就可以用来研究量子相变，量子磁体，高温超导等。还有高能物理，计算量子化学，甚至宇宙学等等众多有影响力领域都能和量子模拟扯上关系。第二，目前实验上的相干控制技术已经足以给出一些演示性的实验来验证量子模拟理论，而且很多研究组也已经在研究十个 qubit 以上的量子模拟器。实验上的代表性工作参见文献^{[73] - [76]}，这些工作也将在后面的部分详细叙述。有了这些漂亮的实验，人们有理由相信未来的几年内量子模拟会取得突破性进展的，超越经典也不是不可能完成的任务。

2.1.2 量子模拟的定义及分类

我们这里给出一个并不十分严格的量子模拟的定义：

“量子模拟就是用量子力学的方法来模拟量子系统。”

也就是说，我们可以通过一个可控的量子系统来模拟其他量子系统^[?]。假设要模拟的系统的量子态为 $|\phi\rangle$ ，该系统经过幺正演化

$$U = e^{-iH_{\text{sys}}t} \quad (2.1)$$

从初态 $|\phi(0)\rangle$ 演化到了 $|\phi(t)\rangle$ 。其中， H_{sys} 是系统的哈密顿量。而量子模拟器中作为一个可控的量子系统，其初态为 $|\psi(0)\rangle$ ，演化算子为

$$U' = e^{-iH_{\text{sim}}t}. \quad (2.2)$$

这里 H_{sim} 是模拟器的哈密顿量，而经过该演化后，模拟器的末态变为 $|\psi(t)\rangle$ ，并且这个态是容易测量的。如果在这两个量子系统间存在一个映射，即 $|\phi(0)\rangle$ 和 $|\psi(0)\rangle$ ， $|\phi(t)\rangle$ 和 $|\psi(t)\rangle$ 之间存在映射关系，那么原量子系统就可以被模拟，其表示可以见下图。

参考文献

- [1] R. Landauer. Irreversibility and heat generation in the computing process. *IBM J. Res. Dev.*, 5(183), 1961.
- [2] R. P. Feynman. There is plenty of room at the bottom. *Engineering and Science*, 23(22), 1959.
- [3] Y. Lecerf. Machines de turing reversibles. *Comptes Rendus*, 257(2597), 1963.
- [4] C. H. Bennett. Logical reversibility of computation. *IBM J. Res. Dev.*, 17(525), 1973.
- [5] P. Benioff. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines. *J. Stat. Phys.*, 22(563), 1980.
- [6] R. P. Feynman. Simulating physics with computers. *Int. J. Theor. Phys.*, 21(467), 1982.
- [7] R. P. Feynman. Quantum mechanical computers. *Optics News*, 2(11), 1985.
- [8] D. Deutsch. Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 400(97), 1985.
- [9] P. W. Shor. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In Proceedings, 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, IEEE Press, Los Alamitos, CA(124), 1994.
- [10] M. Hilbert and P. Lopez. The world's technological capacity to store, communicate and compute information. *Science*, 332(60), 2011.
- [11] D. Deutsch. Quantum computational networks. *Proc. R. Soc. London A*, 425(73), 1985.
- [12] D. P. DiVincenzo. Two-bit gates are universal for quantum computation. *Phys. Rev. A*, 51(1015), 1995.
- [13] S. Lloyd. Almost any quantum logic gate is universal. *Phys. Rev. Lett.*, 75(346), 1995.
- [14] D. Dieks. Communication by epr devices. *Phys. Lett. A*, 92(271), 1982.
- [15] W. K. Wootters and W. H. Zurek. A single quantum cannot be cloned. *Nature*, 299(802), 1982.
- [16] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. Quantum computation and quantum information. Cambridge University Press, Cambridge, England, 2000.
- [17] A. Steane. Quantum computing. *Rep. Prog. Phys.*, 61(117), 1998.
- [18] J. Preskill. Lecture notes on quantum information and computation. available at <http://theory.caltech.edu/people/preskill/>, 1998.
- [19] C. H. Bennett and D. P. DiVincenzo. Quantum information and computation. *Nature*, 404(247), 2000.

- [20] G. Casati G. Benenti and G. Strini. Principles of quantum computation and information. World scientific publishing Co. Pte. Ltd., 2004.
- [21] S. Gildert T. Lanting F. Hamze N. Dickson R. Harris A. J. Berkley J. Johansson P. Bunyk E. M. Chapple C. Enderud J. P. Hilton K. Karimi E. Ladizinsky N. Ladizinsky T. Oh I. Perminov C. Rich M. C. Thom E. Tolkacheva C. J. S. Truncik S. Uchaikin J. Wang B. Wilson M. W. Johnson, M. H. S. Amin and G. Rose. Quantum annealing with manufactured spins. *Nature*, 473(194), 2011.
- [22]
- [23] D. A. Lidar A. Mizel and M. Mitchell. Simple proof of equivalence between adiabatic quantum computation and the circuit model. *Phys. Rev. Lett.*, 99(070502), 2007.
- [24] R. Raussendorf and H. J. Briegel. A one-way quantum computer. *Phys. Rev. Lett.*, 86(5188), 2001.
- [25] R. Laflamme E. Knill and G. J. Milburn. A scheme for efficient quantum computation with linear optics. *Nature*, 409(46), 2001.
- [26] J. C. F. Matthews A. Politi and J. L. O'Brien. Shor's quantum factoring algorithm on a photonic chip. *Science*, 325(1221), 2009.
- [27] J. L. O'Brien. Optical quantum computing. *Science*, 318(1567), 2007.
- [28] B. Sanders P. Grangier and J. Vuckovic. Focus on single photons on demand. *New J. Phys.*, 6, 2004.
- [29] A. J. Shields. Semiconductor quantum light sources. *Nature Photon*, 1(215), 2007.
- [30] A. Migdal and J. Dowling. Single-photon detectors, applications, and measurement. *J. Mod. Opt.*, 51, 2004.
- [31] R. H. Hadfield. Single-photon detectors for optical quantum information applications. *Nature Photon*, 3(696), 2009.
- [32] A. Stefanov J. C. F. Matthews, A. Politi and J. L. O'Brien. Manipulation of multiphoton entanglement in waveguide quantum circuits. *Nature Photon*, 3(346), 2009.
- [33] J. I. Cirac and P. Zoller. Quantum computations with cold trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, 74 (4091), 1995.
- [34] D. J. Wineland et al. Experimental issues in coherent quantum-state manipulation of trapped atomic ions. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, 103(259), 1998.
- [35] J. I. Cirac and P. Zoller. A scalable quantum computer with ions in an array microtraps. *Nature*, 404(579), 2001.
- [36] D. Wineland and R. Blatt. Entangled states of trapped atomic ions. *Nature*, 453(1008), 2009.
- [37] T. Monz et al. 14-qubit entanglement: Creation and coherence. *Phys. Rev. Lett.*, 106(130506), 2011.

- [38] O. Morsch and M. Oberthaler. Dynamics of bose-einstein condensates in optical lattices. *Rev. Mod. Phys.*, 78(179), 2006.
- [39] X. Li K. D. Nelson and D. S. Weiss. Imaging single atoms in a three-dimensional array. *Nature Phys.*, 3(556), 2007.
- [40] P. Wrtz et al. Experimental demonstration of single-site addressability in a two-dimensional optical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 103(080404), 2009.
- [41] Y. R. P. Sortais A. Fuhrmanek, R. Bourgain and A. Browaeys. Free-space lossless state detection of a single trapped atom. *Phys. Rev. Lett.*, 106(133003), 2011.
- [42] M. J. Gibbons et al. Nondestructive fluorescence state detection of single neutral atom qubits. *Phys. Rev. Lett.*, 106(133002), 2011.
- [43] J. F. Sherson et al. Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic mott insulator. *Nature*, 467(68), 2010.
- [44] S. Ashhab I. Buluta and F. Nori. Natural and artificial atoms for quantum computation. *Rep. Prog. Phys.*, 74(104401), 2011.
- [45] J. Clarke and F. K. Wilhelm. Superconducting quantum bits. *Nature*, 453(1031), 2008.
- [46] J. Q. You and F. Nori. Superconducting circuits and quantum information. *Phys. Today*, 58(42), 2005.
- [47] J. Q. You and F. Nori. Atomic physics and quantum optics using superconducting circuits. *Nature*, 474(589), 2011.
- [48] M. Hofheinz et al. Synthesizing arbitrary quantum states in a superconducting resonator. *Nature*, 459(546), 2009.
- [49] L. DiCarlo et al. Demonstration of two-qubit algorithms with a superconducting quantum processor. *Nature*, 460(240), 2009.
- [50] M. Neeley et al. Generation of three-qubit entangled states using superconducting phase qubits. *Nature*, 467(570), 2010.
- [51] L. DiCarlo et al. Preparation and measurement of three-qubit entanglement in a superconducting circuit. *Nature*, 467(574), 2010.
- [52] G. Sun et al. Tunable quantum beam splitters for coherent manipulation of a solid-state tripartite qubit system. *Nature Commun.*, 1(51), 2010.
- [53] T. D. Ladd et al. Quantum computers. *Nature*, 464(45), 2010.
- [54] J. J. L. Morton et al. Solid-state quantum memory using the ^{31}P nuclear spin. *Nature*, 455(1085), 2008.

- [55] D. Hanneke et al. Realization of a programmable two-qubit quantum processor. *Nature Phys.*, 6 (13), 2010.
- [56] R. Hanson et al. Spins in few-electron quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, 79(1217), 2007.
- [57] D. M. V. Guredev et al. Quantum register based on individual electronic and nuclear spin qubits in diamond. *Science*, 316(1312), 2007.
- [58] K. C. Nowack et al. Coherent control of a single electron spin with electric fields. *Science*, 318 (1430), 2007.
- [59] M. H. Mikkelsen et al. Optically detected coherent spin dynamics of a single electron in a quantum dot. *Nature Phys.*, 3(770), 2007.
- [60] X. Xu et al. Coherent optical spectroscopy of a strongly driven quantum dot. *Science*, 317(929), 2007.
- [61] B. D. Gerardot et al. Optical pumping of a single hole spin in a quantum dot. *Nature*, 451(441), 2008.
- [62] F. H. L. Koppens et al. Driven coherent oscillations of a single electron spin in a quantum dot. *Nature*, 442(766), 2006.
- [63] J. Berezovsky et al. Picosecond coherent optical manipulation of a single electron spin in a quantum dot. *Science*, 320(349), 2008.
- [64] F. Jelezko et al. Observation of coherent oscillation of a single nuclear spin and realization of a two-qubit conditional quantum gate. *Phys. Rev. Lett.*, 93(130501), 2004.
- [65] J. R. Petta et al. Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. *Science*, 309(2180), 2005.
- [66] P. Neumann et al. Multipartite entanglement among single spins in diamond. *Science*, 320(1326), 2008.
- [67] A. F. Fahmy D. G. Cory and T. F. Havel. Ensemble quantum computing by nmr- spectroscopy. *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, 94(1634), 1997.
- [68] N. A. Gershenfeld and I. L. Chuang. Bulk spin resonance quantum computation. *Science*, 275 (350), 1997.
- [69] C. Negrevergne et al. Benchmarking quantum control methods on a 12-qubit system. *Phys. Rev. Lett.*, 96(170501), 2006.
- [70] L. M. K. Vandersypen et al. Experimental realization of shorj's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance. *Nature*, 414(883), 2001.
- [71] R. Laflamme et al. Introduction to nmr quantum information processing. arXiv: 0207172 v1, 2002.
- [72] S. Lloyd. Universal quantum simulators. *Science*, 273(1073), 1996.

- [73] J. T. Gluekert D. Porras A. Friedenauer, H. Schmitz and T. Schaez. Simulating a quantum magnet with trapped ions. *Nature Phys.*, 4(757), 2008.
- [74] T. Esslinger T. W. Haesch M. Greiner, O. Mandel and I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(39), 2002.
- [75] F. Zaehringer E. Solano R. Blatt R. Gerritsma, G. Kirchmair and C. F. Roos. Quantum simulation of the dirac equation. *Nature*, 463(68), 2010.
- [76] B. P. Lanyon et al. Towards quantum chemistry on a quantum computer. *Nature Chem.*, 2(106), 2010.
- [77] A. Barenco D. Deutsch and A. Ekert. Universality in quantum computation. *Proc. R. Soc. London A*, 449(669), 1995.