

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，么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 核磁共振量子计算	1
1.1 NMR 系统	1
1.1.1 内部哈密顿量	2
1.1.2 外部哈密顿量	5
1.1.3 弛豫和退相干机制	8
1.2 NMR 中的脉冲技术	9
1.2.1 基本脉冲技术及单量子比特门的实现	9
1.2.2 脉冲重聚及双量子比特门的实现	12
1.2.3 强调制脉冲及 GRAPE 脉冲技术	15
1.3 初态制备及测量读出	20
1.3.1 NMR 中的赝纯态制备方法	20
1.3.2 NMR 中的读出手段	28
1.3.3 NMR 中的量子态重构	31
1.4 强耦合液晶 NMR 体系量子计算	34
1.4.1 强耦合体系的处理方法	34
1.4.2 液晶 NMR 量子计算的具体过程	36
1.4.3 利用 4 qubit 液晶样品绝热分解 143	39
1.5 小结	44
参考文献	47

表格

插图

1.1	(a) 几种常用的自旋 1/2 粒子的天然丰度及 Larmor 频率。(b) 自旋 1/2 粒子的能级图。	2
1.2	两个未耦合的自旋的能级图 (虚线) 及以式 1.8 形式耦合的哈密顿量的能级图 (实线)。 \hbar 已经被忽略掉。	5
1.3	偏共振情况下, 旋转坐标系中的旋转轴的变化示意图。	7
1.4	常用的形状脉冲之间的脉冲宽度 (左) 与激发频率 (右) 比较。	10
1.5	各种形状脉冲之间的比较。	11
1.6	CNOT 门的 Bloch 球表示。目标比特 2 刚开始处于 $ 0\rangle$ 态, 实线和虚线分别表示控制比特 1 处于 $ 0\rangle$ 和 $ 1\rangle$ 时 qubit 2 所处的状态。	13
1.7	四比特系统中只保留 J_{12} 形式的耦合的脉冲重聚序列。每一小段所代表的演化时间是相同的, 黄色的矩形代表 π 脉冲, 用来翻转当前自旋的状态。	14
1.8	重聚序列 $H(12)$ 的形式。	15
1.9	在 GRAPE 算法中, 每一小步的射频场幅度因子都是常数, 而上下箭头表示的是幅度梯度。正是通过计算幅度梯度来改善整个 GRAPE 脉冲的效果 (即 Φ_0 的值)。	19
1.10	可扩展的 6 qubit 的 PPS 制备网络图。	27
1.11	4 qubit 系统上制备猫态的逻辑网络图, 仅需要 Hadamard 操作和 CNOT 操作。	28
1.12	3 qubit 系统上的猫态 PPS 制备法。(a) 从初态 ZII 出发, 我们可以得到含有三量子相干 $ 000\rangle\langle 111 + 111\rangle\langle 000 $ 的末态 YYX 。(b) 从三量子相干 $ 000\rangle\langle 111 + 111\rangle\langle 000 $ 出发, 可以得到逻辑标记后的纯态 $X 00\rangle\langle 00 $ 。取自 [Nature 404, 368 (2000) ^[30]]。	29
1.13	12 qubit 系统上的猫态 PPS 制备网络图。取自 [Phys. Rev. Lett. 96, 170501 (2006) ^[32]]。	29
1.14	2, 3, 4 qubit 的液晶样品结构。苯环上的 ^1H 被用作 qubit。	37
1.15	$N = 143$ 分解中用到的二进制乘法表。 $N = p \times q$ 中的所有数值都被转化为了二进制, 然后利用这个乘法结构可以列出一个线性方程组。	40

- 1.16 (a) 143 分解中, 最低的三个能级变化的示意图。初始哈密顿量中的 g 因子设为 0.6。(b) $k = 1 - 5$ 对应图 (a) 中 5 个点的布居度分布。 $k = 6$ 则是实验上得到的末态的布居度分布。可以看到, 最终所有的布居度几乎都处于 $|0110\rangle\langle 0110|$ 和 $|1001\rangle\langle 1001|$ 上, 表示 143 分解的结果为 $p = 11, q = 13$ 或者 $p = 13, q = 11$ 。 41
- 1.17 143 分解实验中用到的 4 qubit 液晶 NMR 样品。(a) 1-bromo-2-dichloro-benzene 的分子结构。(b) 热平衡态的 NMR 谱线。跃迁的序号是依据谱线频率的降序排列的。(c) 与 (b) 图相关的能级跃迁图。 42
- 1.18 (a) 143 分解中制备 PPS 用到的 GRAPE 脉冲。蓝线和红线分别代表加在 \hat{x} 方向和 \hat{y} 方向的射频场强度的变化。(b) 数值模拟的制备 PPS 的结果, 这里只给出了实部。可以看出, 几乎所有的信号都集中在布居度 $|0000\rangle\langle 0000|$ 上, 而这条峰一般被用作 NMR 量子计算测量的基准。 43
- 1.19 (a) NMR 实验上小角度观测的 PPS 谱线及输出态 ρ_{out} 的谱线。蓝线为实验结果, 而红线为理论结果。谱线上标的 No. 33 和 No. 3 对应于图 1.17(b) 中的序号。 44

第1章 核磁共振量子计算

1938 年, Rabi 发现处于磁场中的原子核会沿着磁场方向呈正向或反向平行排列, 而在施加射频场之后, 这些原子核的自旋方向会发生翻转, 这就是著名的拉比振荡 (Rabi oscillation)^[1]。Rabi 振荡是人类关于原子核与外加磁场和射频场的相互作用现象的最早认识, 而 Rabi 本人也赢得了 1944 年的诺贝尔物理奖。1946 年, Bloch 和 Purcell 则发现处于外磁场中的特定核自旋, 比如 ^1H , ^{31}P 等, 会吸收特定频率的射频场能量, 这是人类对于核磁共振最初的认识^[2], 两人也分享了 1952 年的诺贝尔物理奖。

后来, 人们发现核磁共振 (Nuclear Magnetic Resonance, 以后均简称为 NMR) 现象有非常多的应用。在化学上, NMR 可以用来解析分子结构, 从最早期的简单一维氢谱到后来的 ^{13}C 谱, 二维谱等高级谱图, NMR 可以分析的分子结构越来越复杂。在化学领域, NMR 谱与紫外光谱、红外光谱和质谱并称为“四大名谱”, 而我国的高中化学教材里也加入了 NMR 介绍的章节。除了化学上, 医学家们也发现人体中水分子的氢原子可以产生核磁共振现象, 可以通过这一现象获取人体内水分子的分布信息, 进而精确绘制人体的内部结构, 这也就是目前在医学上广泛应用的核磁共振成像技术 (MRI)。

另一方面, 超过 50 年的 NMR 技术的发展成熟使人们早已可以精确操控 NMR 中耦合起来的两能级量子系统。在量子计算的概念提出后, NMR 也自然的成为非常有潜力的实验验证量子计算方案的平台, 并一直作为各个量子计算潜在方案中操控比特数最多, 量子算法最复杂的一个方案而被广泛研究, 而在 NMR 量子计算中发展出的许多技术不仅可以应用在 NMR 在其他领域的研究上, 也经常被借鉴于其他量子计算平台。在本章中, 我们将从 NMR 如何进行量子计算讲起, 包括内部和外部哈密顿量形式, 脉冲技术和逻辑门操作, 以及初态制备和测量读出等实现量子计算机的各方面要求。通过这些内容, 我们会具体分析 NMR 量子计算的利弊。而在本章的最后, 我们将给出如何利用并不常见的强耦合体系 NMR 做量子计算, 并给出实验上利用四比特强耦合体系进行 143 大数分解的实例。

1.1 NMR 系统

对于 NMR 系统最简单的描述就是内部系统哈密顿量与外部控制哈密顿量联合进行动力学演化的过程。系统哈密顿量给出在静磁场中单个的, 或者耦合起来的核自旋的能量形式, 而控制哈密顿量则是来自于以系统的共振频率外加

的射频脉冲。一般来说，NMR 中我们常用的是旋转坐标系，在这个坐标系里考虑问题会相当简单。

1.1.1 内部哈密顿量

在一个沿 \hat{z} 方向的静磁场 B_0 中，自旋 $1/2$ 的粒子 (在本论文中，我们不考虑更高阶的自旋) 的动力学演化将被其系统哈密顿量主导

$$H_0 = -\hbar\gamma B_0 I_z = -\hbar\omega_0 I_z = \begin{pmatrix} -\hbar\omega_0/2 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_0/2 \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

其中 γ 是原子核的旋磁比， $\omega_0/2\pi$ 是 Larmor 频率， I_z 是 \hat{z} 方向的核自旋算符。 I_x, I_y, I_z 和著名的 Pauli 算符有如下的对应形式

$$\sigma_x = 2I_x, \sigma_y = 2I_y, \sigma_z = 2I_z, \quad (1.2)$$

并且

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

对于这种系统哈密顿量的形式更直观的理解是，本征态 $|0\rangle$ (有时候也叫 $|\uparrow\rangle$) 的能量本征值将比本征态 $|1\rangle$ (有时候也叫 $|\downarrow\rangle$) 小 $\hbar\omega_0$ ，这种能量劈裂叫做 Zeeman 劈裂。

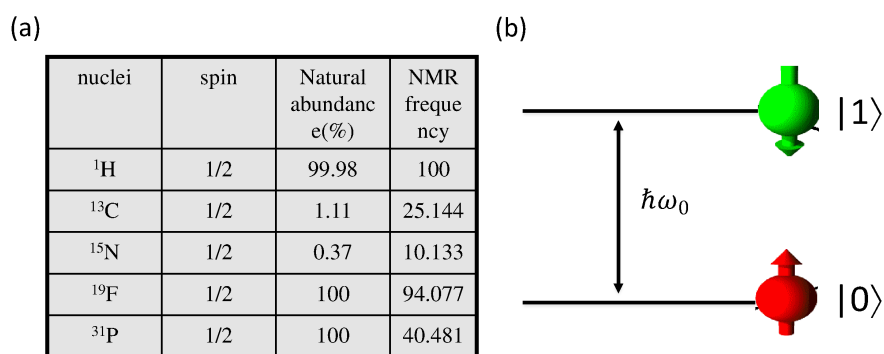


图 1.1 (a) 几种常用的自旋 $1/2$ 粒子的天然丰度及 Larmor 频率。(b) 自旋 $1/2$ 粒子的能级图。

我们可以近似地把时间演化算子 $U = e^{-iHt}$ 理解为一个矢量在 Bloch 球上绕着 \vec{B}_0 的进动过程。方便起见，我们把 Bloch 球的 \hat{z} 轴定义为 \vec{B}_0 方向，而 $|0\rangle$ 沿着 $+\hat{z}$ 方向， $|1\rangle$ 沿着 $-\hat{z}$ 方向。对于液体 NMR 的情况来说， B_0 的典型值为

5-15T，导致进动频率 ω_0 的大小为几百 MHz，也就是射频的范围。

不同种类的核自旋可以很容易地辨别，因为它们的旋磁比 γ 不同，从而拥有相差很远的 Larmor 频率。对于相同的原子核来说，它们也有不同的频率，叫做化学位移。化学位移来源于环绕原子核周围的电子云产生的磁场的部分屏蔽作用，该屏蔽的大小取决于原子核周围的电子分布，因此具有不同核外电子环境的原子核具有不同的化学位移。典型的化学位移范围依赖于不同的原子核，比如对 ^1H 来说，它的范围约为 10ppm(百万分之一，NMR 常用的频率单位)，对 ^{13}C 和 ^{19}F 则约为 200ppm。在静磁场 B_0 的大小为 10T 时，化学位移的值大概从几 kHz 到数十 kHz，相比于 Larmor 频率的百万 MHz 的数量级来说还是非常小的。

一般来说，化学位移是空间各向异性的，要用张量来描述。在液体 NMR 中，由于分子间的快速滚动，各向异性的影响被平均掉了，而在固体 NMR 中，各向异性表明化学位移是依赖于分子取向的，也就是和静磁场 B_0 的夹角。

不同于孤立的原子核的哈密顿量，有相互作用的原子核主要存在两种不同的相互作用机制：直接的偶极-偶极耦合以及间接的标量耦合。

(a) 直接耦合

偶极-偶极耦合的相互作用类似于两个临近的条形磁体的相互作用，它纯粹是通过空间产生相互作用的，并不需要第三方介质。该作用主要依赖于核间矢量 \vec{r}_{ij} ，可以被如下哈密顿量形式描述

$$H_D = \sum_{i < j} \frac{\mu_0 \gamma_i \gamma_j \hbar}{4\pi |\vec{r}_{ij}|^3} (\vec{I}^i \cdot \vec{I}^j - \frac{3}{|\vec{r}_{ij}|^2} (\vec{I}^i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{I}^j \cdot \vec{r}_{ij})), \quad (1.4)$$

其中 \vec{I}^i 自旋 i 的磁化矢量。在高场情况下，该耦合形式可以近似为

$$H_D = \sum_{i < j} \frac{\mu_0 \gamma_i \gamma_j \hbar}{8\pi |\vec{r}_{ij}|^3} (1 - 3\cos^2\theta_{ij})(3I_z^i I_z^j - \vec{I}^i \cdot \vec{I}^j), \quad (1.5)$$

θ_{ij} 是 B_0 和 \vec{r}_{ij} 的夹角。当化学位移之差 $|\omega_0^i - \omega_0^j|$ 比耦合强度大很多时，耦合项中的横向分量可以被忽略掉， H_D 可以进一步被简化为

$$H_D = \sum_{i < j} \frac{\mu_0 \gamma_i \gamma_j \hbar}{8\pi |\vec{r}_{ij}|^3} (1 - 3\cos^2\theta_{ij}) I_z^i I_z^j. \quad (1.6)$$

这个形式和下面介绍的标量耦合形式类似。

在液体 NMR 中，不论是分子间的偶极耦合或者分子内部的偶极耦合，由于分子的快速滚动都已经被平均掉了。而在固体 NMR 中，我们可以通过施加

多脉冲序列^[3] 或者魔角旋转技术实现类似的简单哈密顿量形式。

(b) 间接耦合

分子中核自旋的第二种相互作用机制就是 J 耦合, 或者叫标量耦合。这种相互作用机制来源于原子间化学键中的共享电子, 或者电子波函数的交叠产生的费米接触相互作用, 其大小依赖于相互作用的原子核种类, 并随着化学键数目的增多而减少。典型的 J 耦合强度从几个 Hz(三键或四键耦合) 到几百 Hz(单键耦合) 不等。 J 耦合的哈密顿量形式为

$$H_J = \hbar \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} \vec{I}^i \cdot \vec{I}^j = \hbar \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} (I_x^i I_x^j + I_y^i I_y^j + I_z^i I_z^j), \quad (1.7)$$

J_{ij} 是自旋 i 和自旋 j 之间的相互作用强度。和偶极耦合的形式类似, 在弱耦合近似 ($|\omega_0^i - \omega_0^j| \gg 2\pi|J_{ij}|$) 的情况下, 该形式可以简化为

$$H_J = \hbar \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} I_z^i I_z^j. \quad (1.8)$$

对于不同种类的核自旋该条件是容易满足的, 而对于很多分子内的同种核自旋该条件也可能满足。

在弱耦合近似下, 标量耦合作用可以用有效磁场的概念来理解: 除了外加的静磁场 \vec{B}_0 外, 核自旋还会感受到由邻近自旋产生的沿 $\pm \hat{z}$ 方向的静磁场。如下图所示, 这个附加磁场会使能级产生移动。当自旋 j 处于 $|0\rangle$ 时, 自旋 i 的 Larmor 频率将移动 $-J_{ij}/2$; 当自旋 j 处于 $|1\rangle$ 时, 自旋 i 的 Larmor 频率将移动 $J_{ij}/2$ 。

对于耦合起来的两个自旋系统来说, 自旋 i 的频率谱线包含分离的两条, 它们之间的距离为 J_{ij} , 且其中心频率为 ω_0^i 。两条谱线是对应于自旋 j 所处的状态的。相应地, 对于三个两两耦合的自旋来说, 每个自旋将包含四条谱线, 而每添加一个自旋, 谱线的数目将翻倍。

所有两两耦合的大小可以通过读出不同自旋的谱线劈裂来得到。 J 耦合的符合则可以用适当的核选脉冲序列, 例如二维 COSY 实验^[4] 或者线选脉冲的连续激发来检测。注意仅仅通过简单的 NMR 谱线来确定 J 耦合的符号是不可能的。

综上所述, 对于 n 个两两耦合的自旋系统来说, 其最简单的哈密顿量形式为

$$H_{\text{sys}} = -\hbar \sum_i \omega_0^i I_z^i + \hbar \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} I_z^i I_z^j. \quad (1.9)$$

在绝大多数的 NMR 量子计算实验中用到的自旋系统都可以用这个哈密顿量形

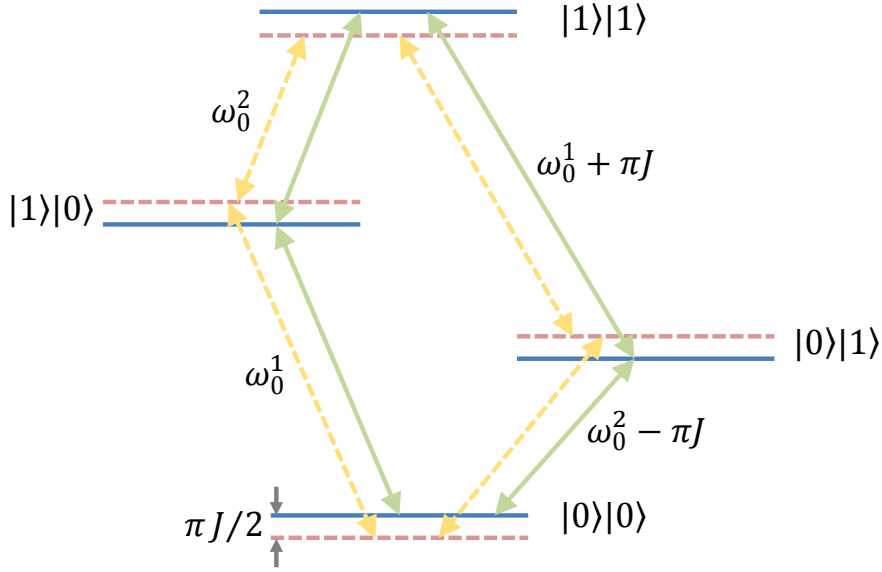


图 1.2 两个未耦合的自旋的能级图 (虚线) 及以式1.8形式耦合的哈密顿量的能级图 (实线)。 \hbar 已经被忽略掉。

式来描述。

1.1.2 外部哈密顿量

本小节我们转到如何操控 NMR 系统上。对处于 \hat{z} 方向静磁场中的自旋 $1/2$ 粒子来说，我们可以通过外加电磁场 $\vec{B}_1(t)$ 来进行操控。该电磁场可以加在 $\hat{x} - \hat{y}$ 平面内的任意角度，其频率为 ω_{rf} ，该频率的大小处于或接近自旋的进动频率 ω_0 。对于处于射频场中的单自旋来说，其哈密顿量形式为

$$H_{rf} = -\hbar\gamma B_1 [\cos(\omega_{rf}t + \phi)I_x - \sin(\omega_{rf}t + \phi)I_y], \quad (1.10)$$

其中 B_1 和 ϕ 分别是射频场的强度和相位。射频场频率 $\omega_1 = \gamma B_1$ 的典型值为液体 NMR 中的 50kHz，固体 NMR 中几百 kHz。

对于 n 个自旋，射频场的哈密顿量为

$$H_{rf} = -\sum_i^n \hbar\gamma_i B_1 [\cos(\omega_{rf}t + \phi)I_x^i - \sin(\omega_{rf}t + \phi)I_y^i]. \quad (1.11)$$

一般来说，在实验室坐标系中外磁场在固定的、和静磁场垂直的轴上振荡。这个振荡可以分解为两部分反方向旋转的磁场：一个使自旋在其进动方向上以频率 ω_{rf} 旋转，因此可以将旋转频率设在核自旋的共振频率附件；另一部分则与自旋的进动方向相反，因此距离其共振频率相当远，大概为 $2\omega_0$ 。这部分唯

一的影响是 Larmor 频率上的一个几乎可以忽略的漂移，称为 Bloch-Siegert 漂移^[5]。

注意到与系统中不可控的 Larmor 进动和耦合项不同，外加射频场的强度 B_1 和相位 ϕ 都可以随时间改变而加以控制。我们很快就会看到，正是对于射频场的强度，相位及频率的控制形成了 NMR 量子计算的核心。

在常用的实验室坐标系中，由于要同时考虑静磁场和旋转磁场的机制，这时的 NMR 系统处理起来会相当复杂。如果我们引入一个绕 \hat{z} 轴以 ω_{rf} 的频率旋转的坐标系，那么这个问题将大大简化。旋转坐标系的一般形式为

$$|\psi\rangle^{rot} = e^{-i\omega_{rf}tI_z} |\psi\rangle. \quad (1.12)$$

把 $|\psi\rangle$ 的形式代入薛定谔方程

$$i\hbar\left(\frac{d|\psi\rangle}{dt}\right) = H|\psi\rangle, \quad (1.13)$$

其中哈密顿量为

$$H = -\hbar\omega_0 I_z - \hbar\omega_1 [\cos(\omega_{rf}t + \phi)I_x - \sin(\omega_{rf}t + \phi)I_y], \quad (1.14)$$

我们可以得到

$$i\hbar\left(\frac{d|\psi\rangle^{rot}}{dt}\right) = H^{rot} |\psi\rangle^{rot}, \quad (1.15)$$

其中

$$H^{rot} = -\hbar(\omega_0 - \omega_{rf})I_z - \hbar\omega_1 [\cos\phi I_x - \sin\phi I_y]. \quad (1.16)$$

特别地，如果我们取 $\omega_{rf} = \omega_0$ ，上式中的第一项也将消掉。对于旋转坐标系中的观察者来说，他将看到自旋只是简单的绕着 \vec{B}_1 轴进动，这种现象叫做章动 (nutation)，并且章动的轴由相位 ϕ 控制。

如果射频场与核自旋的频率是偏共振的话，假设为 $\Delta\omega = \omega_0 - \omega_{rf}$ ，那么旋转坐标系中的自旋将沿一个与 \hat{z} 轴夹角为 α 的轴进动

$$\alpha = \arctan(\omega_1/\Delta\omega), \quad (1.17)$$

并且其频率为

$$\omega'_1 = \sqrt{\Delta\omega^2 + \omega_1^2}. \quad (1.18)$$

可以看出，当自旋远离共振频率时，射频场对这个自旋几乎是没有任何影响的，因为当 $|\Delta\omega| \gg \omega_1$ 时 α 非常小。也就是说，当所有自旋都有分离的很好的

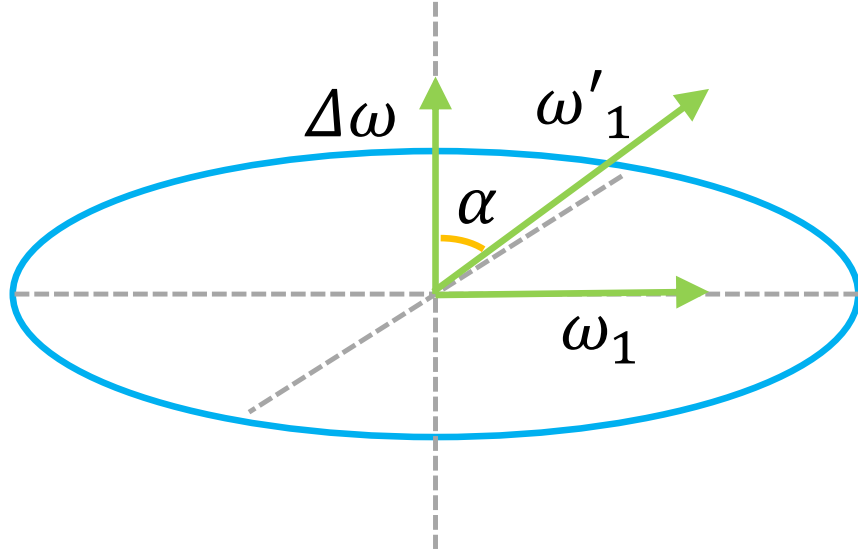


图 1.3 偏共振情况下，旋转坐标系中的旋转轴的变化示意图。

Larmor 频率的话，原则上我们可以选择性地旋转其中一个，同时对其他自旋没有任何操作。

和上面的旋转频率为 ω_{rf} 不同，我们也可以选择频率为 ω_0 的旋转坐标系，那么

$$H^{rot} = -\hbar\omega_1(\cos[(\omega_{rf} - \omega_0)t + \phi]I_x - \sin[(\omega_{rf} - \omega_0)t + \phi]I_y). \quad (1.19)$$

除非 $\omega_{rf} = \omega_0$ ，这个变化并不能给出简洁的不含时射频哈密顿量。但对于不同的分离核自旋来说，该形式可以针对不同的核自旋很好的给出旋转坐标系的形式

$$|\psi\rangle^{rot} = [\prod_i e^{-i\omega_0^i t I_z^i}] |\psi\rangle. \quad (1.20)$$

如果是多旋转坐标系的话，射频场的哈密顿量可以类似给出

$$H^{rot} = \sum_{i,r} -\hbar\omega_1^r(\cos[(\omega_{rf}^r - \omega_0^i)t + \phi^r]I_x^i - \sin[(\omega_{rf}^r - \omega_0^i)t + \phi^r]I_y^i), \quad (1.21)$$

其中强度 ω_1^r 和相位 ϕ^r 依然是可控的。

在上式的射频场作用下，系统哈密顿量中的单量子项 I_z^i 将由于旋转坐标系的选取而被消掉，而余下的耦合项 $J_{ij}I_z^i I_z^j$ 并不会演化，所以在多旋转坐标系中，NMR 体系的哈密顿量可以表示为

$$H = H_{sys} + H_{control}, \quad (1.22)$$

其中内部哈密顿量为

$$H_{sys} = \hbar \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} I_z^i I_z^j, \quad (1.23)$$

而外部哈密顿量为

$$H_{control} = \sum_{i,r} -\hbar\omega_1^r (\cos[(\omega_{rf}^r - \omega_0^i)t + \phi^r] I_x^i - \sin[(\omega_{rf}^r - \omega_0^i)t + \phi^r] I_y^i). \quad (1.24)$$

1.1.3 弛豫和退相干机制

利用核自旋作为 qubit 的一个优点就是 NMR 系统和周围的环境有很好的隔离，使得其退相干时间相比于动力学演化的时间可以很长。我们这里的讨论仅局限于封闭系统的动力学演化，当然很多时候这个近似有一定的限制性。

NMR 系统与环境的相互作用可以通过一个外加的哈密顿量 H_{env} 来描述。相比于 H_{sys} 或 $H_{control}$ 来说它的作用比较小。量子信息的丢失，也就是退相干，正是源于该相互作用机制，一般又由两个比例来描述：退极化过程 (depolarizing) T_1 以及退相位 (dephasing) 过程 T_2 。

T_1 是由自旋-晶格相互作用引起的，或者说在 Larmor 频率尺度上损失能量的激发模式产生的，比如振动量子，顺磁离子，同溶剂间存在离子交换的化学反应，或者有高阶磁矩的自旋等。在选择比较好的分子及溶剂中， T_1 的尺度大概为数十秒。NMR 中的 T_1 机制类似于其他物理系统中的非弹性散射，它会带来能量的损失。

T_2 主要源于系统哈密顿量中没有被完全平均掉的自旋-自旋耦合。比如，在液体 NMR 分子中，一个分子内的自旋可能和其他分子中的自旋有很弱的长程相互作用。其他的一些机制，例如化学位移的空间各向异性，顺磁离子等也对 T_2 的大小有一定的贡献。尽管如此，在好的样品以及高磁场的 NMR 谱仪中，溶剂分子中的 T_2 可以轻易达到秒量级。 T_2 机制类似于其他物理系统中的弹性散射，系统并不会有任何的能量损失。

对于弛豫机制仅用两个参数来描述其实是对真实物理系统的过度简化，特别在耦合的自旋系统中，还有耦合弛豫机制在产生作用^[6,7]。尽管如此，独立的自旋退相干模型依然非常有用，它可以很好的抓住主要效应，因为 NMR 量子计算中的脉冲序列时间基本都是短于 T_2 的。

1.2 NMR 中的脉冲技术

前面已经提到，任何么正操作都可以拆解为任意角度的单比特旋转门和两比特受控门，比如 CNOT 门的组合。换句话说，如果要证明 NMR 量子计算是普适的，我们只需要能够有效实现任意角度的单比特旋转和 CNOT 门就可以了。在本节中，我们将介绍如何利用 NMR 脉冲技术实现量子计算所需的逻辑操作。

1.2.1 基本脉冲技术及单量子比特门的实现

对于一个作用时间为 t_{pw} 的射频脉冲来说，如果它的强度为 ω_1 且 $\omega_{rf} = \omega_0$ ，那么其作用的自旋感受到的么正操作为

$$U = \exp[i\omega_1(\cos\phi I_x - \sin\phi I_y)t_{pw}]. \quad (1.25)$$

该操作 U 描述的是 Bloch 球上在 $\hat{x} - \hat{y}$ 平面内绕相位为 ϕ 的轴转 θ 角

$$\theta = \omega_1 t_{pw}. \quad (1.26)$$

那么，对一个精心设计过时间和相位的脉冲来说，它可以实现绕 \hat{x} 轴的 $\pi/2$ 旋转，简记为 $R_x(\pi/2)$ 或者 X 。如果把脉冲时间加倍，就可以实现 $R_x(\pi)$ ，简记为 X^2 。通过改变射频脉冲的相位，我们也可以执行 Y 和 Y^2 旋转。

原则上 \hat{x} 和 \hat{y} 方向的任意角度旋转可以实现所有的单比特任意角度旋转。比如要实现 Z 我们有两种基本的 X 和 Y 的组合脉冲可以利用

$$Z = XY\bar{X} = Y\bar{X}Y. \quad (1.27)$$

要注意的一点是这里的操作是从右往左加的，并且对于以后出现的任何复合么正操作都是如此。

我们可以通过施加一个足够长的软脉冲 (soft pulse) 选择性地激发一个自旋，同时不影响到分子中的其他自旋。这种软脉冲，或者叫形状脉冲 (shape pulse) 首先要把中心频率设置在要激发的自旋共振频率上，只影响一定频率范围内的核自旋 (显然这个频率范围内不能覆盖其他的核自旋)。它从一个很低的强度 B_1 开始，逐渐加大到最大强度，再逐渐降低直至脉冲末尾。一般来说，形状脉冲要分为几十甚至几百小片，通过改变每一小片的强度和相位，组合得到整个脉冲的强度和相位大小。对于脉冲宽度为 t_{pw} 的形状脉冲来说，傅里叶变

换大概告诉我们它的频率范围为 $1/t_{pw}$ 。当然，这只是一个大致的结果，因为傅里叶变换是线性变化而射频场的变化是正弦型的，要得到精确的频率覆盖范围要用到其他的计算方法。

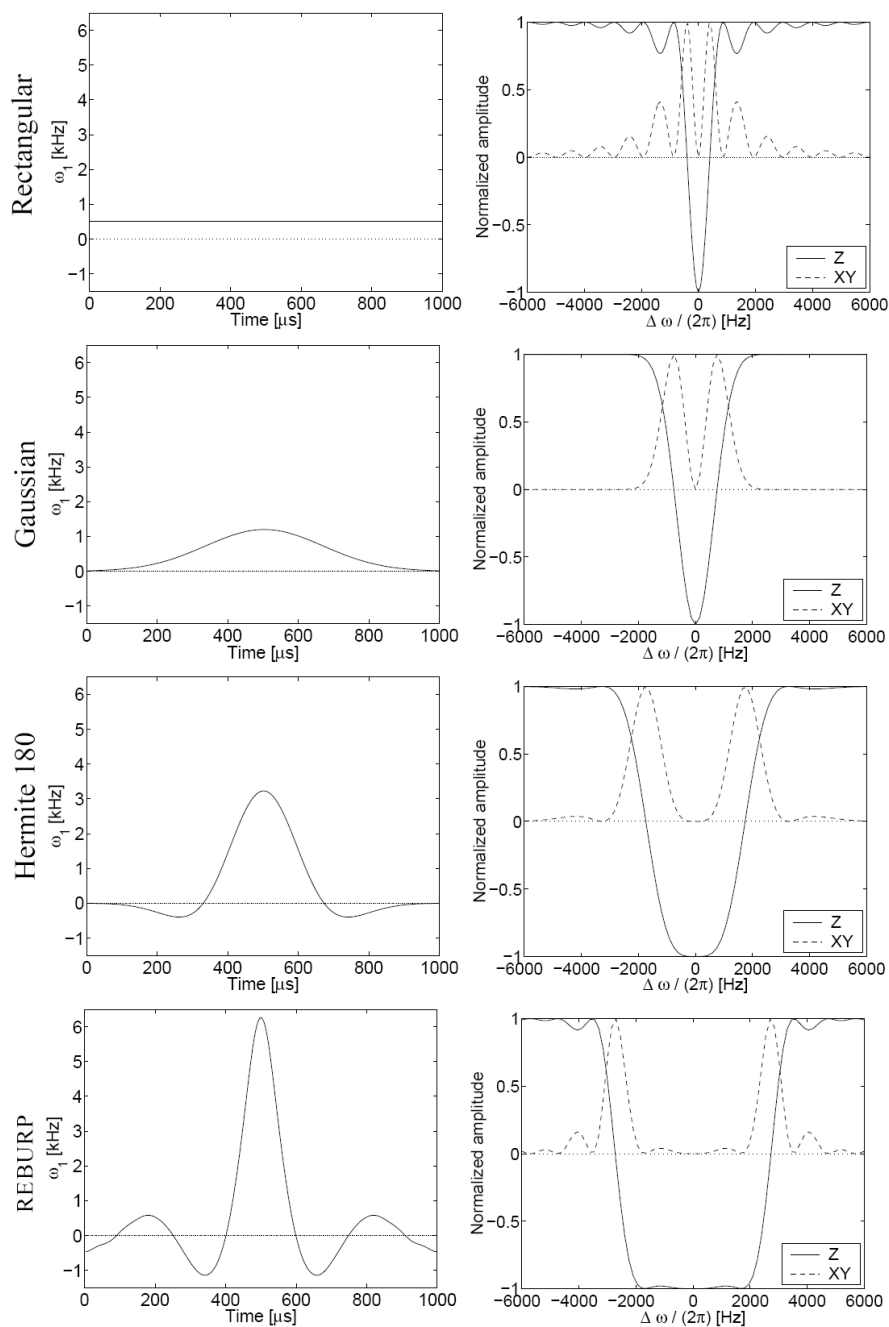


图 1.4 常用的形状脉冲之间的脉冲宽度 (左) 与激发频率 (右) 比较。

衡量形状脉冲的参数和指标很多，包括：

- 选择性：激发带宽与脉冲宽度的乘积，这个值越低说明选择的效果更好。这点很好理解，比如同样要选 1000Hz 的频率范围，如果形状脉冲 A 只用 1ms 就可以做到，而 B 需要 10ms，显然 A 的选择性要比 B 好。

- 跃迁范围：除了需要的激发频率外，形状脉冲会影响到其他频率区域，这些区域就是跃迁范围。当然这个值越小越好。

- 脉冲强度：对于给定的脉宽，形状脉冲要求的峰值强度。这个值越低则该形状脉冲的要求越低。

- 自回聚能力：能够回聚掉选择自旋与其他自旋间的 J 耦合的能力。这个值越大说明脉冲效果越好。

- 鲁棒性：对于实验不完美性，比如射频场不均匀性等各种误差的灵敏度。这个值越大说明形状脉冲的抗噪声能力越强。

- 普适性：形状脉冲是不是对任意的输入态或者只对特定输入态可以执行完美的旋转操作。

下表总结了常用的形状脉冲的特点^[8-11]。这些脉冲都是普适的，因为一般用于量子计算的态是任意态。明显可以看出，没有哪一个形状脉冲是所有参数都是最优的，具体的脉冲选择要根据实验需求来定。比如，当化学位移的差别很大时，就没有必要要很小的跃迁范围。

	选择性	跃迁范围	强度	自回聚能力	鲁棒性
矩形	弱	非常宽	最小	无	好
Gauss 90	极好	宽	低	一般	好
Gauss 180	极好	宽	低	一般	好
Hrm 90	适中	适中	一般	好	一般
Hrm 180	好	适中	一般	非常好	一般
UBURP 90	弱	窄	高	极好	弱
REBURP 180	弱	窄	高	极好	弱
AV 90	弱	适中	一般	好	一般

图 1.5 各种形状脉冲之间的比较。

对于异核分子来说，由于各个核之间的 Larmor 频率相差很大，所以激发不同核的脉冲几乎不需要选择性，所以其脉宽可以很短，比如 $10\mu\text{s}$ 。这种脉冲的覆盖范围很大，一般可以覆盖所有同种原子核的频率。由于其强度相对于软脉冲非常大，所以叫做硬脉冲 (hard pulse)。当然对于同核分子，比如 ^{13}C 标记的 Alanine 中的三个 ^{13}C ，要激发其中一个自旋的话我们不能用硬脉冲而只能选择软脉冲，或者后面将提到的更优秀的 GRAPE 脉冲。

1.2.2 脉冲重聚及双量子比特门的实现

如果来实现 CNOT 门，最常见的方法是利用自旋间的耦合哈密顿量演化。从 NMR 的系统哈密顿量形式中，我们可以得到时间演化算子

$$U_J(t) = e^{-i2\pi J I_z^1 I_z^2 t}, \quad (1.28)$$

或者其矩阵形式

$$U_J(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\pi J t/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi J t/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi J t/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi J t/2} \end{pmatrix}. \quad (1.29)$$

如果选择演化时间为 $t = 1/2J$ 并在各个比特上加一个 $\pi/2$ 的相移，我们将得到一个控制相位门 (忽略掉全局相位)

$$U_{CPHASE} = \sqrt{-iZ_1 Z_2} U_J(1/2J) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

CPHASE 门的形式和 CNOT 门已经非常接近，控制比特上只差一个相位，而目标比特上只差简单的单比特旋转，

$$U_{CNOT} = iZ_1^2 \bar{Y}_2 U_{CPHASE} Y_2 = \sqrt{iZ_1 \bar{Z}_2 X_2} U_J(1/2J) Y_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

执行 U_{CNOT} 序列的核心是 $X_2 U_J(1/2J) Y_2$ ，其作用可以通过下图形象说明：假设两个自旋都处于 $\pm\hat{z}$ 。首先自旋 2 绕 \hat{y} 旋转 $\pi/2$ ，到达 \hat{x} 轴。然后整个系统在相互作用哈密顿量下自由演化 $1/2J$ 的时间。由于自旋 2 的进动频率依赖于自旋 1 所处的状态 $|1\rangle$ 或者 $|0\rangle$ 而会移动 $\pm J/2$ ，自旋 2 在自由演化后所处的状态也会依赖于自旋 1 所处的状态而处于 $+\hat{y}$ 或 $-\hat{y}$ 轴。最后，自旋 2 绕 \hat{x} 旋转 $\pi/2$ 。如果自旋 1 处于 $|0\rangle$ ，自旋 2 将回到 $+\hat{z}$ ；如果自旋 1 处于 $|1\rangle$ ，自旋 2 将回到 $-\hat{z}$ 。

整体来看，当且仅当自旋 1 处于 $|1\rangle$ 时，自旋 2 进行了翻转，而式 1.31 中的 \hat{z} 旋转则可以把所有的矩阵元调整到和 U_{CNOT} 完全一样。

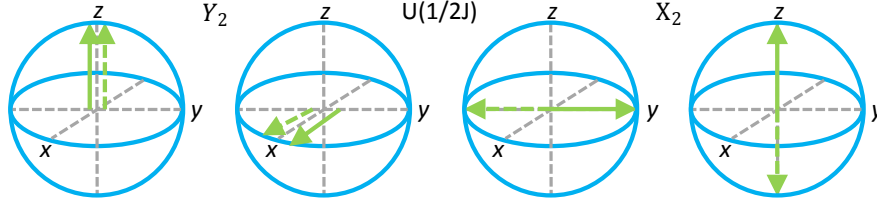


图 1.6 CNOT 门的 Bloch 球表示。目标比特 2 刚开始处于 $|0\rangle$ 态，实线和虚线分别表示控制比特 1 处于 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 时 qubit 2 所处的状态。

另外一种实现 CNOT 门的方法是利用线选脉冲。如果对处于频率 $\omega_0^2 + J/2$ 的峰施加一个选择性的 π 脉冲，它的作用是当且仅当控制比特 1 处于 $|1\rangle$ 时目标比特 2 将被翻转。当一个自旋和更多的自旋有耦合作用时，为了实现 CNOT 我们需要同时选择性地激发该自旋的一半的峰。目前实验上已经在五个 qubit 的系统上利用非常长的多频率激发脉冲实现了 CNOT 门^[12]。但当一个自旋的峰并没有分的很开时这种方法非常难以适用。

如果自旋间的相互作用哈密顿量不是 $I_z^i I_z^j$ 的形式，还包括其他的横向分量，我们可以利用其他的脉冲序列执行 CPHASE 和 CNOT 门，不过这些序列会很复杂^[13]。

如果两个自旋间并没有直接的相互作用，我们依然可以实现 CNOT 门，只要这两个自旋可以通过一系列的耦合连接起来。反过来，如果一个自旋和很多的自旋间有相互作用，我们想执行它和另一个自旋间的 CNOT 的话则必须移除其他耦合的影响。一般来说，在 NMR 量子计算中常用的是已经在很多 NMR 实验中广泛运用的脉冲重聚技术。

在液体 NMR 中，耦合哈密顿量形式一般为 $I_z^i I_z^j$ ，针对这种哈密顿量的重聚比较容易理解。如果耦合哈密顿量还包含横向分量的话，重聚过程就比较复杂了，需要运用平均哈密顿量的理论来解释。

首先我们来看看如何在两 qubit 系统中消除 $I_z^i I_z^j$ 形式的耦合。从数学形式来看，对于任意的演化时间 τ ，总有

$$X_1^2 U_J(\tau) X_1^2 = U_J(-\tau) = X_2^2 U_J(\tau) X_2^2, \quad (1.32)$$

也就是

$$X_1^2 U_J(\tau) X_1^2 U_J(\tau) = I = X_2^2 U_J(\tau) X_2^2 U_J(\tau). \quad (1.33)$$

在上式中把所有的 X_i^2 替换为 Y_i^2 ，序列依然是类似的。如果有时用 X_i^2 ，有时用

Y_i^2 ，我们得到的单位矩阵将有一些相位差别，但是如果同时在两个 qubit 上都加 π 脉冲的话，即 $X_1^2 X_2^2 U_J(\tau) X_1^2 X_2^2 U_J(\tau)$ ，耦合是会被回聚的。

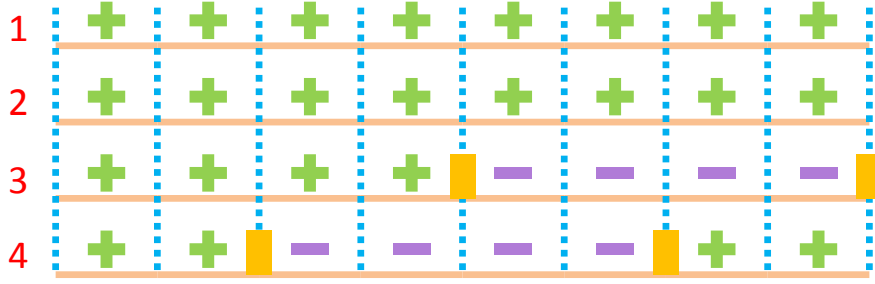


图 1.7 四比特系统中只保留 J_{12} 形式的耦合的脉冲重聚序列。每一小段所代表的演化时间是相同的，黄色的矩形代表 π 脉冲，用来翻转当前自旋的状态。

图1.7给出了多比特系统中的重聚技术。该序列有效地保留了 J_{12} 的效果，同时消除了其他耦合的影响。当一段耦合之内的自旋 i 和 j 处于相同的符号时，可以认为耦合演化表现出来的效果是正方向的，而当两个自旋处于相反的符号时，耦合演化表现出来的效果是负方向的。只要一个耦合总体表现出来的正方向和负方向的时间是相同的，那么它的效果将被回聚掉，没有任何影响。

在 NMR 量子计算中，设计重聚序列的系统化方法也已经发展起来。最常用的方案是基于 Hadamard 矩阵^[14,15]。 $n \times n$ 的 Hadamard 矩阵 $H(n)$ 满足

$$H(n)H(n)^T = nI. \quad (1.34)$$

$H(n)$ 中所有行都是两两正交的，比如 $H(12)$ 的例子如下图1.8

如果我们想保留任意一对耦合，同时回聚掉其他耦合的话，只需要简单的对 $H(n)$ 中的那两个 qubit 用相同的行形式就可以了。

$H(n)$ 并不是对所有 n 都是存在的，但我们总可以找到一个 \bar{n} ，使得 $H(\bar{n})$ 是已知的，且 $\bar{n} \geq n$ 。因此对于 n 个自旋的系统我们需要 \bar{n} 个时间间隔来实现重聚，且 π 脉冲的个数不多于 $n\bar{n}$ 个。

另外一种设计重聚序列的系统方法是 Linden 等人提出的^[16]。在四比特系统中，该序列形式如下

$$\begin{pmatrix} + & + & + & + & + & + & + & + \\ + & + & + & + & - & - & - & - \\ + & + & - & - & - & - & + & + \\ + & - & - & + & + & - & - & + \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
+	+	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+
+	+	+	+	-	-	-	+	-	+	-	-
+	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+	-
+	-	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+
+	+	-	-	+	+	-	+	-	-	+	-
+	-	-	-	-	-	-	+	+	+	+	+
+	-	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-
+	+	-	+	-	-	+	-	-	-	+	+
+	-	+	-	+	-	+	+	-	-	-	+
+	-	-	+	-	+	+	+	+	-	-	-
+	+	-	-	+	-	+	-	+	+	-	-

图 1.8 重聚序列 $H(12)$ 的形式。

每附加一个 qubit，演化时间间隔的数量就翻倍，并且 π 脉冲在这个 qubit 上施加在第一，第三，第五个..... 时间间隔之后。同基于 Hadamard 矩阵的方案相比，该方案不要求同时对多个 qubit 进行旋转，但该方案的时间间隔数目随着 qubit 的增加而指数增长。

1.2.3 强调制脉冲及 GRAPE 脉冲技术

在本章的第一节我们已经说过，对于同核系统来说，为了选择性地激发其中一个核自旋我们需要形状脉冲，但形状脉冲的缺点非常多。例如，它的强度比较低，也就意味着其作用时间很长，会带来不可忽略的退相干效应，同时其作用时间内的内部哈密顿量演化也必须考虑。如果对一个 NMR 系统施加过多的形状脉冲，实验结果的误差将会是非常大的，量子计算的任务也不会有效的完成。

为了克服形状脉冲带来的低精度问题，2002 年 MIT 的 Cory 小组提出了强调制脉冲 (Strongly modulating pulses, SMP)^[17] 理论，通过计算机的搜索和优化，强调制形状脉冲中的各个参数，从而精确实现所需的逻辑操作。由于 SMP 的脉冲能量一般很高，所以系统弛豫的影响将大大减小，同时优化过程中还能

补偿一些系统误差的影响，例如射频场的不均匀性、2005 年，Glaser 小组则利用新的梯度上升算法 (gradient ascent pulse engineering, GRAPE) 来设计形状脉冲，使得其效率和精度进一步提高。在本节中我们将简要介绍这两种在当前 NMR 量子计算领域极其重要的脉冲设计理论。

(a) 强调制脉冲技术

给出一个形状脉冲，我们可以轻松的计算出其演化算子，但反过来则非常困难。借助一些传统的分析技术，例如平均哈密顿量理论我们可以分析出合适的控制脉冲形式，但借助现代计算机及数学上的算法我们可以更有效且精确地给出问题的解。从传统意义上说，强调制脉冲 (Strongly modulating pulses, SMP)^[17-19] 非常类似于形状脉冲。SMP 中包含的脉冲数目并不算多，但是它们的强度，频率，脉宽以及相位都可以不同。强调制过程可以理解作为一种确定形状脉冲中各个参数的方法，其利用的多是数值模拟而非解析计算。发展 SMP 技术的初衷是希望能够有效实现复杂的多自旋系统中的量子逻辑操作。在传统的方法中，例如利用自旋回波重聚技术来孤立哈密顿量中需要的项，然后构造逻辑网络图的方法在大的自旋体系中非常难以扩展。上一小节中我们已经看到脉冲重聚随着比特数及相互作用数目增加时会变得非常复杂，而 SMP 的思路是通过不断改变和优化射频场的参数，并把所有的小片脉冲级联起来，使得整个脉冲的效果可以很好的实现需要的演化算子。同时，在 SMP 中，很多系统误差，例如射频场的不均匀性等都可以考虑到优化过程中，使得最后搜索出来的 SMP 可以抗干扰。下面我们将给出 SMP 的设计方法。

首先，我们要确定如何衡量搜索得到的 SMP 所代表的么正算子 U_{SMP} 和理论要求的么正算子 U_{tar} 之间的相似程度，一般我们采用量子门保真度 (quantum gate fidelity) 的概念

$$F = |\text{Tr}(U_{tar}^\dagger U_{SMP})/N|^2, \quad (1.36)$$

其中 $N = 2^n$ 是 Hilbert 空间的维度。 F 越大，说明搜索到的 SMP 越好。关于保真度的具体讨论详见下一小节。

通过 F ，我们定义一个 Q 因子，

$$Q = 1 - \sqrt{F}. \quad (1.37)$$

Q 越小，也说明搜索到的 SMP 效果越好。在具体的程序中，我们就是用 Q 因子的大小作为衡量 SMP 的搜索结果的标准。

回忆本章刚开始时所讲过的，NMR 系统的内部哈密顿量为

$$H_{int} = -\hbar \sum_i \omega_0^i I_z^i + \hbar \sum_{i<j} 2\pi J_{ij} I_z^i I_z^j. \quad (1.38)$$

而外部哈密顿量也就是射频场的形式为而外部哈密顿量为

$$H_{ext} = -\hbar \omega_1 (\cos[(\omega_{rf} - \omega_0^i)t + \phi] I_x^i - \sin[(\omega_{rf} - \omega_0^i)t + \phi] I_y^i). \quad (1.39)$$

从射频场的形式我们可以看出，射频场一共存在四个可变参数：能量 ω_1 ，频率 ω_{rf} ，周期 t 和相位 ϕ 。那么演化算子

$$U = e^{-i(H_{int}+H_{ext})t}. \quad (1.40)$$

通过 Nelder-Mead 算法^[20]，我们在整个空间内搜索这四个参数，使得 Q 因子尽可能的小。如果此时搜索得到的 U_{SMP} 和理论值 U_{tar} 之间非常接近，也就是 Q 很小，那么我们就保留这个结果并作为 NMR 实验上用的 SMP。但一般来说对于多自旋体系，单个的射频脉冲很难精确到获得所需操作，我们一般选择多个射频脉冲级联的方式，并且把每一小片脉冲中的能量 ω_1 定为常数，则有

$$U_{net} = \prod_{m=1}^N U_m = \prod_{m=1}^N e^{-i(H_{int}+H_{ext}^m(\omega_1, \omega_{rf}^m, \phi^m, t^m))t^m}. \quad (1.41)$$

序号 m 指的就是第 m 个方形脉冲小片。如果依然达不到所需结果，那么方形脉冲的数目还会继续增加。

要注意的是，NMR 实验并不会和理论计算的结果完全一样。在同一个样品中，处于不同位置的不同核自旋感受到的外磁场并不会完全一样，而且这些核自旋的化学位移也会有轻微的差别。定义处于 \vec{r} 的自旋感受到的么正操作为 $U(\vec{r})$ 的话，整个 NMR 样品的密度矩阵演化过程大致可以写成一个非么正的过程

$$\rho(t) = \int U(\vec{r}) \rho(0) U^\dagger(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (1.42)$$

将化学位移和射频场的权重因子代入，则有

$$\rho(t) = \int p(\omega, \Omega) U(\omega, \Omega) \rho(0) U^\dagger(\omega, \Omega) d\omega d\Omega. \quad (1.43)$$

其中 ω 是射频场的能量，而 Ω 是化学位移。这是一个超算子的求和形式，其保

迹条件为

$$\int p(\omega, \Omega) d\omega d\Omega = 1. \quad (1.44)$$

由于在实验中化学位移的变化对 SMP 的保真度影响并不大，我们着重考虑射频场不均匀性带来的影响。不均匀性的分布权重 $p(\omega)$ 在实验上可以用文献中的方法测出^[21]，然后用新的含射频场分布权重因子的能量代替以前的射频能量

$$\omega = \sum_{i=1}^n p(\omega_i) \omega_i, \quad (1.45)$$

n 为补偿不均匀性的取点个数，其值越大，修正就越好，但也会大大增加计算的复杂度。我们在实验上一般取 3 到 5 个点。

此时含射频场不均匀性的 SMP 的保真度形式为

$$F = \sum_i |\text{Tr}(\sqrt{p(\omega_i)} U_{tar}^\dagger U_{\omega_i}) / N|^2. \quad (1.46)$$

至此我们就完成了 SMP 的射频场不均匀性的修正。

(b) GRAPE 脉冲技术

在多比特数时，SMP 的方法并不是最优化的，而且 SMP 中每个脉冲小片都是方波，参数的跳变也会给具体的实验带来一定的误差。德国的 Glaser 小组则从一个标准的优化控制思想出发，提出了 GRAPE 算法^[22]。

一个自旋体系的密度矩阵演化可以用 Liouville Von-Neumann 方程给出

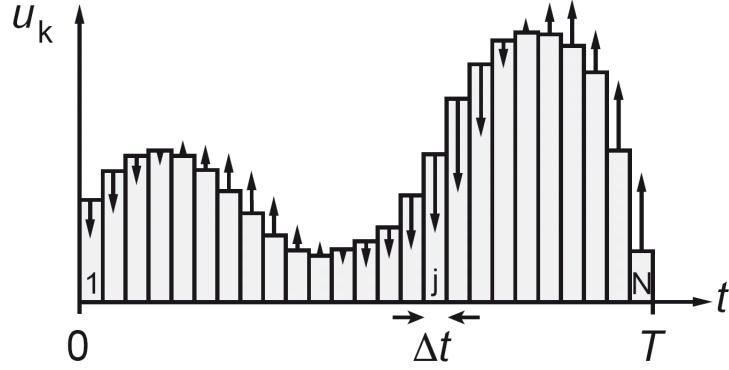
$$\dot{\rho}(t) = -i[(H_{int} + \sum_{k=1}^m u_k(t) H_{ext}), \rho(t)]. \quad (1.47)$$

$u_k(t)$ 是能够控制的射频场幅度因子。我们的目标是找到最优的 $u_k(t)$ ，使得经过 T 时间演化后末态 $\rho(T)$ 与理论要求的末态 C 之间尽可能的相似。为了表征这个相似程度，我们采用两者的内积形式定义为表现因子

$$\Phi_0 = \langle C | \rho(T) \rangle. \quad (1.48)$$

整个演化时间被分为 N 步，每一步的时间间隔均为 $\Delta t = T/N$ ，并保证每一步中，幅度因子 u_k 都是恒定的 (见图1.9)。那么第 j 步的演化算子为

$$U_j = e^{-i\Delta t((H_{int} + \sum_{k=1}^m u_k(j) H_{ext}))}, \quad (1.49)$$



1

图 1.9 在 GRAPE 算法中，每一小步的射频场幅度因子都是常数，而上下箭头表示的是幅度梯度。正是通过计算幅度梯度来改善整个 GRAPE 脉冲的效果 (即 Φ_0 的值)。

最后的末态密度矩阵为

$$\rho(T) = U_N \cdots U_1 \rho_0 U_1^\dagger \cdots U_N. \quad (1.50)$$

代入表现因子 Φ_0 的表达式可得

$$\Phi_0 = \langle C | U_N \cdots U_1 \rho_0 U_1^\dagger \cdots U_N \rangle, \quad (1.51)$$

并改写为

$$\Phi_0 = \langle U_{j+1}^\dagger \cdots U_N^\dagger C U_N \cdots U_{j+1} | U_j \cdots U_1 \rho_0 U_1^\dagger \cdots U_j^\dagger \rangle. \quad (1.52)$$

后半部分 ρ_j 为 $j\Delta t$ 时刻的密度矩阵，而前半部分 U_j 则看成是目标态 C 的反演。在某个 $j\Delta t$ 时刻，我们通过测量 Φ_0 的变化来改变 $u_k(j)$ ，达到 $u_k(j) + \delta u_k(j)$ 。此时整个 U_j 的变化在一阶近似可以写成

$$\delta U(j) = -i\Delta t \delta u_k(j) \overline{H_k} U(j). \quad (1.53)$$

且

$$\overline{H_k} \Delta t = \int_0^{\Delta t} U(j)(\tau) H_k U_j(-\tau) d\tau. \quad (1.54)$$

当 Δt 趋近于 0 时, $\overline{H_k} \approx H_k$, 即

$$\frac{\Delta\Phi_0}{\Delta u_k(j)} = - \langle \lambda_j | i \Delta t [H_k, \rho_j] \rangle. \quad (1.55)$$

当我们采用的变化形式为

$$u_k(j) \longrightarrow u_k(j) + \epsilon \frac{\Delta\Phi_0}{\Delta u_k(j)} \quad (1.56)$$

时, 表现因子 Φ_0 的值可以被提升, 也就是 GRAPE 的效果会变好。经过一次的梯度上升, 最终我们可以搜索得到精确的 GRAPE 脉冲。

如果在 GRAPE 算法中考虑射频场不均匀性的话, 我们要采取的修正为

$$\frac{\Delta\Phi_0}{\Delta u_k(j)} = \sum_i -2p(\omega_i) \text{Re}(\langle P_j(\omega_i) | i \Delta t H_k X_j(\omega_i) \rangle \langle X_j(\omega_i) | P_j(\omega_i) \rangle). \quad (1.57)$$

最后要提到的是, 无论是计算 SMP 还是 GRAPE 脉冲, 我们都需要对整个自旋系统进行完整的模拟。就像我们之前一直在提的, 对于经典计算机来说这个模拟过程所需要的资源是随着比特数的增加而指数增长的。其实, 最好的设计 SMP 或 GRAPE 的方法就是利用一台量子计算机。当然, 这有点类似“以子之矛攻子之盾”的含义, 但这确实是在量子计算发展中不可避免的问题, 很多研究人员已经尽力在避免使用 SMP 或 GRAPE 脉冲了, 或者使用精心挑选的自旋系统来最大限度的规避这些问题。

1.3 初态制备及测量读出

1.3.1 NMR 中的赝纯态制备方法

在 NMR 体系中, 自旋初态一般为热平衡态

$$\rho_{eq} = \frac{e^{-H_0/k_B T}}{\mathcal{Z}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \begin{pmatrix} e^{-\hbar\omega_0/2k_B T} & 0 \\ 0 & e^{\hbar\omega_0/2k_B T} \end{pmatrix}. \quad (1.58)$$

自旋所处的状态则有 Boltzmann 分布给出

$$Pr[|0\rangle] = \frac{e^{-\hbar\omega_0/2k_B T}}{\mathcal{Z}} = \frac{e^{-\hbar\omega_0/2k_B T}}{e^{-\hbar\omega_0/2k_B T} + e^{\hbar\omega_0/2k_B T}} \quad (1.59)$$

$$Pr[|1\rangle] = \frac{e^{\hbar\omega_0/2k_B T}}{\mathcal{Z}} = \frac{e^{\hbar\omega_0/2k_B T}}{e^{-\hbar\omega_0/2k_B T} + e^{\hbar\omega_0/2k_B T}}. \quad (1.60)$$

对于典型的 NMR 磁场强度，比如 10T， $\hbar\omega_0/k_B T \approx 10^{-5} \ll 1$ ，因此我们可以把指数项进行 Taylor 展开，得到

$$\rho_{eq} \approx \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \hbar\omega_0/2k_B T & 0 \\ 0 & 1 - \hbar\omega_0/2k_B T \end{pmatrix}. \quad (1.61)$$

我们把 $\varepsilon = \hbar\omega_0/k_B T$ 定义为自旋的极化度 (polarization)。在热平衡态情况下，自旋的极化度几乎为 0，自旋处于 $|0\rangle$ 的概率 $Pr[|0\rangle]$ 与处于 $|1\rangle$ 的概率 $Pr[|1\rangle]$ 几乎相等。

类似地，对于多自旋体系，热平衡态的形式为

$$\rho_{eq} \approx \frac{1}{2^n} \begin{pmatrix} 1 + \sum_k^n \frac{\hbar\omega_0^k}{2k_B T} & & & \\ & 1 - \frac{\hbar\omega_0^n}{2k_B T} + \sum_k^{n-1} \frac{\hbar\omega_0^k}{2k_B T} & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 - \sum_k^n \frac{\hbar\omega_0^k}{2k_B T} \end{pmatrix}. \quad (1.62)$$

这里忽略了耦合能量是因为在 10T 左右的磁场下， $\hbar\omega_0$ 已经大约是 $\hbar 2\pi J_{ij}$ 的 10^6 倍了。

在热平衡态下，我们不可能知道自旋到底处于向上和向下的哪个状态，因为它们处于这些状态的概率几乎完全相等。这种状态是不适合用作量子计算的初态的，我们需要的是一个单一的，能够确切知道的态 (比如 $|00\dots 0\rangle$)，所以我们必须寻找合适的方法实现 NMR 的初态制备。

最直观的纯化热平衡态的方法是通过冷却，把初态直接冷却到系统的基态上去。从极化度的表达形式可知，我们要求热能 $k_B T$ 远小于基态与第一激发态的能级差 $\hbar\nu$ 。如果我们能够实现绝对零度，那这个要求自然就满足了。可惜的是这不是电子游戏，并不存在这种强大的冰系招数。对于 Larmor 频率在 1GHz 以下的 NMR 系统来说，这要求温度 $T \ll 0.05K$ ！很明显地液体 NMR 样品是做不到这一点的，因为它们肯定被冻住了。目前能达到这一温度的 NMR 样品只有固体样品和液态的 ^3He ^[23]。以目前的技术手段来看，纯粹通过降温冷却实现 NMR 量子计算的初态制备是不现实的。

真正实现室温下 NMR 量子计算依赖于有效纯态 (effective pure state) 或者叫赝纯态 (pseudo-pure state, PPS) 的概念的提出。PPS 的概念使得室温下进行 NMR 量子计算成为了可能，这些自旋的动力学行为看上去就和绝对零度时一模一样，至多有一个信号强度的差别。下面我们将解释 NMR 量子计算中非常重要的 PPS 的概念，并给出常用的制备 PPS 的方法。

制备 PPS 的出发点首先依据的是 NMR 中非常重要的一个事实：NMR 信号只和布居度之差有关，和布居度本身的大小并无任何关系。也就是说，一个单位矩阵在 NMR 中是不会产生任何信号的。同时，由于 $UIU^\dagger = I$ ，单位阵也不会么在么正操作下进行任何动力学演化。那么，在 NMR 中，我们只关心偏移密度矩阵 (deviation density matrix) ρ_Δ 的概念，也就是在整个密度矩阵中减掉毫无用处的单位阵

$$\rho_\Delta = \rho - I/2^n. \quad (1.63)$$

这里我们已经假定 ρ 是归一化的，即 $\text{Tr}\rho = 1$ 。

Gershenfeld 和 Chuang^[24]，以及 Cory 小组^[25] 分别独立发现下面的密度矩阵形式

$$\rho_{eff} = \frac{1-\alpha}{2^n}I + \alpha|\psi\rangle\langle\psi| \quad (1.64)$$

的动力学性质和它的第二项 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 相同，而 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 代表了一个纯态。因此我们就叫 ρ_{eff} 为有效纯态或赝纯态。

假设 $|\psi\rangle = |00\dots 0\rangle$ 的话，可以写出

$$\rho_{eff} = \frac{1-\alpha}{2^n} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.65)$$

可以看出在 PPS 的表达式中，除了一项之外，所有的对角元都是相等的。

那么如何从热平衡态 ρ_{eq} 出发得到 PPS ρ_{eff} 呢？明显地，由于 ρ_{eq} 和 ρ_{eff} 的本征值并不相同，这个 PPS 制备过程一定是非么正的。目前主要用到的 PPS 制备方法有四种：逻辑标记法 (logical labeling)^[24]，空间平均法 (spatial averaging)^[25]，时间平均法 (temporal averaging)^[26] 以及猫态制备法 (cat-state preparation)^[26]。逻辑标记法需要辅助比特，所有的量子计算任务运行在一个初始为 PPS 的 Hilbert 子空间内；时间平均法则把 PPS 拆解为几部分，每次实验分别制备一个部分，最后把所有的 NMR 结果加起来；空间平均法类似于时间平均，只是平均过程是发生在空间上；猫态制备法则综合了逻辑标记和空间平均两个概念。我们将分别介绍这些 PPS 制备方法。

(a) 逻辑标记法

逻辑标记法^[24,27] 的主要思想是通过施加脉冲序列，重新分配热平衡态的布居度，使得一个子空间内的自旋处于 PPS，所有的计算任务都在这个子空间内进行。NMR 中最早用到子空间概念的实验是观测 Berry 相^[28]。

在 3 qubit 的同核自旋系统中，其热平衡态的表达式为

$$\rho_{eq} = \frac{1}{2^3} \frac{\hbar\omega_0^n}{2k_B T} \begin{pmatrix} 3 & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & -1 & & & & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & -1 & & \\ & & & & & & -1 & \\ & & & & & & & -3 \end{pmatrix}. \quad (1.66)$$

以量子计算的语言来看，这 8 个布居度分别代表 $|000\rangle$, $|001\rangle$ 到 $|111\rangle$ 态。在热平衡态的表达式中，由 $|000\rangle$, $|011\rangle$, $|101\rangle$, $|110\rangle$ 四个态张成的子空间就是一个 PPS。

为了简化接下来的逻辑操作，我们可以通过 qubit 1 和 qubit 2 上的么正操作重把布居度重新分配为

$$\rho_{eq} = \frac{1}{2^3} \frac{\hbar\omega_0^n}{2k_B T} \begin{pmatrix} 3 & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & -1 & & \\ & & & & & & -1 & \\ & & & & & & & -1 \\ & & & & & & & & -3 \end{pmatrix}. \quad (1.67)$$

此时子空间 $|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle$ 就是一个 PPS 了。这个 PPS 依赖于 qubit 1 的状态，当其处于 $|0\rangle$ 时，就是我们上面提到的 PPS，一般我们叫其 $|0\rangle_1$ 子空间。在制备了逻辑标记的 PPS 后，在剩下的脉冲序列中我们只需要重聚掉 qubit 1 的影响，那么整个计算过程就等价于在 qubit 2 和 qubit 3 上的量子计算任务了。

PPS 子空间的维度受限于热平衡态中处于相同布居度的态的数量。在同核系统中，该数值为 $C_n^{n/2} = n! / [(n/2)!]^2$ (假定 n 为偶数)，可用的 PPS 子空间包含的 qubit 数目则是 $k = \log_2(1 + C_n^{n/2})$ 。当 n 很大时， k/n 是趋近于 1 的，比如

$n = 40$ 时 $k = 37$ 。对于异核系统来说, 分析会复杂一些, 一般来说 k/n 会更小, 但随着总的 qubit 数目 n 的增加, 可用作 PPS 子空间的 k 增加的也很可观。除此之外, 为了重新分配布居度所要执行的逻辑操作的数目和 n 是呈多项式关系的。

那么逻辑标记法的信号强度是多少呢? 回忆前面提过的 NMR 信号强度是和布居度之差相关的。对于 n 为偶数的同核系统, 可以认为在 ρ_{eq} 中的 $C_n^{n/2}$ 个相同的布居度都为 0 (当 n 为奇数且很大时, 这个值也非常接近 0), 而最大的布居度为 $n\hbar\omega_0/2^n 2k_B T$ 。因此最大的信号强度 S 是以 $n/2^n$ 的形式扩展的。而逻辑标记法中由于只有一个实验, 噪声是与 n 无关的, 所以整个实验的信噪比为

$$\frac{S}{N} \propto \frac{n}{2^n}. \quad (1.68)$$

(b) 时间平均法

时间平均法的思想是把一系列的实验谱加起来, 而每个实验谱都对应于不同的初态制备序列, 产生不同的布居度改变, 而相加后得到的态与 PPS 的性质完全相同。由于量子力学的线性叠加性, 各个独立实验得到的末态叠加和先把初态叠加后进行实验的效果是完全一样的。下面我们将给出三种进行时间平均的途径。

最传统的时间平均法是对 n 个自旋的系统进行 $2^n - 1$ 次实验, 每次实验都对除了基态布居度之外所有的布居度进行不同的循环改变。例如, 对一个 2 qubit 自旋系统, 其热平衡态为

$$\rho_1 = \rho_{eq} = \begin{pmatrix} a & & & \\ & b & & \\ & & c & \\ & & & d \end{pmatrix}, \quad (1.69)$$

这里用 a, b, c, d 是为了表明这种方法对任意的初态布居度分配都是用。如果我们对后面的三个布居度进行如下么正变换

$$U_p = U_{cnot12} U_{cnot21}, \quad (1.70)$$

那么得到

$$\rho_2 = U_p \rho_{eq} U_p^\dagger = \begin{pmatrix} a & & & \\ & d & & \\ & & b & \\ & & & c \end{pmatrix}. \quad (1.71)$$

如果我们循环地加这个么正操作

$$U_p^2 = U_{cnot21} U_{cnot12}, \quad (1.72)$$

将得到

$$\rho_3 = U_p^2 \rho_{eq} U_p^{\dagger 2} = \begin{pmatrix} a & & & \\ & c & & \\ & & d & \\ & & & b \end{pmatrix}. \quad (1.73)$$

然后我们把 ρ_1, ρ_2, ρ_3 加起来，将得到

$$\rho_{eff} = \begin{pmatrix} 3a & & & \\ & e & & \\ & & e & \\ & & & e \end{pmatrix} = e \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} + (3a - e) \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.74)$$

其中 $e = b + c + d$ 。

在该方法中的信噪比是多少呢？任意一个实验中基态能级的布居度为 $n/2^n$ ，而所有 $2^n - 1$ 个实验中基态能级的布居度只是简单的相加。另一方面，噪声是随着实验数目的增多以平方根的形式增长的。那么，当实验数目为 $l = 2^n - 1$ 时，信噪比为

$$\frac{S}{N} \propto \frac{n}{2^n} \frac{2^n - 1}{\sqrt{2^n - 1}} = \frac{n}{2^n} \sqrt{l}. \quad (1.75)$$

这个大小其实和逻辑标记法中累加 l 次实验所得到的信噪比是相同的。

另外一种时间平均的过程不再是进行循环的布居度改变了。实际上，对任意一组线性无关的 $2^n - 1$ 个布居度分布 $diag(\rho_i)$ 来说，我们总可以求解一系列的权重 v_i ，使得

$$\rho_{eff} = \sum_{i=1}^l v_i \rho_i. \quad (1.76)$$

这个方法的好处是每一个初态制备的序列会比循环改变的方法简单很多，而且，

在近似情况下 PPS 可以通过少得多的实验来叠加得到 (当然精确的解还是需要 $2^n - 1$ 个实验)。

这个方法的缺点主要是信噪比并不是最优化的。对于 l 次实验来说, 其信噪比为

$$\frac{S}{N} \propto \frac{n}{2^n} \frac{\sum_{i=1}^l v_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^l v_i^2}} \leq \frac{n}{2^n} \sqrt{l}. \quad (1.77)$$

等号仅仅在所有的权重 v_i 为 1 时成立。

最后一种时间平均的过程是利用直积算子的形式。比如我们对 5 个同核自旋的热平衡态密度矩阵进行 Pauli 展开的话

$$\rho_{eq} = ZIIII + IZIII + IIZII + IIIZI + IIIIZ, \quad (1.78)$$

而 PPS 的形式为

$$\begin{aligned} \rho_{eff} = & ZIIII + \dots + IIIIZ + ZZIII + \dots + IIIZZ + \\ & ZZZII + \dots + IZZZZ + ZZZZI + \dots + IZZZZ + ZZZZZ. \end{aligned} \quad (1.79)$$

总共包含 $2^5 - 1 = 31$ 项。利用简单的 CNOT 操作, 热平衡态中的 $n = 5$ 项可以转化到不同的另外 $n = 5$ 项, 基于基本的 CNOT 门的定义

$$CNOT_{12} : II \rightarrow II, IZ \rightarrow ZZ, ZI \rightarrow ZI, ZZ \rightarrow IZ. \quad (1.80)$$

对于 n 个同核自旋系统, 我们最少需要 $[(2^n - 1)/n]$ 个不同的实验来制备所有的 $2^n - 1$ 项。

在这种方案中, 其信噪比是优化的, 因为所有的权重因子都相等

$$\frac{S}{N} \propto \frac{n}{2^n} \frac{2^n - 1/n}{\sqrt{2^n - 1/n}} = \frac{n}{2^n} \sqrt{l}. \quad (1.81)$$

(c) 空间平均法

空间平均法^[29]的思想是利用一个含梯度磁场的脉冲序列来平均掉除了基态能级外其他所有能级的布居度。梯度场的作用是可以让样品中处于不同位置的自旋以不同的频率进动, 使得它们的相位近乎平均掉。当然, 这个过程并不是真正的平均掉所有相位, 是可以通过一个反向梯度场重聚的。以密度矩阵的语言来解释的话, 梯度场的作用是使所有的非对角元都变成了 (除了零量子相干)。

最容易理解空间平均法的形式是直积算子形式。比如对于两个同核自旋的

体系，这个过程可以表示为如下形式

$$\begin{array}{ccc}
 & & ZI + IZ \\
 \xrightarrow{R_x^2(\pi/3)} & & ZI + \frac{1}{2}IZ - \frac{\sqrt{3}}{2}IY \\
 \xrightarrow{G_z} & & ZI + \frac{1}{2}IZ \\
 \xrightarrow{R_x^1(\pi/4)} & & \frac{\sqrt{2}}{2}ZI + \frac{1}{2}IZ - \frac{\sqrt{2}}{2}YI \\
 \xrightarrow{d(1/2J)} & & \frac{\sqrt{2}}{2}ZI + \frac{1}{2}IZ + \frac{\sqrt{2}}{2}XZ \\
 \xrightarrow{R_y^1(-\pi/4)} & \frac{1}{2}ZI - \frac{1}{2}XI + \frac{1}{2}IZ + \frac{1}{2}XZ + \frac{1}{2}ZZ \\
 \xrightarrow{G_z} & & \frac{1}{2}ZI + \frac{1}{2}IZ + \frac{1}{2}ZZ.
 \end{array} \quad (1.82)$$

在上面的方案中，有一半的初始极化度被梯度场打掉了。每增加一个自旋，打掉的极化度就在增加一倍，因此其信噪比为

$$\frac{S}{N} \propto \frac{n}{2^n}. \quad (1.83)$$

空间平均法在网络图上是可扩展的，对于六个同核自旋系统，其 PPS 制备的网络图如下 理论上来说这个网络图是完全可以扩展到任意的 n 个 qubit 系统

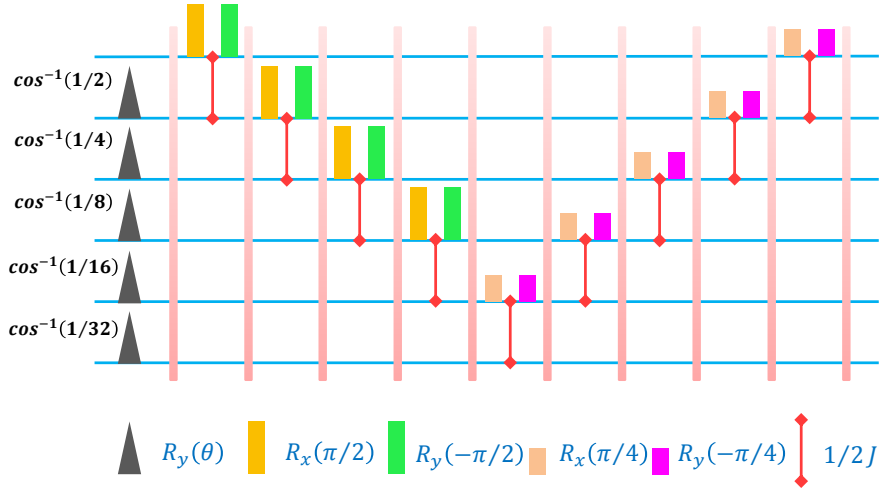


图 1.10 可扩展的 6 qubit 的 PPS 制备网络图。

的。

(d) 猫态制备法

猫态制备法^[30] 融合了逻辑标记与空间平均两种方法的思想。它即需要辅助位，也需要梯度场或者相循环来选择高阶相干。所谓的猫态指的就是最大纠缠态，是以薛定谔的猫来命名的。在 3 qubit 情况，猫态就是一个 GHZ 态。从纯

态出发，我们可以很轻易地制备猫态，比如四比特时其序列如图1.11。反过来的话，如果我们可以先制备猫态，自然也就可以得到赝纯态了。

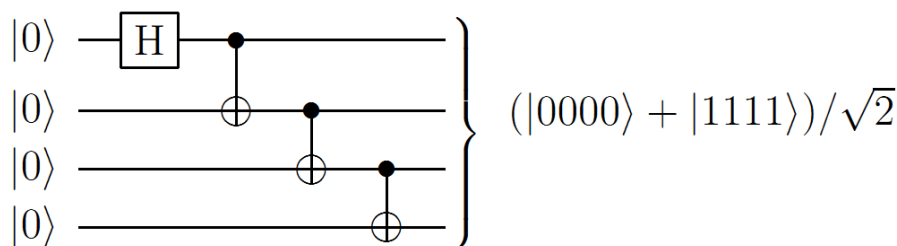


图 1.11 4 qubit 系统上制备猫态的逻辑网络图，仅需要 Hadamard 操作和 CNOT 操作。

让我们考虑更加简单的 3 qubit 系统。制备猫态的网络图如图1.12(a) 所示。初态选择为 ZII 的话 (这个态可以通过 $\pi/2$ 旋转和梯度场很容易从热平衡态得到)，经过该网络后，系统的末态为 YYX 。该末态是含有三量子相干 $|000\rangle\langle 111| + |111\rangle\langle 000|$ 的，而这正是一个猫态的形式。在 NMR 中，不同阶的量子相干对于相位的敏感度是不同的，因此可以通过相循环或者梯度场的方法把最高阶相干选择出来^[31]。然后通过图1.12(b) 所示的解码过程就可以得到逻辑标记的 $PPSX|00\rangle\langle 00|$ 。

目前 NMR 量子计算领域最大 qubit 的实验就是利用猫态制备法制备了 12 qubit 的 PPS^[32]，其网络图如图1.13。

在本节的最后，我们要注意两个问题。首先，所有的 PPS 制备方案要么对实验数量有指数的要求，要么信号强度会有指数的衰减。造成这种衰减的原因很简单：这些方案只是简单地把基态能级的布居度选择了出来，而这个布居度的大小是正比于 $n/2^n$ 的。这种指数衰减显然是和量子计算的宗旨背道而驰的，但是在小量子系统的实验里不会有什么问题。

第二，也是很容易被人忽视的问题，就是我们只是在量子计算任务开始前进行了初态制备。但是很多量子计算方案要求在计算中也能进行一些初始化过程，比如量子纠错。目前为止，没有合适的方案能做到这一点，当然有些方法原则上可以往这方面扩展。

1.3.2 NMR 中的读出手段

单个核自旋的信号是非常难以探测的。目前只有离子阱及 NV 色心等少数体系中可以通过光学手段进行单自旋探测。在 NMR 中，我们观测的都是大量系综的统计平均结果，典型的液体 NMR 样品大概要包含 10^{18} 个自旋用以观测。对所有的分子来说，它们感受到的操作是相同的，因此所有分子中自旋所

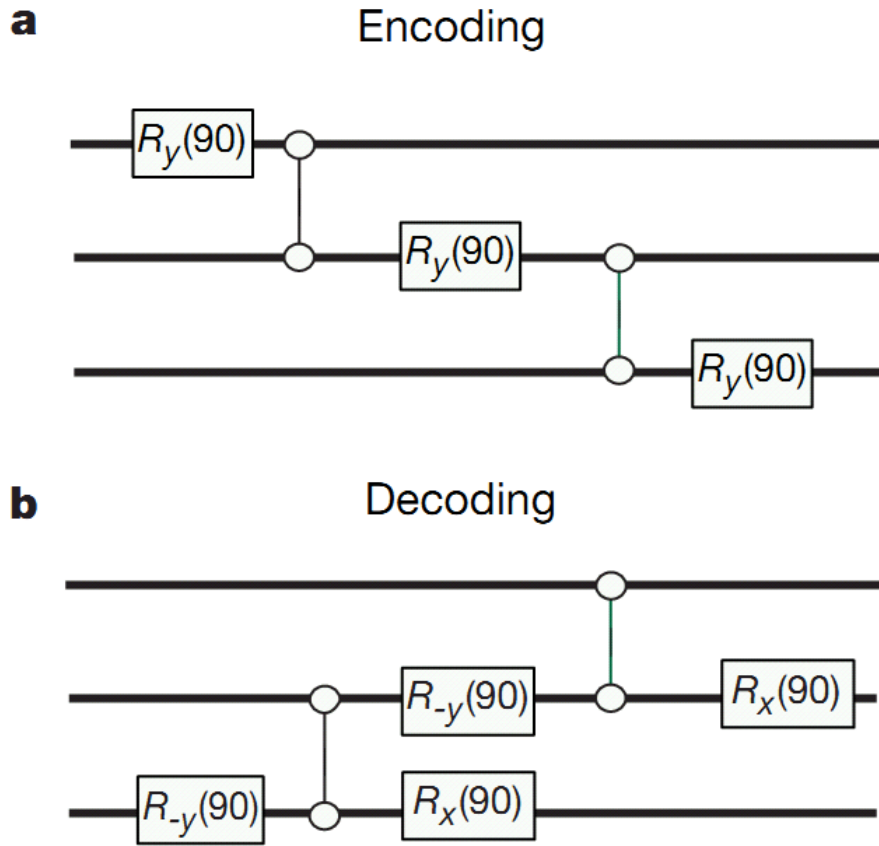


图 1.12 3 qubit 系统上的猫态 PPS 制备法。(a) 从初态 ZII 出发，我们可以得到含有三量子相干 $|000\rangle\langle 111| + |111\rangle\langle 000|$ 的末态 YYX 。(b) 从三量子相干 $|000\rangle\langle 111| + |111\rangle\langle 000|$ 出发，可以得到逻辑标记后的纯态 $X|00\rangle\langle 00|$ 。取自 [Nature 404, 368 (2000)^[30]]

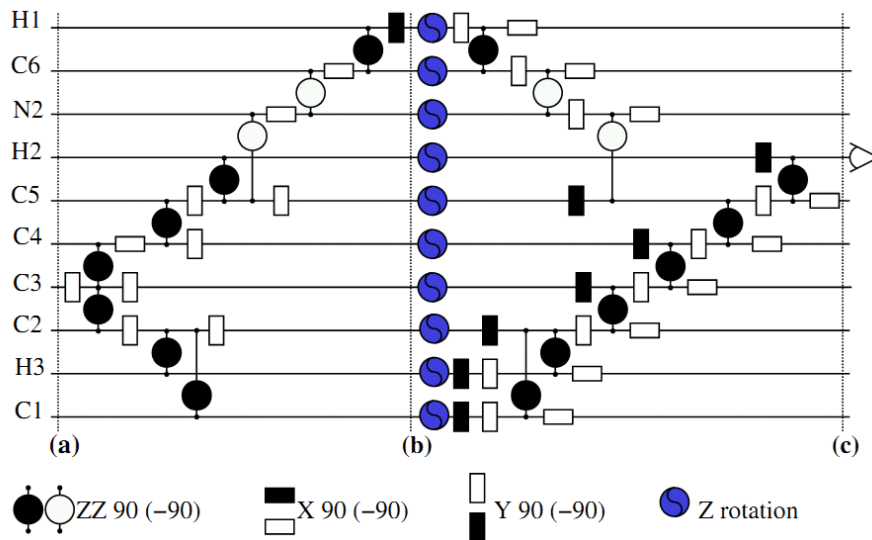


图 1.13 12 qubit 系统上的猫态 PPS 制备网络图。取自 [Phys. Rev. Lett. 96, 170501 (2006)^[32]]

处的末态也是相同的，可以进行简单的叠加。

NMR 中的探测是通过配置在样品旁边的射频线圈完成的。它可以探测自旋中磁矢量的横向分量，然后把这种时域信号通过傅里叶变化转换成 NMR 谱。在 NMR 中，对于自旋状态的测量是弱测量 (weak measurement)，也就是探测装置射频线圈是一直工作的，但是与核自旋之间的耦合非常弱，因此对退相干几乎没有贡献。当然，由于与热库之间有相互作用以及静磁场的不均匀性等依然会造成自旋状态的退相干，所以探测到的时域信号是随着时间衰减的，且一般为指数形式。这种由射频线圈采集到的衰减时域信号叫做自由感应衰减 (free induction decay, FID)。

如果 FID 的衰减形式是 $e^{-t/T}$ (一般来说 $T = T_2^*$)，那么 FID 的傅里叶变换将得到一个洛伦兹线型

$$\propto \frac{1}{1 + (\omega - \omega_0)^2} - \frac{i\omega}{1 + (\omega - \omega_0)^2}, \quad (1.84)$$

且其半高宽为

$$\Delta f = \frac{\Delta\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi T}. \quad (1.85)$$

由于是弱测量，我们很难得到单个自旋状态的信息。但通过 NMR 样品中大量全同分子的叠加，我们可以得到想要的关于平均自旋状态的很多信息。某种程度上来说，这些信息量比投影测量给出的信息量还要大。

测量得到的 NMR 信号的最大值 V_0 正比于

- 分子数量，与样品的体积 V 和浓度 n_c 有关。
- 分子中的全同原子核的数目 n_e ，比如 CH_3Cl 分子中的 ^1H 的数目就为 3。
- 热平衡态的自旋极化度 ϵ_0 ，和旋磁比 γ ，静磁场 B_0 ，以及样品温度 $1/T_s$ 成正比。

- ω_0 ，与旋磁比 γ 和静磁场 B_0 成正比。
- 线圈的品质因子 Q 。
- 填充因子 η ，也就是样品在线圈中的占据程度。
- 因子 K ，反应了线圈的几何性质以及线圈与核自旋之间的耦合。

而测量的噪声主要是线圈的热噪声，和以下因素的平方根成正比

- 线圈的绝对温度 T_c 。
- 线路中的分流电阻 $R = QL\omega_0$ ，其中 L 是电感。
- 音频滤波器的带宽 Δf 。

同时，NMR 中的谱线强度不仅依赖于信号和噪声强度，还和信号在频率上的展宽有关。因此，NMR 谱线的信噪比还正比于 $1/m$ ， m 为谱线的数目，以

及 T_2^* (长的 T_2^* 可以给出更窄更高的谱线)。

总的来说, 信噪比可以用如下形式表示

$$\frac{S}{N} \propto \frac{n_c V n_e \gamma^2 B_0^2 Q \eta K T_2^*}{m T_s (T_c Q L \gamma B_0 \Delta f)^{1/2}} = \frac{n_c V n_e \gamma^{3/2} B_0^{3/2} Q^{1/2} \eta K T_2^*}{m T_s (T_c L \Delta f)^{1/2}}. \quad (1.86)$$

关于信噪比的更深入的讨论, 可以参见文献^[33]。

1.3.3 NMR 中的量子态重构

对密度矩阵 ρ 的测量可以用来测试或者检验特定的量子态的制备过程。对于 n 个 qubit 张成的 2^n 维 Hilbert 空间内的单次测量来说, 假定要测量的态为 $|m\rangle$, 那么这个单次测量几乎给不出关于 ρ 的任何信息。可以从测量结果 m 推测出来的所有信息就只有 $Pr[|m\rangle] \neq 0$ 。

如果进行重复测量的话, 每次都把系统制备到同样的状态并且在同样的基矢中测量, 我们可以得到几率分布

$$Pr[|m\rangle] = \langle m | \rho | m \rangle = Tr(\rho |m\rangle \langle m|) = Tr(\rho M), \quad (1.87)$$

其中 M 是测量算子。如果我们对每个 qubit 都在 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 中重复测量的话, 可以得到密度矩阵中的所有对角元。

量子态重构 (quantum state tomography)^[34-36] 是用能够确定出密度矩阵中所有元素的方法。通过在不同的测量基矢下重复测量相同的态, 以及求解线性方程组, 我们就可以确定所有的元素。一般来说, 我们会通过么正变换把 qubit 旋转一个角度, 然后在固定的基矢下测量。这和选取不同的基矢是等价的, 因为

$$Tr[\rho(UMU^\dagger)] = Tr[(U^{dagger} \rho U)M]. \quad (1.88)$$

比如, 单个 qubit 的密度矩阵可以展开成

$$\begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix} = \rho_{00} |0\rangle \langle 0| + \rho_{01} |0\rangle \langle 1| + \rho_{10} |1\rangle \langle 0| + \rho_{11} |1\rangle \langle 1|. \quad (1.89)$$

对其在 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 中测量的话我们首先可以得到 ρ_{00} 及 $\rho_{11} = 1 - \rho_{00}$ 的值。然后, 我们把基矢绕 \hat{x} 轴转 $\pi/2$, 把 ρ 转化成 $X\rho X^\dagger$, 我们就可以得到 $Im(\rho_{10}) = -Im(\rho_{01})$ 。类似地, 绕 \hat{y} 轴转 $\pi/2$ 的话我们可以得到 $Re(\rho_{10}) = Re(\rho_{01})$ 。因此, 三次测量就可以让我们重构整个密度矩阵 ρ 。

对于 n 个 qubit 的体系，我们也可以把密度矩阵展开为

$$\rho = \sum_{i=0}^{2^n-1} \sum_{j=0}^{2^n-1} \rho_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (1.90)$$

并选择一组基矢变换，可以得到 ρ 中的所有 $4^n - 1$ 个自由度。

如果我们选择利用 Pauli 基组而不是计算基矢展开的话，找到基矢变换会更加容易。对单 qubit 的密度矩阵，它的 Pauli 展开可以写成

$$\rho = c_0 \sigma_0 + c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 + c_3 \sigma_3, \quad (1.91)$$

其中 $c_0 = 1$ 为归一化条件，且 $\sigma_0 = I/2, \sigma_1 = \sigma_x/2, \sigma_2 = \sigma_y/2, \sigma_3 = \sigma_z/2$ 。在计算基矢中的测量给出 $Pr[|0\rangle] = (c_0 + c_3)/2$ ，且 $Pr[|1\rangle] = (c_0 - c_3)/2$ ，我们就可以解出 c_3 。而由于

$$\begin{aligned} X\rho X^\dagger &= c_0 \sigma_0 + c_1 \sigma_1 - c_3 \sigma_2 + c_2 \sigma_3, \\ Y\rho Y^\dagger &= c_0 \sigma_0 + c_3 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 - c_1 \sigma_3, \end{aligned} \quad (1.92)$$

我们就可以在施加 X 后得到 $(c_0 \pm c_2)/2$ ，而在施加 Y 后得到 $(c_0 \mp c_1)/2$ 。

对于 n 个 qubit，Pauli 展开可以写成

$$\rho = \sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^3 \cdots \sum_{k=0}^3 c_{ij\dots k} \sigma_i \otimes \sigma_j \otimes \cdots \otimes \sigma_k, \quad (1.93)$$

其中 $c_{00\dots 0} = 1$ 为归一化条件。在计算基矢中的测量算子由以下形式给出

$$(\sigma_0 \pm \sigma_3) \otimes (\sigma_0 \pm \sigma_3) \otimes \cdots \otimes (\sigma_0 \pm \sigma_3), \quad (1.94)$$

并给出相应的概率

$$\sum_{i,j,\dots,k \in \{0,3\}} \pm \frac{c_{ij\dots k}}{2^n}. \quad (1.95)$$

例如对于 2 qubit 体系，有

$$Pr[|00\rangle] = (c_{00} + c_{03} + c_{30} + c_{33})/4, \quad (1.96)$$

$$Pr[|01\rangle] = (c_{00} - c_{03} + c_{30} - c_{33})/4, \quad (1.97)$$

$$Pr[|10\rangle] = (c_{00} + c_{03} - c_{30} - c_{33})/4, \quad (1.98)$$

$$Pr[|11\rangle] = (c_{00} - c_{03} - c_{30} + c_{33})/4, \quad (1.99)$$

这样我们就可以通过求解线性方程组得到 c_{03}, c_{30}, c_{33} 。然后，要得到其他的 $c_{ij\dots k}$ 的话我们则需要进行旋转，比如

$$X_1 Y_2 (\sigma_0 + \sigma_2) \otimes (\sigma_0 + \sigma_1) X_1^\dagger Y_2^\dagger = (\sigma_0 + \sigma_3) \otimes (\sigma_0 - \sigma_3). \quad (1.100)$$

最后要说的是，测量基矢并非一定要选择计算基矢，在 NMR 实验中，单 qubit 测量算子可以写成 $-i\sigma_1 - \sigma_2$ 。而对于耦合起来的两个自旋，测量算子为

$$2(-i\sigma_1 - \sigma_2) \otimes (\sigma_0 \pm \sigma_3), \quad (1.101)$$

$$(\sigma_0 \pm \sigma_3) \otimes 2(-i\sigma_1 - \sigma_2). \quad (1.102)$$

由于 NMR 的实验结果是大量分子的系综平均，这些算子的期望值可以通过单次的 NMR 谱线直接读出。式1.101中的四个算子就对应于两自旋系统的四条 NMR 谱线，而相位测量则允许我们同时读出每条谱线的实部和虚部项，从而区分 σ_1 和 σ_2 的贡献。

在测量出末态后，我们需要对实验上测到的结果 $|\phi\rangle$ 和理论预期 $|\psi\rangle$ 进行比较。对于这点我们引入量子态保真度 (quantum state fidelity) 的概念。对于两个纯态的情况，保真度的定义为

$$F(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = |\langle\phi|\psi\rangle|, \quad (1.103)$$

简单来说就是两个态交叠程度的绝对值的大小。

更一般的情况，末态使用密度矩阵来表示的，因为密度矩阵语言可以描述由于退相干导致的量子态的混合，即混态。描述一个纯态 $|\psi\rangle$ 和混态 ρ 的保真度形式为

$$F(|\psi\rangle, \rho) = \sqrt{\langle\psi|\rho|\psi\rangle}, \quad (1.104)$$

当 $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ 时这个形式就退化到两个纯态的情况。

而对于两个混态 ρ 和 σ 来说，它们之间的保真度则定义为

$$F(\sigma, \rho) = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\sigma} \rho \sqrt{\sigma}}. \quad (1.105)$$

在这个表达式中其实 ρ 和 σ 是对称的，而其中一个为纯态时就退化到了式1.104的情况。

实验上另外一个常用的衡量保真度的参数是相关性 (correlation), 其形式为

$$C = \frac{\text{Tr}(\sigma\rho)}{\sqrt{\text{Tr}(\sigma^2)\text{Tr}(\rho^2)}}. \quad (1.106)$$

一般来说, 相关性的值要比保真度高一些。

1.4 强耦合液晶 NMR 体系量子计算

前面的章节我们主要集中于讨论耦合形式为 $I_z^i I_z^j$ 形式的哈密顿量模型, 也就是弱耦合近似下的 J 耦合模型。液体中由于分子的快速滚动, 偶极耦合的效果都被平均掉了, 而液晶及固体样品中偶极耦合的效应会显现, 导致其处理手段和液体 NMR 有很大的不同。本节我们就将着重分析如何利用强耦合 NMR 体系进行量子计算, 主要集中在液晶 NMR 体系。

1.4.1 强耦合体系的处理方法

在液晶体系中, 偶极耦合的大小约为 0 到 20kHz , 这个值远大于 J 耦合的 0 到 200Hz 的量级。因此对于自旋 $1/2$ 的液晶体系, 其哈密顿量形式为

$$H_{\text{sys}} = \hbar \sum_i \omega_i I_z^i + \hbar \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} I_z^i I_z^j + \sum_{i < j} \pi D_{ij} (2I_z^i I_z^j - I_x^i I_x^j - I_y^i I_y^j), \quad (1.107)$$

D_{ij} 是核自旋 i 和 j 之间的偶极耦合常数。在偶极耦合项中, 由于存在两个和其他项不对易横向分量 $I_x^i I_x^j$ 和 $I_y^i I_y^j$, 才是液晶 NMR 体系展现出很多和液体不一样的性质。

考虑简单的两体情况并忽略掉 J 耦合, 则哈密顿量可以简化为 (省略 \hbar)

$$H_{\text{sys}} = \omega_1 I_z^1 + \omega_2 I_z^2 + \pi D_{12} (2I_z^1 I_z^2 - I_x^1 I_x^2 - I_y^1 I_y^2), \quad (1.108)$$

写成矩阵形式的话

$$H_{\text{sys}} = \begin{pmatrix} H_{11} & & & \\ & H_{22} & H_{23} & \\ & H_{32} & H_{33} & \\ & & & H_{44} \end{pmatrix}, \quad (1.109)$$

其中

$$\begin{aligned}
 H_{11} &= +\frac{1}{2}\omega_1 + \frac{1}{2}\omega_2 + \frac{1}{2}\pi D, \\
 H_{22} &= +\frac{1}{2}\omega_1 - \frac{1}{2}\omega_2 - \frac{1}{2}\pi D, \\
 H_{33} &= -\frac{1}{2}\omega_1 + \frac{1}{2}\omega_2 - \frac{1}{2}\pi D, \\
 H_{44} &= -\frac{1}{2}\omega_1 - \frac{1}{2}\omega_2 + \frac{1}{2}\pi D, \\
 H_{23} &= H_{32} = -\frac{1}{2}\pi D.
 \end{aligned} \tag{1.110}$$

该形式的四个本征态分别为 $|\alpha\alpha\rangle$, $\cos\theta|\alpha\beta\rangle + \sin\theta|\beta\alpha\rangle$, $\cos\theta|\beta\alpha\rangle - \sin\theta|\alpha\beta\rangle$, $|\beta\beta\rangle$ 。这里

$$\tan(2\theta) = \frac{-\pi D}{\omega_1 - \omega_2}. \tag{1.111}$$

很自然地可以看出，这四个本征态不再是四个计算基态。我们把这四个态标记为量子计算中的 $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ 态的话，这依然是一个两比特体系。这样标记的好处是 NMR 的谱线对应的是两个本征态之间的跃迁，那么和液体 NMR 中采用核自旋作为 qubit 的标记一样，每条谱线只会与量子计算中的两个能级相关，因此更加直观。当然，在这种标记方式下，核选脉冲的意义将变得不明显，而线选脉冲由于是对一个跃迁进行操作，因此将发挥更大的作用。更加方便的是用 SMP 或者 GRAPE 脉冲，它们的精度会更高。同时注意一点，当附加一个能够使哈密顿量对角化的么正操作后，其实这两种标记方式是等价的。

该哈密顿量的四个本征态所对应的本征值分别是

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -\frac{1}{2}\omega_1 - \frac{1}{2}\omega_2 + \frac{1}{2}\pi D, \\
 E_2 &= +\frac{1}{2}\sqrt{(\omega_1 - \omega_2)^2 + \pi^2 D^2} - \frac{1}{2}\pi D, \\
 E_3 &= -\frac{1}{2}\sqrt{(\omega_1 - \omega_2)^2 + \pi^2 D^2} - \frac{1}{2}\pi D, \\
 E_4 &= +\frac{1}{2}\omega_1 + \frac{1}{2}\omega_2 + \frac{1}{2}\pi D,
 \end{aligned} \tag{1.112}$$

通过本征值我们可以得到 NMR 谱线中各条谱峰的位置为

$$+\frac{1}{2}\omega_1 + \frac{1}{2}\omega_2 \pm \frac{1}{2}\pi D \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\omega_1 - \omega_2)^2 + \pi^2 D^2}. \tag{1.113}$$

而这四条谱峰的高度将正比于 $(\cos\theta + \sin\theta)^2$, $(\cos\theta - \sin\theta)^2$ 。当 $\pi D \ll \omega_1 - \omega_2$,

也就是 $\tan(2\theta) \approx 0$ 时, 我们发现四条谱峰依然等高, 这就退化到了液体 NMR 中的弱耦合近似情况。

1.4.2 液晶 NMR 量子计算的具体过程

在了解到哈密顿量形式及本征值和本征态的不同后, 下一点就是液晶 NMR 中哈密顿量的各个参数的确定。和液体情况不同, 液晶样品的哈密顿量形式中由于所有项并不是两两对易的, 我们不可能在简单地通过热平衡态的 NMR 谱线得到其数值大小了。比较原始的确定哈密顿量各个参数的办法是通过二维 Z-COSY 实验^[37]。我们采用的是拟合的办法, 其步骤如下:

1. 把样品溶于液体溶剂 Acetone 中, 测出 J 耦合的大小, 并将其代入哈密顿量形式中作为已知参数。
2. 对哈密顿量中的化学位移及偶极耦合常数作初始猜测, 然后计算该猜测的哈密顿量形式对应的 NMR 热平衡谱中各条谱线的位置。
3. 把计算出来的各条谱线同实验上各条谱线的位置进行平方差求和运算, 以确定两者之间的误差大小。如果足够小 (1Hz 之内), 则保留这组参数, 否则对当前的哈密顿量参数进行扰动, 并重新计算谱线。
4. 在得到所有参数后, 我们将计算 NMR 谱线的强度并与实验结果对比, 作为除谱线位置外的另一组对比参数。我们发现只要谱线位置符合的话, 谱线强度也符合的很好。

目前, 我们已经在 2,3,4 qubit 的液晶体系上实现了哈密顿量的解谱, 并保证满足液晶中的序参量与几何性质要求^[38]。同时, 这些样品上也都完成了 PPS 制备, 以及执行了相应的量子计算任务, 并得到了很好的实验结果。这些都说明我们的解谱确定哈密顿量参数的过程是正确的。

当前实验室内常用的液晶样品包括: 2 qubit 的 1-bromo-2,3,5-dichloro-benzene, 3 qubit 的 3-bromo-1,2-dichloro-benzene, 以及 4 qubit 的 1-bromo-2-dichloro-benzene。所有溶剂均为 ZLI1132 液晶溶剂。这些样品其实是把苯环上的六个 ^1H 用没信号的 Br 或者 Cl 代替, 而剩下的 ^1H 由于化学结构上不对称就可以作为两能级的 qubit 使用, 它们的结构图如图1.14所示。

NMR 量子计算的第一步是 PPS 制备, 液晶样品也不例外。除了前面提到过的液体 NMR 中各种 PPS 制备方法, 针对液晶体系特殊的哈密顿量形式又有一些新的技巧, 比如线选脉冲饱和能级^[39], 制备 PPS 对^[40-42] 等。这些方法都有着或多或少的局限性。借助于 GRAPE 脉冲, 我们设计了基于 GRAPE 搜索

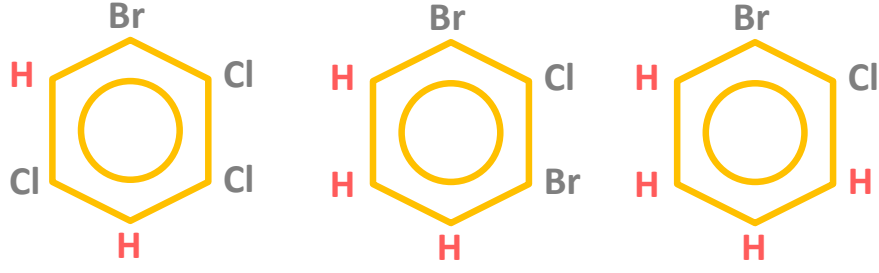


图 1.14 2, 3, 4 qubit 的液晶样品结构。苯环上的 ^1H 被用作 qubit。

的 PPS 制备方法，其基本思路为

$$\sum_i I_z^i \rightarrow U \rightarrow Gz \rightarrow \rho_{pps}. \quad (1.114)$$

可以看出，我们只用了一个么正操作和一个梯度场，就可使实现 PPS。该方法的核心在于如何找到这样一个操作 U ，并把它写成脉冲的形式。

首先我们把 U 分割，即

$$U = U_N U_{N-1} \cdots U_1, \quad (1.115)$$

其中

$$U_j = e^{-i\Delta t((H_{int} + \sum_{k=1}^m u_k(j)H_{ext}))}. \quad (1.116)$$

对于 PPS，我们设其理论形式为

$$\rho_{th} = |0 \dots 0\rangle \langle 0 \dots 0| - \frac{I}{2^n}, \quad (1.117)$$

n 为 qubit 的数目。在施加了 GRAPE 脉冲及梯度场后，我们的末态为

$$\rho_{exp} = Gz(U\rho_{in}U^\dagger). \quad (1.118)$$

为了衡量 ρ_{exp} 和 ρ_{th} 之间的相似程度，我们采用了式1.119定义的相关性

$$C = \frac{\text{Tr}(\rho_{exp}\rho_{th})}{\sqrt{\text{Tr}(\rho_{exp}^2)\text{Tr}(\rho_{th}^2)}}. \quad (1.119)$$

假设

$$U = U_B U_j U_A, \quad (1.120)$$

且 $U_A = U_{j-1} \cdots U_1$, $U_B = U_N \cdots U_{j+1}$ 。我们对幅度因子 u_j 进行一个微扰 Δu_j 后, 可以得到相关性 C 感受到的微扰 ΔC_j , 然后我们就可以进行新的梯度修正

$$u_j \rightarrow u_j + \epsilon \frac{\Delta C_j}{\Delta u_j}. \quad (1.121)$$

这个思路和 GRAPE 脉冲的思想非常类似, 而通过循环搜索, 我们可以得到保真度很高的 GRAPE 脉冲。例如, 在 4 qubit 液晶体系, 我们可以得到 $2000\mu s$, 分为 400 小片, 保真度为 0.97 的 GRAPE 脉冲。

在完成了 PPS 制备后, 我们要考虑如何有效地在液晶体系上进行么正演化。注意到液晶的哈密顿量不是对角的, 一个很自然的想法是把它进行对角化

$$\begin{aligned} U^\dagger H U &= H_D, \\ U H_D U^\dagger &= H. \end{aligned} \quad (1.122)$$

其中 H_D 指的是对角化后的哈密顿量, 对应于液体 NMR 中的形式。必须提到矩阵对角化在经典计算上本身是一个多项式难的问题, 所以这一步其实仅在低量子位有效。而哈密顿量对角化的量子算法可以参见文献^[43]。

在对角化之后, 我们发现经过这个么正变换 U 后液晶体系的读出和液体居然是一样的, 因为

$$\begin{aligned} & \text{Tr}(e^{-iH_D t} R \rho R^\dagger e^{iH_D t} \cdot F^+) \\ &= \text{Tr}(U e^{-iH_D t} U^\dagger \cdot U R U^\dagger \cdot U \rho U^\dagger \cdot U R^\dagger U^\dagger \cdot U e^{iH_D t} U^\dagger \cdot U F^+ U^\dagger) \\ &= \text{Tr}(e^{-iH t} \cdot U R U^\dagger \cdot U \rho U^\dagger \cdot U R^\dagger U^\dagger \cdot e^{iH t} \cdot F^+). \end{aligned} \quad (1.123)$$

那么, 我们只要把液体 NMR 中的初态 ρ 和么正操作 R 转化到液晶体系中就可以了, 需要的仅仅是把初态变为 $U \rho U^\dagger$, 操作变为 $U R U^\dagger$ 。

液晶 NMR 的读出和逻辑操作类似, 只要把用于液体的重构序列进行一个么正变换 U 即可, 而其测量方式和液体 NMR 完全相同。

最后整理下液晶 NMR 量子计算的步骤。

- 测量液晶样品的热平衡谱, 并解谱得到哈密顿量形式。
- 求解其本征值和本征态, 并进行对角化操作, 得到用来对角化的操作 U 及对角化后的哈密顿量 H_D 。
- 假定量子计算实验是在液体 NMR 样品 H_D 中完成的, 并设计在该样品完成时如何进行初态制备, 逻辑操作, 结果读出等。
- 把 H_D 中所有的操作前面都施加么正变换 U , 再移植到液晶样品中。由

于 U 的形式一般不规律，最好是通过 SMP 或是 GRAPE 脉冲算出。

- 液晶中所有的测量读出脉冲也和液体类似，只不过加上么正变换 U 。

为了证明以上思路的可行性，接下来我们将以一个 4 qubit 液晶 NMR 实验为例具体讲解。

1.4.3 利用 4 qubit 液晶样品绝热分解 143

前面已经提到，最能代表量子计算优越性的算法是 Shor 的大数分解算法^[44]，但实验上想验证 Shor 算法是非常困难的。最早的实验是 2000 年利用 7 qubit NMR 样品分解了 15^[45]，这也是 NMR 量子计算早期的代表工作。后来，我们组提出了基于绝热的量子分解算法，需要的资源更少，复杂度也更低，并在 3 qubit 样品上成功分解了 21^[46]，光学体系也相继分解了 15^[47]。最近，我们改进了自己提出的绝热分解算法，设计了 4 qubit 分解 143 的实验方案，并在 4 qubit 液晶 NMR 样品上完成了这一实验^[48]。本节我们就将主要介绍该实验过程。

首先简要介绍一下绝热量子计算 (adiabatic quantum computing, AQC)^[49]。在 AQC 的框架中，量子体系首先被制备到初始哈密顿量 H_0 的基态，而量子计算任务的答案则蕴含在最终哈密顿量 H_p 的基态里。在计算过程中，含时的哈密顿量非常缓慢地从 H_0 变化到 H_p ，保证量子体系一直处于当前哈密顿量的基态上。最后，通过测量末态，也就是 H_p 的基态，我们就可以得到问题的解。最简单的哈密顿量变化形式是如下插值

$$H(t) = [1 - s(t)]H_0 + s(t)H_p, \quad (1.124)$$

其中 $s(t)$ 从 0 缓慢地变化到 1。AQC 比较适合的是求解最优化问题，因为很多最优的解都是蕴含在哈密顿量的基态中。

对于大数的分解问题，我们可以用 $N = p \times q$ 给出， p 和 q 是 N 的两个质因子。设计 AQC 的核心在于如何把这样一个等式转化为最优化问题，最直接的想法是通过等式 $N - pq = 0$ 来构造函数 $f(x, y) = (N - xy)^2$ 。 $f(p, q) = 0$ 肯定是这个函数的最小值，也是其最优解。那么，末态哈密顿量就可以选择为

$$H_p = (N - \hat{x} \times \hat{y})^2, \quad (1.125)$$

其中， \hat{x} 用 $\sum_{i=0}^{n-1} 2^i (\frac{1-\sigma_z^i}{2})$ 来构造，且 n 为 x 转化为二进制时的比特数。算子 \hat{x} 也可以类似构造。那么， H_p 的基态能量就为 0，代表 $N = p \times q$ 。NMR 上进行的 21 分解的实验就是用这种构造方式完成的^[46]。

在上述方案中，末态哈密顿量的能谱宽度是和要分解的数 N 成线性关系的，因此当 N 很大时，实验上很难找到如此具有如此大能谱宽度的哈密顿量。后来，Schaller 和 Schützhold^[50,51] 利用求解线性方程组的方法优化了这个问题。在 143 分解中，我们把 $N = p \times q$ 转化为二进制形式的乘法，并用图1.15中所示的二进制乘法表列出一系列的方程，构成线性方程组。可以看到，目标问题把确定质因子 p 和 q 转化为确定二进制数 p_1, p_2 和 q_1, q_2 ，然后把二进制数 $1p_2p_11$ 和 $1q_2q_11$ 转化为十进制即可。

	b_7	b_6	b_5	b_4	b_3	b_2	b_1	b_0
Multiplier					1	p_2	p_1	1
					1	q_2	q_1	1
Binary-multiplication					1	p_2	p_1	1
				q_1	p_2q_1	p_1q_1	q_1	
			q_2	p_2q_2	p_1q_2	q_2		
		1	p_2	p_1	1			
Carry	z_{67}	z_{56}	z_{45}	z_{34}	z_{23}	z_{12}		
	z_{57}	z_{46}	z_{35}	z_{24}				
Product	1	0	0	0	1	1	1	1

图 1.15 $N = 143$ 分解中用到的二进制乘法表。 $N = p \times q$ 中的所有数值都被转化为了二进制，然后利用这个乘法结构可以列出一个线性方程组。

通过约束条件化简该线性方程组后 (具体过程请参见文章^[48])，我们得到目标，也就是末态哈密顿量的形式为

$$\begin{aligned}
 H_p = & 5 - 3\hat{p}_1 - \hat{p}_2 - \hat{q}_1 + 2\hat{p}_1\hat{q}_1 - 3\hat{p}_2\hat{q}_1 \\
 & + 2\hat{p}_1\hat{p}_2\hat{q}_1 - 3\hat{q}_2 + \hat{p}_1\hat{q}_2 + 2\hat{p}_2\hat{q}_2 + 2\hat{p}_2\hat{q}_1\hat{q}_2,
 \end{aligned} \quad (1.126)$$

其中 \hat{p} 和 \hat{q} 被映射到了 qubit 空间 $\hat{p}_1 = \frac{1-\sigma_z^1}{2}, \hat{p}_2 = \frac{1-\sigma_z^2}{2}, \hat{q}_1 = \frac{1-\sigma_z^3}{2}, \hat{q}_2 = \frac{1-\sigma_z^4}{2}$ 。

绝热演化的初始哈密顿量可以选择容易制备其初态的哈密顿量形式，例如这里选择的是

$$H_0 = g(\sigma_x^1 + \sigma_x^2 + \cdots + \sigma_x^n). \quad (1.127)$$

该哈密顿量的基态形式为所有计算基矢的叠加，即

$$|\psi_i\rangle = \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right)^{\otimes n}. \quad (1.128)$$

在计算过程中，首先我们把量子体系制备到 H_0 的基态 ψ_i 上，然后依据插值公

式1.125把 H_0 缓慢地变化到 H_p ，绝热定理保证系统始终处于当前哈密顿量的基态上。最后，通过测量末态的形式，我们可以得到二进制数 p_1, p_2 和 q_1, q_2 ，从而得到 143 分解问题的解。该过程的数值模拟可以参加图1.16(a)。

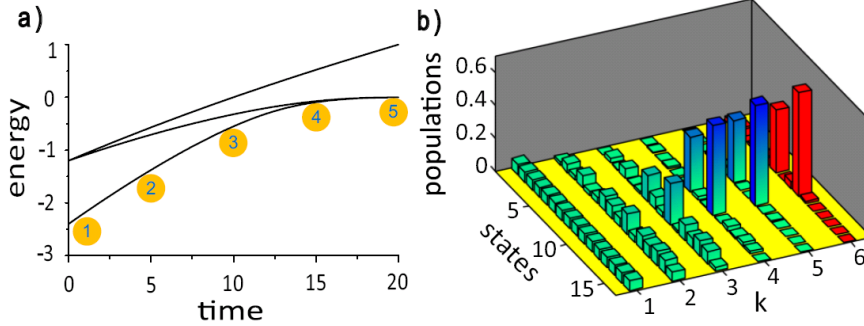


图 1.16 (a) 143 分解中，最低的三个能级变化的示意图。初始哈密顿量中的 g 因子设为 0.6。(b) $k = 1 - 5$ 对应图 (a) 中 5 个点的布居度分布。 $k = 6$ 则是实验上得到的末态的布居度分布。可以看到，最终所有的布居度几乎都处于 $|0110\rangle\langle 0110|$ 和 $|1001\rangle\langle 1001|$ 上，表示 143 分解的结果为 $p = 11, q = 13$ 或者 $p = 13, q = 11$ 。

在实验上，我们选择了 4 qubit 液晶样品 1-bromo-2-dichloro-benzene(图1.17(a))溶于 ZLI1132 作为量子体系。样品中的四个 ^1H 核自旋作为四个 qubit，其哈密顿量形式为

$$\mathcal{H} = 2\pi \sum_i \nu_i I_z^i + 2\pi \sum_{i,j,i < j} J_{ij} I_z^i I_z^j + 2\pi \sum_{i,j,i < j} D_{ij} (2I_z^i I_z^j - I_x^i I_x^j - I_y^i I_y^j). \quad (1.129)$$

通过热平衡态 (图1.17(b)) 的解谱，我们得到了哈密顿量中的所有参数为化学位移 $\nu_1 = 2264.8\text{Hz}$, $\nu_2 = 2190.4\text{Hz}$, $\nu_3 = 2127.3\text{Hz}$, $\nu_4 = 2113.5\text{Hz}$ ，偶极耦合大小 $D_{12} = -706.6\text{Hz}$, $D_{13} = -214.0\text{Hz}$, $D_{14} = -1166.5\text{Hz}$, $D_{23} = -1553.8\text{Hz}$, $D_{24} = -149.8\text{Hz}$, $D_{34} = -95.5\text{Hz}$ ， J 耦合大小 $J_{12} = 0\text{Hz}$, $J_{13} = 1.4\text{Hz}$, $J_{14} = 8\text{Hz}$, $J_{23} = 8\text{Hz}$, $J_{24} = 1.4\text{Hz}$, $J_{34} = 8\text{Hz}$ 。得到了这些参数后，我们还对热平衡态中的各条谱线进行了相应的能级跃迁标记 (图1.17(c))。

实验的第一步是 PPS 制备。一般来说，为了构造 PPS 中的四体关联，空间平均法需要很多脉冲和梯度场的组合。而在 143 分解的实验中，我们利用 GRAPE 算法计算了一个么正算子，并把它打包成了 GRAPE 脉冲。在热平衡态上施加完这个 GRAPE 脉冲以及梯度场之后，我们就成功制备了 PPS。具体来说，实验上热平衡态的形式是 $\rho_{eq} = \sum_{i=1}^4 \gamma_i I_z^i$ ，其中 γ_i 是核自旋的旋磁比。对于同种核自旋来说， γ 的值是可以忽略的。

理论上我们要制备的 PPS 为

$$\rho_{theo} = -\frac{1}{16} \mathbb{I} + |0000\rangle\langle 0000|, \quad (1.130)$$

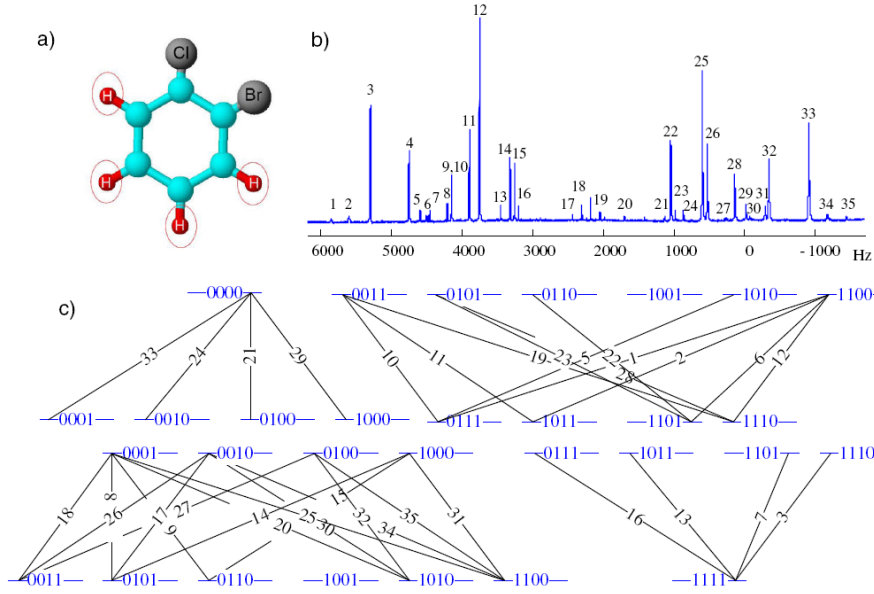


图 1.17 143 分解实验中用到的 4 qubit 液晶 NMR 样品。(a) 1-bromo-2-dichloro-benzene 的分子结构。(b) 热平衡态的 NMR 谱线。跃迁的序号是依据谱线频率的降序排列的。(c) 与 (b) 图相关的能级跃迁图。

其中 \mathbb{I} 是 16×16 的单位阵。首先，我们猜测一个算子 U_0 ，并计算当前 PPS 理论形式 ρ_{theo} 与实验结果

$$\rho_{fin} = Gz(U_0 \rho_{eq} U_0^\dagger) \quad (1.131)$$

之间的保真度 F 。如果 F 高于我们的预设值 (在本实验中 F 设为 0.99)，我们就把 U_0 打包成一个 GRAPE 脉冲。否则，我们将在 GRAPE 算法的指导下，重复上面的过程计算一个新的 U_0 ，直到满足条件的 U_{pps} 找到。对于本实验中的液晶样品来说，我们寻找到执行 U_{pps} 的 GRAPE 脉冲的脉宽为 7ms，250 小片。在加完 U_{pps} 及梯度场后，如果忽略到梯度场不能消除的但几乎为 0 的零量子相干，我们得到的 PPS 的对角元为 [1.512, -0.098, -0.120, -0.109, -0.100, -0.072, -0.112, -0.098, -0.106, -0.136, -0.083, 0.097, -0.052, -0.112, -0.081, -0.136]。在扣除单位阵背景下，这个态和 $|0000\rangle$ 之间的保真度超过 0.99，而相比于热平衡态，我们制备的 PPS 信号损失了 76.8%。在制备了 PPS 后加了一个小角度观测的 NMR 谱参见图 1.19(a)。

143 分解的核心是通过绝热量子计算实现的。首先，我们在制备的 PPS $|0000\rangle$ 加一个 \hat{y} 方向的 $\pi/2$ 硬脉冲，同时翻转所有的 qubit。这样，系统就被制备到 H_0 的基态，也就是 $|-\rangle^{\otimes 4}$ ($|-\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$)。绝热演化过程我们一共分了 M 步^[52,53]，且插值方式选择为线性的 $s(t) = t/T$ 。因此，每一小步的绝热

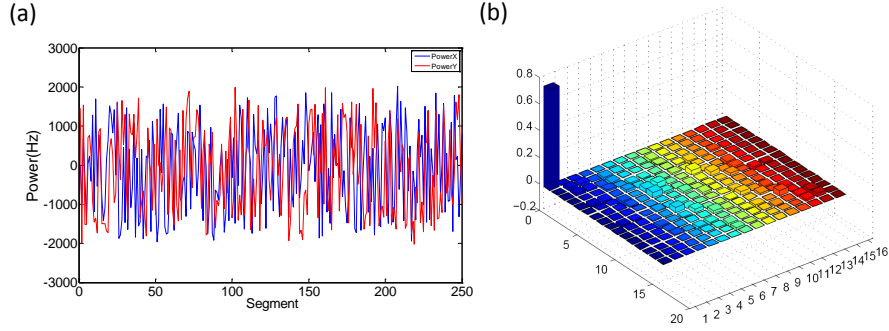


图 1.18 (a) 143 分解中制备 PPS 用到的 GRAPE 脉冲。蓝线和红线分别代表加在 \hat{x} 方向和 \hat{y} 方向的射频场强度的变化。(b) 数值模拟的制备 PPS 的结果，这里只给出了实部。可以看出，几乎所有的信号都集中在布居度 $|0000\rangle\langle 0000|$ 上，而这条峰一般被用作 NMR 量子计算测量的基准。

演化为 $U_m = e^{-iH(m)\tau}$ ，其中 $\tau = T/M$ 为每一步的演化时间，而

$$H_m = (1 - \frac{m}{M})H_0 + \frac{m}{M}H_p, \quad (1.132)$$

为当前绝热演化的哈密顿量。总的演化算子就可以写成 $U_{ad} = \prod_{m=1}^M U_m$ ，且当 $T, M \rightarrow \infty$ 绝热条件就会满足。实验中我们选择的参数为 $g = 0.6, M = 20, T = 20$ 。数值模拟的结果发现系统最终处于 H_p 基态的概率为 98.9%。而在实验上，我们把每五步绝热演化的么正算子计算成一个 GRAPE 脉冲，每个 GRAPE 脉冲的时间为 15ms，且保真度超过 0.99，因此总的演化时间为 60ms。

最后，我们需要对末态密度矩阵 ρ_{fin} 的所有对角项进行测量，采用的是我前提出的密度矩阵对角化方法^[54]。在 4 qubit 液晶中，我们采用了 32 个读出脉冲来测量所有的布居度，每个读出脉冲都打包成了 20ms 的 GRAPE 脉冲。结合归一化条件 $\sum_{i=1}^{16} P(i) = 1$ ，我们可以得到末态 ρ_{fin} 中所有对角元的值。由于本实验中演化时间为 60ms，而 T_2^* 也只有 102ms，所以我们利用 e^{-T_{tot}/T_2^*} 补偿了退相干的影响，实验结果显示在图 1.16(b) 中的 $k = 6$ 步。可以看出，在补偿了退相干后，实验结果 ($k = 6$) 和理论预期 ($k = 5$) 是非常吻合的。

另一方面，为了从 NMR 的实验谱线上给出更容易理解的结果，我们在得到了末态 ρ_{fin} 后，在第二和第三个 qubit 上加一个 π 脉冲，然后在加一个梯度场，即

$$\rho_{out} = Gz(R_y^{2,3}(\pi)\rho_{fin}R_y^{2,3}(\pi)^\dagger). \quad (1.133)$$

然后再利用小角度 (3°) 进行观测。这样做的好处是我们把实验结果从 $|0110\rangle\langle 0110|$ 和 $|1001\rangle\langle 1001|$ 转化到了 $|0000\rangle\langle 0000|$ 和 $|1111\rangle\langle 1111|$ 。在液晶样品

中，由于哈密顿量的本征态不再是 Zeeman 直积态，而是它们的线性组合，因此传统的 $\pi/2$ 观测不再是一条谱线。但是， $|0000\rangle$ 和 $|1111\rangle$ 则依然是哈密顿量的本质态，虽然它们的 $\pi/2$ 观测也不是单一的吸收峰，但小角度激发的结果主要只包含一根吸收峰。也就是说，在进行了以上变换且用小角度观测后，我们得到的实验结果应该主要含有两条谱线，一条位于 ρ_{0000} 的小角度观测处，另一条位于 ρ_{1111} 的小角度观测处。图1.19直观地给出了我们的实验结果 (蓝线)，和模拟结果 (红线) 几乎完全一样，说明我们找到 143 的质因子为 11 和 13 或者 13 和 11。

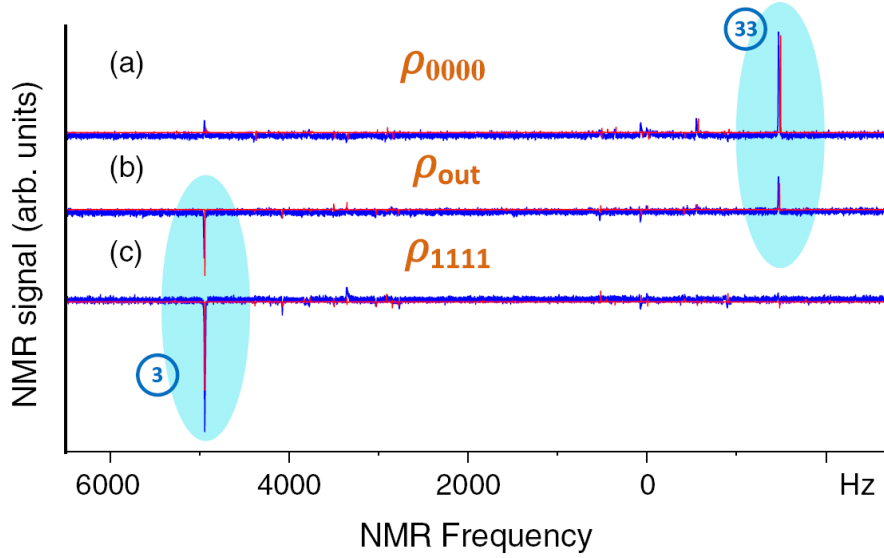


图 1.19 (a) NMR 实验上小角度观测的 PPS 谱线及输出态 ρ_{out} 的谱线。蓝线为实验结果，而红线为理论结果。谱线上标的 No. 33 和 No. 3 对应于图1.17(b) 中的序号。

总结来说，我们利用改进的绝热算法在实验上成功分解了 143。由于利用的是 4 qubit 液晶 NMR 样品，所以从哈密顿量解谱，初态制备，绝热演化到测量读出等很多方面都是依靠新的设计。143 分解的成功实现也进一步验证了这些实验思路都是正确的。目前为止，143 是量子计算实验上分解的最大的数，也是唯一一个超过 100 的数字。

本节的工作已发表在 Phys. Rev. Lett. 108, 130501 (2012) 上^[48]。

1.5 小结

在本章中，我们简要叙述了 NMR 量子计算的理论框架，并给出了一些实验上的技术及处理技巧。以目前的实验进展来看，液体 NMR 量子计算已经发展的非常成熟，并且会对 NMR 本身以及其他体系产生很重要的推动作用。比如，动力学解耦 (dynamical decoupling) 技术已经在很多非量子计算的实验中得

到了应用，而 GRAPE 脉冲技术甚至移植到了其他体系，例如 ESR，离子阱中等。但我们也要认识到，虽然 NMR 的优势很大，它也有很大的局限性，主要集中在以下两点：

首先，NMR 量子计算是系综量子计算，我们已经说过大概要 10^{18} 个分子才能探测，赝纯态的“赝”字也正表示 NMR 还不能制备出真正的纯态。不仅不能制备真正的纯态，量子计算中的另一个重要资源—纠缠也是不可能实现的。基于系综的这些问题也使得 NMR 量子计算经常被很多学者诟病，认为它并不是实现了真正的量子计算。尽管如此，一些演示性的实验确实很适合用 NMR 平台，而量子无序 (quantum discord) 的提出为 NMR 量子计算指明了另一个方向，因为 NMR 中确实是存在量子无序的。

第二，NMR 的可扩展性并不是很好。当自旋数目增加时，整个频率空间由于有 $n2^{n-1}$ 条共振谱线而会变得非常拥挤，非常难于寻址，另外，自旋数目增加后选择脉冲的时间会变得很长，导致逻辑操作的时间大大延长，非常不利用量子计算任务。

虽然有这些弱点，但 NMR 依然是量子计算领域不可或缺的实验方向，从中产生的很多新技术。新思路，新方法，以及通过它验证的众多量子计算理论，都大大保证了 NMR 量子计算的生命力，本篇论文的后半部分的实验工作都是基于 NMR 的，通过它们的介绍我们也可以看出 NMR 上还是能做出一些非常漂亮的工作。

最后，比较推荐的关于 NMR 的参考书有两本：

- Freeman 的《Spin Choreography》^[31]。这本书非常系统全面，且以通俗易懂的语言回顾了高分辨的 NMR 技术及自旋动力学。这本书在科大东区的外文图图书馆有一本。

- NMR 领域的第一个诺贝尔奖得主 Ernst 写的经典著作《Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions》^[55]。这本书有中译本，而且其权威性不容置疑，但相对上一本要难懂一些。不过对于了解基本的 NMR 技术，中文可能更适合一些。

据我所知，目前并没有 NMR 量子计算的教科书，但有一些比较适合的综述性文献^[56-59]。尤其推荐的是 Vandersypen 和 Chuang 撰写的《NMR techniques for quantum control and computation》^[58]，对于 NMR 量子计算的介绍非常详尽，而两人也是该领域的著名学者。另外就是 Jones 的《Quantum computing with NMR》^[59]，一共有 500 余篇关于 NMR 量子计算的参考文献 (截止 2010 年)，可以作为很有用的工具书使用。

参考文献

- [1] S. Millman I.I. Rabi, J.R. Zacharias and P. Kusch. A new method of measuring nuclear magnetic moment. *Phys. Rev.*, 53(318), 1938.
- [2] A. Filler. The history, development and impact of computed imaging in neurological diagnosis and neurosurgery: Ct, mri, and dti. *Nature Precedings*, 2009.
- [3] U. Haeberlen and J. Waugh. Coherent averaging effects in magnetic resonance. *Phys. Rev.*, 175(453), 1968.
- [4] C. Griesinger O. Sorensen R. Bruschweiler, J. Madsen and R. Ernst. Two-dimensional nmr-spectroscopy with soft pulses. *J. Magn. Reson.*, 73(380), 1987.
- [5] F. Bloch and A. Siegert. Magnetic resonance for nonrotating fields. *Phys. Rev.*, 57(522), 1940.
- [6] A. Redfield. On the theory of relaxation processes. *IBM J. Res. Dev.*, 1(19), 1957.
- [7] J. Jeener. Superoperators in magnetic resonance. *Adv. Magn. Reson.*, 10(1), 1982.
- [8] T. Frenkiel J. Keeler C. J. Bauer, R. Freeman and A. J. Shaka. Gaussian pulses. *J. Magn. Reson.*, 58(442), 1984.
- [9] W. Warren. Effects of arbitrary laser or nmr pulse shapes on population inversion and coherence. *J. Chem. Phys.*, 81(5437), 1984.
- [10] H. Geen and R. Freeman. Band-selective radiofrequency pulses. *J. Magn. Reson.*, 93(93), 1991.
- [11] D. Abramovich and S. Vega. Derivation of broadband and narrowband excitation pulses using the floquet formalism. *J. Magn. Reson.*, 105(30), 1993.
- [12] V. Ermakov A. Khitrin and B. Fung. Information storage using a cluster of dipolar-coupled spins. *Chem. Phys. Lett.*, 360(161), 2002.
- [13] J. Todd A. Gilchrist A. Harrow-D. Mortimer M. Nielsen M. Bremner, C. Dawson and T. Osborne. Practical scheme for quantum computation with any two-qubit entangling gate. *Phys. Rev. Lett.*, 89(247902), 2002.
- [14] J. Jones and E. Knill. Efficient refocussing of one spin and two spin interactions for nmr quantum computation. *J. Magn. Reson.*, 141(322), 1999.
- [15] F. Yamaguchi D. W. Leung, I. L. Chuang and Y. Yamamoto. Efficient implementation of coupled logic gates for quantum computation. *Phys. Rev. A*, 61(042310), 2000.
- [16] R. Carbajo N. Linden, H. Barjat and R. Freeman. Pulse sequences for nmr quantum computers: how to manipulate nuclear spins while freezing the motion of coupled neighbours. *Chem. Phys. Lett.*, 305(28), 1999.

-
- [17] N. Boulant G. Teklemariam-T. F. Havel E. M. Fortunato, M. A. Pravia and D. G. Cory. Design of strongly modulating pulses to implement precise effective hamiltonians for quantum information processing. *J. Chem. Phys.*, 116(7599), 1999.
- [18] J. Yang M. A. Pravia N. Boulant, K. Edmonds and D. G. Cory. Experimental demonstration of an entanglement swapping operation and improved control in nmr quantum-information processing. *Phys. Rev. A*, 68(032305), 2003.
- [19] J. Emerson N. Boulant-M. Saraceno S. Lloyd Y. S. Weinstein, T. F. Havel and D. G. Cory. Quantum process tomography of the quantum fourier transform. *J. Chem. Phys.*, 121(6117), 2004.
- [20] J.A. Nelder and R. Mead. A simplex method for function minimization. *Comput. J.*, 7(308), 1965.
- [21] S. Reich and A. J. Vega. Skin depth measurement in thin metal films by pulse nuclear magnetic resonance nutation technique. *J. Appl. Phys.*, 58(2759), 1985.
- [22] C. Kehlet T. Schulte-Herbruggen N. Khaneja, T. Reiss and S. J. Glaser. Optimal control of coupled spin dynamics: design of nmr pulse sequences by gradient ascent algorithms. *J. Magn. Reson.*, 172(296), 2005.
- [23] P. Schlottmann M. D. Bird, J. E. Crow. The national high magnetic field laboratory: condensed matter science in continuous magnetic fields. *J. Low Temp. Phys.*, 133(203), 2003.
- [24] N. A. Gershenfeld and I. L. Chuang. Bulk spin resonance quantum computation. *Science*, 275(350), 1997.
- [25] A. F. Fahmy D. G. Cory and T. F. Havel. Ensemble quantum computing by nmr- spectroscopy. *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, 94(1634), 1997.
- [26] I. Chuang E. Knill and R. La?amme. Effective pure states for bulk quantum computation. *Phys. Rev. A*, 57(3348), 1998.
- [27] M. H. Sherwood L. M. K. Vandersypen, C. S. Yannoni and I. L. Chuang. Realization of effective pure states for bulk quantum computation. *Phys. Rev. Lett.*, 83(3085), 1999.
- [28] A. Pines D. Suter and M. Mehring. Indirect phase detection of nmr spinor transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 57(242), 1986.
- [29] M. D. Price D. G. Cory and T. F. Havel. Nuclear magnetic resonance spectroscopy: An experimentally accessible paradigm for quantum computing. *Physica D*, 120(82), 1998.
- [30] R. Martinez E. Knill, R. La?amme and C. H. Tseng. An algorithmic benchmark for quantum information processing. *Nature*, 404(368), 2000.
- [31] R. Freeman. Spin choreography. Oxford Univ. Press, 1998.
- [32] C. Negrevergne et al. Benchmarking quantum control methods on a 12-qubit system. *Phys. Rev. Lett.*, 96(170501), 2006.

-
- [33] D. I. Hoult and R. E. Richards. The signal-to-noise ratio of the nuclear magnetic resonance experiment. *J. Magn. Reson.*, 24(71), 1976.
- [34] X. L. Zhou-D. W. Leung I. L. Chuang, L. M. K. Vandersypen and S. Lloyd. Experimental realization of a quantum algorithm. *Nature*, 393(143), 1998.
- [35] N. Gershenfeld I. L. Chuang and M. Kubinec. Experimental implementation of fast quantum searching. *Phys. Rev. Lett.*, 80(3408), 1998.
- [36] M. Kubinec I. L. Chuang, N. Gershenfeld and D. W. Leung. Bulk quantum computation with nuclear magnetic resonance: theory and experiment. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 454(447), 1998.
- [37] A. Ghosh R. Das N. Suryaprakash M.H. Levitt K. V. Ramanathan T. S. Mahesh, N. Sinha and A.Kumar. Quantum information processing by nmr using strongly coupled spins. *Current Science*, 85(932), 2003.
- [38] N. Suryaprakash. Liquid crystals as solvents in nmr spectroscopy: current developments in structure determination. *Current Organic Chemistry*, 4(85), 2000.
- [39] R.Br¹schweiler Z. L. Madi and R. R. Ernst. One- and two-dimensional ensemble quantum computing in spin liouville space. *J. Chem. Phys.*, 109(10603), 1998.
- [40] B. Fung. Use of pairs of pseudopure states for nmr quantum computing. *Phys. Rev. A*, 63(022304), 2001.
- [41] B. Fung. Pairs of pseudopure states for 4- and 5-qubit nuclear magnetic resonance systems. *J. Chem. Phys.*, 115(8044), 2001.
- [42] B. M. Fung and V. L. Ermakov. A simple method for the preparation of pseudopure states in nuclear magnetic resonance quantum information processing. *J. Chem. Phys.*, 121(8410), 2004.
- [43] D. S. Abrams and S. Lloyd. Quantum algorithm providing exponential speed increase for finding eigenvalues and eigenvectors. *Phys. Rev. Lett.*, 83(5162), 1999.
- [44] 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.
- [45] L. M. K. Vandersypen et al. Experimental realization of shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance. *Nature*, 414(883), 2001.
- [46] N. Y. Xu G. Qin X. Y. Zhou D. Suter X. H. Peng, Z. Y. Liao and J. F. Du. Quantum adiabatic algorithm for factorization and its experimental implementation. *Phys. Rev. Lett.*, 101(220405), 2008.
- [47] J. C. F. Matthews A. Politi and J. L. O'Brien. Shor's quantum factoring algorithm on a photonic chip. *Science*, 35(1221), 2009.

-
- [48] D. W. Lu X. Y. Zhou X. H. Peng N. Y. Xu, J. Zhu and J. F. Du. Quantum factorization of 143 on a dipolar-coupling nuclear magnetic resonance system. *Phys. Rev. Lett.*, 108(130501), 2012.
 - [49] S. Gutmann J. Lapan A. Lundgren E. Farhi, J. Goldstone and D. Preda. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an np-complete problem. *Science*, 292(472), 2001.
 - [50] R. Schutzhold and G. Schaller. Adiabatic quantum algorithms as quantum phase transitions: First versus second order. *Phys. Rev. A*, 74(060304), 2006.
 - [51] G. Schaller and R. Schutzhold. The role of symmetries in adiabatic quantum algorithms. *Quantum Inf. Comput.*, 10(0109), 2010.
 - [52] T. Hogg G. Breyta M. Steffen, W. van Dam and I. Chuang. Experimental implementation of an adiabatic quantum optimization algorithm. *Phys. Rev. Lett.*, 90(067903), 2003.
 - [53] R. Das A. Patel A. Mitra, A. Ghosh and A. Kumar. Experimental implementation of local adiabatic evolution algorithms by an nmr quantum information processor. *J. Magn. Reson.*, 177(285), 2005.
 - [54] P. Zou X. H. Peng Y. H. Yu S. M. Zhang Q. Chen D. W. Lu, J. Zhu and J. F. Du. Experimental implementation of a quantum random-walk search algorithm using strongly dipolar coupled spins. *Phys. Rev. A*, 81(022308), 2010.
 - [55] G. Bodenhausen R. R. Ernst and A. Wokaun. Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions. Oxford University Press, 1987.
 - [56] N. Gershenfeld and I. L. Chuang. Quantum computing with molecules. *Scientific American*, June, 1998.
 - [57] D. G. Cory E. M. Fortunato T. Havel C. Miquel R. Martinez C. Negrevergne G. Ortiz M. A. Pravia Y. Sharf S. Sinha R. Somma R. La?amme, E. Knill and L. Viola. Introduction to nmr quantum information processing. *arXiv*, 0207172, 2002.
 - [58] L. M. K. Vandersypen and I. L. Chuang. Nmr techniques for quantum control and computation. *Rev. Mod. Phys.*, 76(1037), 2005.
 - [59] J. A. Jones. Quantum computing with nmr. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.*, 59(91), 2010.
 - [60] R. Landauer. Irreversibility and heat generation in the computing process. *IBM J. Res. Dev.*, 5(183), 1961.
 - [61] R. P. Feynman. There is plenty of room at the bottom. *Engineering and Science*, 23(22), 1959.
 - [62] Y. Lecerf. Machines de turing reversibles. *Comptes Rendus*, 257(2597), 1963.
 - [63] C. H. Bennett. Logical reversibility of computation. *IBM J. Res. Dev.*, 17(525), 1973.
 - [64] P. Benioff. The computer as a physical system: Amicroscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines. *J. Stat. Phys.*, 22(563), 1980.

-
- [65] R. P. Feynman. Simulating physics with computers. *Int. J. Theor. Phys.*, 21(467), 1982.
- [66] R. P. Feynman. Quantum mechanical computers. *Optics News*, 2(11), 1985.
- [67] D. Deutsch. Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 400(97), 1985.
- [68] M. Hilbert and P. Lopez. The world's technological capacity to store, communicate and computer information. *Science*, 332(60), 2011.
- [69] D. Deutsch. Quantum computational networks. *Proc. R. Soc. London A*, 425(73), 1985.
- [70] D. P. DiVincenzo. Two-bit gates are universal for quantum computation. *Phys. Rev. A*, 51(1015), 1995.
- [71] S. Lloyd. Almost any quantum logic gate is universal. *Phys. Rev. Lett.*, 75(346), 1995.
- [72] A. Barenco D. Deutsch and A. Ekert. Universality in quantum computation. *Proc. R. Soc. London A*, 449(669), 1995.
- [73] D. Dieks. Communication by epr devices. *Phys. Lett. A*, 92(271), 1982.
- [74] W. K. Wootters and W. H. Zurek. A single quantum cannot be cloned. *Nature*, 299(802), 1982.
- [75] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. Quantum computation and quantum information. Cambridge University Press, Cambridge, England, 2000.
- [76] A. Steane. Quantum computing. *Rep. Prog. Phys.*, 61(117), 1998.
- [77] J. Preskill. Lecture notes on quantum information and computation. available at <http://theory.caltech.edu/people/preskill/>, 1998.
- [78] C. H. Bennett and D. P. DiVincenzo. Quantum information and computation. *Nature*, 404(247), 2000.
- [79] G. Casati G. Benenti and G. Strini. Principles of quantum computation and information. World scientific publishing Co. Pte. Ltd., 2004.
- [80] 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.
- [81]
- [82] 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.
- [83] R. Raussendorf and H. J. Briegel. A one-way quantum computer. *Phys. Rev. Lett.*, 86(5188), 2001.

-
-
- [84] R. Laflamme E. Knill and G. J. Milburn. A scheme for efficient quantum computation with linear optics. *Nature*, 409(46), 2001.
- [85] J. C. F. Matthews A. Politi and J. L. O’Brien. Shor’s quantum factoring algorithm on a photonic chip. *Science*, 325(1221), 2009.
- [86] J. L. O’Brien. Optical quantum computing. *Science*, 318(1567), 2007.
- [87] A. Migdal and J. Dowling. Single-photon detectors, applications, and measurement. *J. Mod. Opt.*, 51, 2004.
- [88] R. H. Hadfield. Single-photon detectors for optical quantum information applications. *Nature Photon*, 3(696), 2009.
- [89] B. Sanders P. Grangier and J. Vuckovic. Focus on single photons on demand. *New J. Phys.*, 6, 2004.
- [90] A. J. Shields. Semiconductor quantum light sources. *Nature Photon*, 1(215), 2007.
- [91] 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.
- [92] J. I. Cirac and P. Zoller. Quantum computations with cold trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, 74 (4091), 1995.
- [93] 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.
- [94] J. I. Cirac and P. Zoller. A scalable quantum computer with ions in an array microtraps. *Nature*, 404(579), 2001.
- [95] D. Wineland and R. Blatt. Entangled states of trapped atomic ions. *Nature*, 453(1008), 2009.
- [96] T. Monz et al. 14-qubit entanglement: Creation and coherence. *Phys. Rev. Lett.*, 106(130506), 2011.
- [97] O. Morsch and M. Oberthaler. Dynamics of bose-einstein condensates in optical lattices. *Rev. Mod. Phys.*, 78(179), 2006.
- [98] X. Li K. D. Nelson and D. S. Weiss. Imaging single atoms in a three-dimensional array. *Nature Phys.*, 3(556), 2007.
- [99] P. Wrtz et al. Experimental demonstration of single-site addressability in a two-dimensional optical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 103(080404), 2009.
- [100] 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.
- [101] M. J. Gibbons et al. Nondestructive fluorescent state detection of single neutral atom qubits. *Phys. Rev. Lett.*, 106(133002), 2011.

-
-
- [102] J. F. Sherson et al. Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic mott insulator. *Nature*, 467(68), 2010.
- [103] S. Ashhab I. Buluta and F. Nori. Natural and artificial atoms for quantum computation. *Rep. Prog. Phys.*, 74(104401), 2011.
- [104] J. Clarke and F. K. Wilhelm. Superconducting quantum bits. *Nature*, 453(1031), 2008.
- [105] J. Q. You and F. Nori. Superconducting circuits and quantum information. *Phys. Today*, 58(42), 2005.
- [106] J. Q. You and F. Nori. Atomic physics and quantum optics using superconducting circuits. *Nature*, 474(589), 2011.
- [107] M. Hofheinz et al. Synthesizing arbitrary quantum states in a superconducting resonator. *Nature*, 459(546), 2009.
- [108] L. DiCarlo et al. Demonstration of two-qubit algorithms with a superconducting quantum processor. *Nature*, 460(240), 2009.
- [109] M. Neeley et al. Generation of three-qubit entangled states using superconducting phase qubits. *Nature*, 467(570), 2010.
- [110] L. DiCarlo et al. Preparation and measurement of three-qubit entanglement in a superconducting circuit. *Nature*, 467(574), 2010.
- [111] G. Sun et al. Tunable quantum beam splitters for coherent manipulation of a solid-state tripartite qubit system. *Nature Commun.*, 1(51), 2010.
- [112] T. D. Ladd et al. Quantum computers. *Nature*, 464(45), 2010.
- [113] J. J. L. Morton et al. Solid-state quantum memory using the ^{31}P nuclear spin. *Nature*, 455(1085), 2008.
- [114] D. Hanneke et al. Realization of a programmable two-qubit quantum processor. *Nature Phys.*, 6(13), 2010.
- [115] R. Hanson et al. Spins in few-electron quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, 79(1217), 2007.
- [116] D. M. V. Guredev et al. Quantum register based on individual electronic and nuclear spin qubits in diamond. *Science*, 316(1312), 2007.
- [117] K. C. Nowack et al. Coherent control of a single electron spin with electric fields. *Science*, 318(1430), 2007.
- [118] M. H. Mikkelsen et al. Optically detected coherent spin dynamics of a single electron in a quantum dot. *Nature Phys.*, 3(770), 2007.
- [119] X. Xu et al. Coherent optical spectroscopy of a strongly driven quantum dot. *Science*, 317(929), 2007.

-
- [120] B. D. Gerardot et al. Optical pumping of a single hole spin in a quantum dot. *Nature*, 451(441), 2008.
- [121] F. H. L. Koppens et al. Driven coherent oscillations of a single electron spin in a quantum dot. *Nature*, 442(766), 2006.
- [122] J. Berezovsky et al. Picosecond coherent optical manipulation of a single electron spin in a quantum dot. *Science*, 320(349), 2008.
- [123] 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.
- [124] J. R. Petta et al. Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. *Science*, 309(2180), 2005.
- [125] P. Neumann et al. Multipartite entanglement among single spins in diamond. *Science*, 320(1326), 2008.
- [126] R. Laflamme et al. Introduction to nmr quantum information processing. arXiv: 0207172 v1, 2002.
- [127] S. Lloyd. Universal quantum simulators. *Science*, 273(1073), 1996.
- [128] J. T. Glueckert D. Porras A. Friedenauer, H. Schmitz and T. Schaez. Simulating a quantum magnet with trapped ions. *Nature Phys.*, 4(757), 2008.
- [129] 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.
- [130] F. Zaehring E. Solano R. Blatt R. Gerritsma, G. Kirchmair and C. F. Roos. Quantum simulation of the dirac equation. *Nature*, 463(68), 2010.
- [131] B. P. Lanyon et al. Towards quantum chemistry on a quantum computer. *Nature Chem.*, 2(106), 2010.
- [132] I. Buluta and F. Nori. Quantum simulators. *Science*, 326(108), 2009.
- [133] W. J. Munro K. L. Brown and V. M. Kendon. Using quantum computers for quantum simulation. *Entropy*, 12(2268), 2010.
- [134] D. Abrams and S. Lloyd. Simulation of many-body fermi systems on a universal quantum computer. *Phys. Rev. Lett.*, 79(2586), 1997.
- [135] G. Ortiz et al. Quantum algorithms for fermionic simulations. *Phys. Rev. A*, 64(022319), 2001.
- [136] G. Ortiz et al. Simulating fermions on a quantum computer. *Comp. Phys. Comm.*, 146(302), 2001.
- [137] P. J. Love M. Mohseni I. Kassal, S. P. Jordan and A. Aspuru-Guzik. Polynomial-time quantum algorithm for the simulation of chemical dynamics. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 105(18681), 2008.

-
- [138] S. Ashhab H. Wang and F. Nori. Efficient quantum algorithm for preparing molecular-system-like states on a quantum computer. *Phys. Rev. A*, 79(042335), 2009.
 - [139] C. Zalka. Efficient simulation of quantum systems by quantum computers. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 454(313), 1998.
 - [140] I. Clark K. Brown and I. Chuang. Limitations of quantum simulation examined by simulating a pairing hamiltonian using nuclear magnetic resonance. *Phys. Rev. Lett.*, 97(050504), 2006.
 - [141] C. Clark et al. Resource requirements for fault-tolerant quantum simulation: the transverse ising model ground state. *Phys. Rev. A*, 79(062314), 2009.
 - [142] M. Paris G. Di'Ariano and M. Sacchi. Quantum tomography. *Advances in Imaging and Electron Physics*, 128(205), 2003.
 - [143] R. Somma et al. Quantum simulations of physical problems. *Phys. Rev. A*, 65(042323), 2002.
 - [144] J. Howell and J. Yeaze. Linear optics simulation of the quantum baker's map. *Phys. Rev. A*, 61(012304), 2000.
 - [145] Y. Weinstein et al. Experimental implementation of the quantum baker's map. *Phys. Rev. Lett.*, 89(157902), 2002.
 - [146] L. Mourokh A. Smirnov, S. Savelev and F. Nori. Modelling chemical reactions using semiconductor quantum dots. *Euro. Phys. Lett.*, 80(67008), 2007.
 - [147] A. Bermudez et al. Exact mapping of the 2+1 dirac oscillator onto the jaynes-cummings model: ion-trap experimental proposal. *Phys. Rev. A*, 76(041801), 2007.
 - [148] L. Lamata et al. Dirac equation and quantum relativistic effects in a single trapped ion. *Phys. Rev. Lett.*, 98(253005), 2007.
 - [149] J. Dowling P. Alsing and G. Milburn. Ion trap simulations of quantum fields in an expanding universe. *Phys. Rev. Lett.*, 94(220401), 2005.
 - [150] C. Lu et al. Demonstrating anyonic fractional statistics with a six-qubit quantum simulator. *Phys. Rev. Lett.*, 102(030502), 2009.
 - [151] J. You et al. Quantum emulation of a spin system with topologically protected ground states using superconducting quantum circuits. *Phys. Rev. Lett.*, 81(014505), 2010.
 - [152] K. Kim et al. Quantum simulation of frustrated ising spins with trapped ions. *Nature*, 465(590), 2010.
 - [153] D. Porras and J. I. Cirac. Quantum manipulation of trapped ions in two dimensional coulomb crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 96(250501), 2006.
 - [154] P. J. Love A. Aspuru-Guzik, A. D. Dutoi and M. Head-Gordon. Simulated quantum computation of molecular energies. *Science*, 309(1704), 2005.

-
- [155] C. H. Tseng et al. Quantum simulation with natural decoherence. *Phys. Rev. A*, 62(032309), 2000.
- [156] S. Fernandez-Vidal F. M. Cucchietti and J. P. Paz. Universal decoherence induced by an environmental quantum phase transition. *Phys. Rev. A*, 75(032337), 2007.
- [157] J. F. Zhang. Direct observation of quantum criticality in ising spin chains. *Phys. Rev. A*, 79(012305), 2009.
- [158] G. Strini. Error sensitivity of a quantum simulator. i. a first example. *Fortsch. Phys.*, 50(171), 2002.
- [159] S. Montangero. Dynamically localized systems: exponential sensitivity of entanglement and efficient quantum simulations. *Phys. Rev. A*, 70(032311), 2004.
- [160] M. J. Bremne W. Dur and H. J. Briegel. Quantum simulation of interacting high-dimensional systems: the influence of noise. *Phys. Rev. A*, 78(052325), 2008.
- [161] U. R. Fischer and R. Schutzhold. Quantum simulation of cosmic inflation in two-component bose-einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 70(063615), 2004.
- [162] J. Dalibard I. Bloch and W. Zwerger. Many-body physics with ultracold gas. *Rev. Mod. Phys.*, 80(885), 2008.
- [163] M. Lewenstein et al. Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond. *Advances in Physics*, 56(243), 2007.
- [164] D. Jaksch and P. Zoller. The cold atom hubbard toolbox. *Annals of Physics*, 315(52), 2005.
- [165] B. Paredes et al. Tonks-girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice. *Nature*, 429(277), 2004.
- [166] M. Zwierlein et al. Vortices and superfluidity in a strongly interacting fermi gas. *Nature*, 435(1047), 2005.
- [167] T. Schulte et al. Routes towards anderson-like localization of bose-einstein condensates in disordered optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 95(170411), 2005.
- [168] L. Fallani et al. Ultracold atoms in a disordered crystal of light: towards a bose glass. *Phys. Rev. Lett.*, 98(130404), 2007.
- [169] M. Lewenstein. Atomic and molecular physics: Polar molecules in topological order. *Nature Phys.*, 2(309), 2006.
- [170] G. K. Brennen A. Micheli and P. Zoller. A tool-box for lattice-spin models with polar molecules. *Nature Phys.*, 2(341), 2006.
- [171] G. Pupillo M. Ortner, A. Micheli and P. Zoller. Quantum simulations of extended hubbard models with dipolar crystals. *New J. Phys.*, 11(055045), 2009.

-
- [172] B. Capogrosso-Sansone et al. Quantum phases of cold polar molecules in 2d optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*
- [173] H. P. Buchler L. Pollet, J. D. Picon and M. Troyer. Supersolid phase with cold polar molecules on a triangular lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 104(125302), 2010.
- [174] H. P. Buchler G. Pupillo, A. Micheli and P. Zoller. Condensed matter physics with cold polar molecules. *arXiv:0805.1896*.
- [175] W. Itano B. King D. Leibfried C. Myatt D. Wineland, C. Monroe and C. Wood. Trapped-ion quantum simulator. *Phys. Scripta.*, T76(147), 1998.
- [176] D. Leibfried et al. Trapped-ion quantum simulator: experimental application to nonlinear interferometers. *Phys. Rev. Lett.*, 89(247901), 2002.
- [177] D. Hanneke et al. Realisation of a programmable two-qubit quantum processor. *Nature Phys.*, 6(13), 2009.
- [178] D. Porras X. L. Deng and J. I. Cirac. Quantum phases of interacting phonons in ion traps. *Phys. Rev. A*, 77(033403), 2008.
- [179] J. Pilo and S. Maniscalco. *Phys. Rev. A*.
- [180] T. F. Havel R. Laflamme S. Somaroo, C. H. Tseng and D. G. Cory. Quantum simulation on a quantum computer. *Phys. Rev. Lett.*, 82(5381), 1999.
- [181] C. H. Tseng et al. Quantum simulation of a three-body-interaction hamiltonian on an nmr quantum computer. *Phys. Rev. A*, 61(012302), 2000.
- [182] C. H. Tseng et al. Quantum simulation with natural decoherence. *Phys. Rev. A*, 62(032309), 2000.
- [183] C. Negrevergne et al. Liquid-state nmr simulations of quantum many-body problems. *Phys. Rev. A*, 66(022317), 2005.
- [184] J. F. Du X. H. Peng and D. Suter. Quantum phase transition of ground-state entanglement in a heisenberg spin chain simulated in an nmr quantum computer. *Phys. Rev. A*, 71(012307), 2005.
- [185] N. Rajendran J. F. Zhang, X. H. Peng and D. Suter. Detection of quantum critical points by a probe qubit. *Phys. Rev. Lett.*, 100(100501), 2008.
- [186] F. Xu X. Yang, A. M. Wang and J. F. Du. Experimental simulation of a pairing hamiltonian on an nmr quantum computer. *Chem. Phys. Lett.*, 422(20), 2006.
- [187] X. H. Peng P. F. Wang S. F. Wu J. F. Du, N. Y. Xu and D. W. Lu. Nmr implementation of a molecular hydrogen quantum simulation with adiabatic state preparation. *Phys. Rev. Lett.*, 104(030502), 2010.
- [188] R. X. Xu H. W. Chen J. B. Gong X. H. Peng D. W. Lu, N. Y. Xu and J. F. Du. Simulation of chemical isomerization reaction dynamics on a nmr quantum simulator. *Phys. Rev. Lett.*, 107(020501), 2011.

-
- [189] R. X. Xu H. W. Chen J. B. Gong X. H. Peng D. W. Lu, N. Y. Xu and J. F. Du. Solving quantum ground-state problems with nuclear magnetic resonance. *Scientific Reports.*, 1(88), 2011.
 - [190] R. Hanson and D. D. Awschalom. Coherent manipulation of single spins in semiconductors. *Nature*, 453(1043), 2008.
 - [191] T. Byrnes et al. Quantum simulation of fermi-hubbard models in semiconductor quantum-dot arrays. *Phys. Rev. B*, 78(075320), 2008.
 - [192] E. Manousakis. A quantum-dot array as model for copper-oxide superconductors: a dedicated quantum simulator for the many-fermion problem. *J. Low. Temp. Phys.*, 126(1501), 2002.
 - [193] A. van Oudenaarden and J. E. Mooij. One-dimensional mott insulator formed by quantum vortices in josephson junction arrays. *Phys. Rev. Lett.*, 76(4947), 1996.
 - [194] J. You et al. Quantum emulation of a spin system with topologically protected ground states using superconducting quantum circuits. *Phys. Rev. B*, 81(014505), 2010.
 - [195] E. Solano J. J. Garcia-Ripoll and M. A. Martin-Delgado. Quantum simulation of anderson and kondo lattices with superconducting circuits. *Phys. Rev. B*, 77(024522), 2008.
 - [196] A. Rakhmanov et al. Quantum metamaterials: electromagnetic waves in a josephson qubit line. *Phys. Rev. B*, 77(144507), 2008.
 - [197] F. Nori. Atomic physics with a circuit. *Nature Phys.*, 4(589), 2008.
 - [198] M. A. Cazalilla A. F. Ho and T. Giamarchi. Quantum simulation of the hubbard model: The attractive route. *Phys. Rev. A*, 79(033620), 2009.
 - [199] D. Porras and J. I. Cirac. Effective quantum spin systems with trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, 92(207901), 2004.
 - [200] M. A. Martin-Delgado J. J. Garcia-Ripoll and J. I. Cirac. Implementation of spin hamiltonians in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 93(250405), 2004.
 - [201] S. Ashhab D. Tsokomos and F. Nori. Using superconducting circuits to engineer exotic lattice systems. *Phys. Rev. A*, 82(052311), 2010.
 - [202] C. P. Master G. Roumpos and Y. Yamamoto. Quantum simulation of spin ordering with nuclear spins in a solid-state lattice. *Phys. Rev. B*, 75(094415), 2007.
 - [203] D. Porras A. Bermudez, M.A. Martin-Delgado. Localization of phonons in ion traps with controlled quantum disorder. *New J. Phys.*, 12(123016), 2010.
 - [204] F. Yamaguchi and Y. Yamamoto. Quantum simulation of the t-j model. *Superlattices and Microstructures*, 32(343), 2002.
 - [205] M. Byrd L. A. Wu and D. Lidar. Polynomial-time simulation of pairing models on a quantum computer. *Phys. Rev. Lett.*, 89(057904), 2002.

-
-
- [206] K. Y. Bliokh et al. Unusual resonators: plasmonics, metamaterials, and random media. *Rev. Mod. Phys.*, 80(1201), 2008.
 - [207] A. Kitaev. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Ann. Phys.*, 303(2), 2003.
 - [208] R. Raussendorf Y. J. Han and L. M. Duan. Scheme for demonstration of fractional statistics of anyons in an exactly solvable model. *Phys. Rev. Lett.*, 98(150404), 2007.
 - [209] M. Aguado et al. Creation, manipulation, and detection of abelian and non-abelian anyons in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 101(260501), 2008.
 - [210] B. M. Boghosian and W. Taylor. Simulating quantum mechanics on a quantum computer. *Physica D*, 120(30), 1998.
 - [211] T. M. Rusin and W. Zawadzki. Zitterbewegung of relativistic electrons in a magnetic field and its simulation by trapped ions. *Phys. Rev. D*, 82(125031), 2010.
 - [212] R. Keil A. Tunnermann S. Nolte S. Longhi F. Dreisow, M. Heinrich and A. Szameit. Classical simulation of relativistic zitterbewegung in photonic lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 105(143902), 2010.
 - [213] T. Byrnes and Y. Yamamoto. Simulating lattice gauge theories on a quantum computer. *Phys. Rev. A*, 73(022328), 2006.
 - [214] H. P. Buchler et al. Atomic quantum simulator for lattice gauge theories and ring exchange models. *Phys. Rev. Lett.*, 95(040402), 2005.
 - [215] T. Senthil S. Tewari, V. Scarola and S. D. Sarma. Emergence of artificial photons in an optical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 97(200401), 2006.
 - [216] F. L. Semiao and M. Paternostro. Quantum circuits for spin and flavor degrees of freedom of quarks forming nucleons. *Quantum Information Processing*, 11(67), 2012.
 - [217] R. Schutzhold and S. Mostame. Quantum simulator for the $o(3)$ nonlinear sigma model. *JETP Letters*, 82(279), 2005.
 - [218] R. Schutzhold et al. Analogue of cosmological particle creation in an ion trap. *Phys. Rev. Lett.*, 99(201301), 2007.
 - [219] S. Olson N. Menicucci and G. Milburn. Simulating quantum effects of cosmological expansion using a static ion trap. *New J. Phys.*, 12(095019), 2010.
 - [220] N. Szpak and R. Schutzhold. Quantum simulator for the schwinger effect with atoms in bi-chromatic optical lattices. *Phys. Rev. A*, 84(050101(R)), 2011.
 - [221] S. Giovanazzi. Hawking radiation in sonic black holes. *Phys. Rev. Lett.*, 94(061302), 2005.
 - [222] S. Fagnocchi B. Horstmann, B. Reznik and J. I. Cirac. Hawking radiation from an acoustic black hole on an ion ring. *Phys. Rev. Lett.*, 104(250403), 2010.

-
- [223] A. Perdomo-Ortiz M. H. Yung I. Kassal, J. D. Whitfield and A. Aspuru-Guzik. Simulating chemistry using quantum computers. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 62(185), 2011.
- [224] D. Lidar and H. Wang. Calculating the thermal rate constant with exponential speedup on a quantum computer. *Phys. Rev. E*, 59(2429), 1999.
- [225] D. Guaery-Odelin E. Torrontegui, A. Ruschhaupt and J. G. Muga. Quantum simulation of a triatomic chemical reaction with ultracold atoms on a waveguide. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 44(195302), 2011.
- [226] J. Piilo and S. Maniscalco. Driven harmonic oscillator as a quantum simulator for open systems. *Phys. Rev. A*, 74(032303), 2006.
- [227] D. Bacon et al. Universal simulation of markovian quantum dynamics. *Phys. Rev. A*, 64(062302), 2001.
- [228] B. Levi and B. Georgeot. Quantum computation of a complex system: the kicked harper model. *Phys. Rev. E*, 70(056218), 2004.
- [229] G. Benenti and G. Strini. Quantum simulation of the single-particle schroedinger equation. *Am. J. Phys.*, 76(657), 2008.
- [230] P. Hanggi and F. Marchesoni. Artificial brownian motors: Controlling transport on the nanoscale. *Rev. Mod. Phys.*, 81(387), 2009.
- [231] F. Marchesoni P. Hanggi and F. Nori. Brownian motors. *Annalen der Physik*, 14(51), 2005.
- [232] F. Nori K. Maruyama and V. Vedral. Physics of maxwell's demon and information. *Rev. Mod. Phys.*, 81(1), 2009.
- [233] J.D. Whitfield-J. Fitzsimons A. Aspuru-Guzik J.D. Biamonte, V. Bergholm. Adiabatic quantum simulators. *AIP Advances*, 1(022126), 2011.
- [234] Qipc-strategic report on current status, visions and goals for research in europe, version 1.5. 2008.
- [235] J. C. Boileau R. Laflamme C. A. Ryan, M. Laforest. Experimental implementation of a discrete-time quantum random walk on an nmr quantum-information processor. *Phys. Rev. A*, 72(062317), 2005.
- [236] E. Knill L. Viola and S. Lloyd. Dynamical decoupling of open quantum systems. *Phys. Rev. Lett.*, 82(2417), 1999.