

# 量子计算实验预习报告

何金铭 PB21020660

## 1 实验基本原理

### 1.1 量子比特

一个 qubit 的态  $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , 可以表示成:

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

可以表示为 Bloch 球上的一个点

### 1.2 量子逻辑门

理论上可以证明, 对于任意的多比特量子逻辑门, 都可以通过两比特受控非门结合单比特量子逻辑门的方式实现。我们称单比特量子逻辑门和受控非门形成一组普适的量子逻辑门

其数学上对应了  $SU(2^n)$  群可以用  $SU(2)$  的群元素来生成

名称	符号	矩阵表示
Hadamard		$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Pauli-X		$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Y		$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Z		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
C-Not		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$

图 1: 常用量子逻辑门的符号和矩阵表示

### 1.3 量子测量

一个态  $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , 测量后得到的概率为  $|\alpha|^2$  和  $|\beta|^2$

也可以选择另一组正交基  $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ ,  $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  进行测量, 测量之后, 坍缩到  $|+\rangle$  或者  $|-\rangle$  的几率分别为  $\frac{1}{2}|\alpha + \beta|^2$ ,  $\frac{1}{2}|\alpha - \beta|^2$ 。

### 1.4 量子算法

量子算法在某些问题上有指数级的优势, 比如 Shor 算法可以在多项式时间内分解大整数, Grover 算法可以在  $\sqrt{N}$  时间内搜索一个无序数据库。下面以 Deutsch 算法这个 toy model 为例, 说明量子

算法的优势。

函数  $f(x)$ , 其定义域为  $0,1$ , 且  $f(x) \in \{0,1\}$ , 那么这样的函数共有四种情况, 如下图所示:

$f_1(x)$		$f_2(x)$	
输入	输出	输入	输出
0	0	0	1
1	0	1	1

$f_3(x)$		$f_4(x)$	
输入	输出	输入	输出
0	0	0	1
1	1	1	0

图 2: 常函数与平衡函数举例:  $f_1(x)$  与  $f_2(x)$  是常函数,  $f_3(x)$  与  $f_4(x)$  是平衡函数。

现在我们需要判断  $f(x)$  是常函数还是平衡函数, 采用经典计算的方法, 需要分别计算  $f(0)$  和  $f(1)$ , 然后判断  $f(0)$  和  $f(1)$  是否相等, 共需进行两次计算。如果采用量子计算中的 Deutsch 算法, 则只需一次计算就能够判定。如下图所示, 是 Deutsch 算法的量子线路图。该量子算法需要两个量子比特, 其初态是  $|a\rangle = |01\rangle$

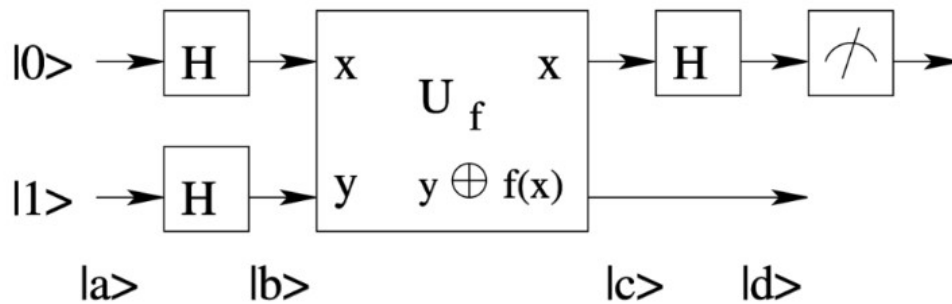


图 3: Deutsch 算法的量子线路图

经过计算可得:

- 若  $f(x)$  是常函数, 则  $|d\rangle = \pm|0\rangle(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}})$ , 测量结果为 0;
- 若  $f(x)$  是平衡函数, 则  $|d\rangle = \pm|1\rangle(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}})$ , 测量结果为 1。

总结一下 Deutsch 算法的过程, 我们将量子比特制备到  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的叠加态, 只需进行一次计算, 就可以根据末态的测量结果是 0 还是 1, 来判断  $f(x)$  是常函数还是平衡函数。根据经典算法, 则需进行两次计算。将 Deutsch 算法的定义域从  $\{0,1\}$  推广到  $\{0,1\}^n$ , 其解决方法即是 D-J 算法。D-J

算法是最早提出的量子算法之一，虽然 D-J 算法解决的问题不具备太多实际意义，但该算法向人们展示了，解决某些问题时，量子计算能够比经典计算更高效。下面我们将讨论如何在实验上实现这一算法。

## 2 实验具体实现

### 2.1 DiVincenzo 判据

2000 年，DiVincenzo 讨论了实现量子计算的物理要求，并提出了如下的 7 条判据：

1. 可扩展的具有良好特性的量子比特系统；
2. 能够制备量子比特到某个基态；
3. 具有足够长的相干时间来完成量子逻辑门操作；
4. 能够实现一套通用量子逻辑门操作；
5. 能够测量量子比特；
6. 能够使飞行量子比特和静止量子比特互相转化；
7. 能够使飞行量子比特准确地在不同的地方之间传送。

后面两条是针对量子计算机之间通信提出的要求，前面五条是实现量子计算的要求。

### 2.2 金刚石中的 NV 色心

NV (Nitrogen-Vacancy) 色心是金刚石中的一种点缺陷。金刚石晶格中一个碳原子缺失形成空位，近邻的位置有一个氮原子，这样就形成以了一个 NV 色心。我们这里所说的 NV 色心，指的是带负电荷  $NV^-$  顺磁中心。NV 色心的有六个电子，两个来自氮原子，三个来自与空位相邻的碳原子，另外一个是一个俘获的（来自施主杂质的）电子。

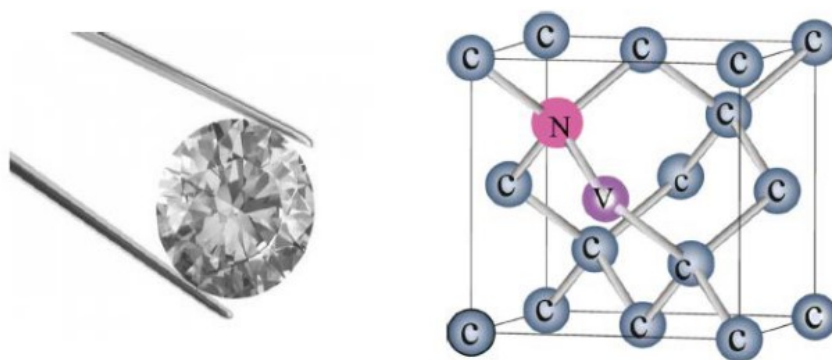


图 4: 金刚石和金刚石中的 NV 色心原子结构

## 2.3 自旋态初始化和读出

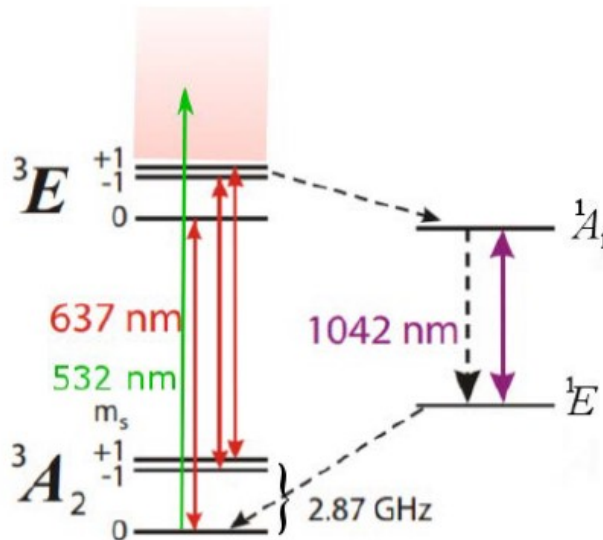


图 5: 室温下金刚石 NV 色心的能级结构示意图。会辐射出光子的跃迁用实线箭头表示, 非辐射跃迁用虚线箭头表示

上图是室温下金刚石 NV 色心的能级结构。NV 色心的基态为自旋三重态, 三重态基态与激发态间跃迁相应的零声子线为 637 nm, 红色区域为声子边带。基态的自旋三重态 ( $|m_s = 0\rangle, |m_s = 1\rangle, |m_s = -1\rangle$ ) 中,  $|m_s = 1\rangle, |m_s = -1\rangle$  在无磁场时是简并的, 它们与  $|m_s = 0\rangle$  态之间的能隙 (零场劈裂) 对应微波频率为 2.87 GHz。激发态的能级自旋分裂对应的微波频率为 1.4 GHz。

首先 532 nm 的激光激发基态电子, 由于电子跃迁是电偶极跃迁与电子自旋无关, 所以跃迁前后的自旋是守恒的。 $|m_s = 0\rangle$  的基态电子到  $|m_s = 0\rangle$  的声子边带, 而  $|m_s = \pm 1\rangle$  的基态电子到  $|m_s = \pm 1\rangle$  的声子边带。之后  $|m_s = 0\rangle$  的电子绝大多数都直接跃迁到基态辐射荧光, 而  $|m_s = \pm 1\rangle$  的电子则有一部分直接跃迁到基态辐射荧光, 而另一部分通过无辐射跃迁到单重态再到三重态的  $|m_s = 0\rangle$  态。经过多个周期之后, 基态  $|m_s = \pm 1\rangle$  上的布居度会越来越少, 而  $|m_s = 0\rangle$  上的布居度会越来越多。这相当于, 在激光的照射下, 布居度从  $|m_s = \pm 1\rangle$  转移到了  $|m_s = 0\rangle$ , 从而实现了自旋极化。温下 NV 色心电子自旋的极化率可达 95% 以上。

如果我们选取基态的  $|m_s = 0\rangle$  和  $|m_s = 1\rangle$  作为量子比特, NV 色心的自旋极化就对应于将量子比特的初态极化到  $|0\rangle$  态。

由于  $|m_s = \pm 1\rangle$  态有更大的概率通过无辐射跃迁, 回到基态。所以  $|m_s = 0\rangle$  态的荧光比  $|m_s = \pm 1\rangle$  态的荧光强度大, 实验上得出大约大 20-40%。根据  $|m_s = 0\rangle$  态和  $|m_s = \pm 1\rangle$  对应荧光强度的差别, 就可以区分 NV 色心的自旋态, 即实现对自旋量子比特状态的读出。由于由于单次实验得到的  $|m_s = 0\rangle$  态和  $|m_s = \pm 1\rangle$  的荧光强度并不明显, 室温下对 NV 色心电子自旋量子比特的测量一般为多次实验重复测量, 测得的结果为某个观测量 (如  $|m_s = 0\rangle\langle m_s = 0|$ ) 的平均值。

## 2.4 自旋态操控

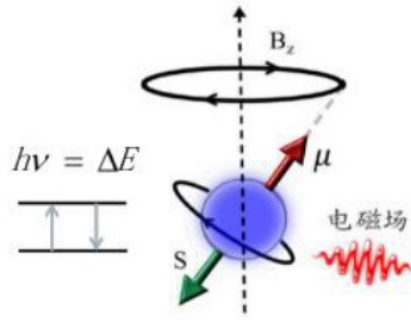


图 6: 自旋磁共振原理示意图

一个自旋系统  $\vec{\mu} = \gamma \vec{S} = \gamma \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$  在外场  $\vec{B}$  的作用下, 会根据系统哈密顿量进行演化:  $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$

### 2.4.1 自旋进动

在外场  $\vec{B}$  的作用下, 自旋会进动, 进动频率为  $\omega = \gamma B_0$

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \alpha; \\ \langle S_x \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\omega_0 t + \alpha_0); \\ \langle S_y \rangle &= -\frac{\hbar}{2} \sin \alpha \sin(\omega_0 t + \alpha_0); \end{aligned} \quad (2)$$

对于上述结果, 可以有一个直观的几何解释。如下图所示, 磁矩的 XY 分量大小是  $\frac{1}{2} \hbar \sin \alpha$ , 并且绕着外磁场方向 Z 轴转动, 转动频率为  $\omega_0$ 。这个过程也叫作拉莫进动,  $\omega_0$  被称作拉莫频率。

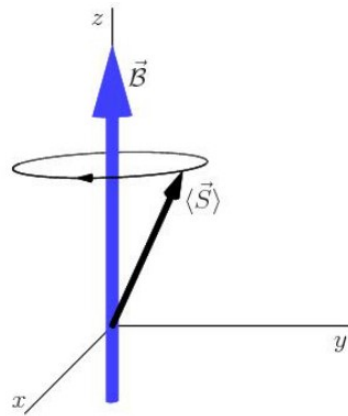


图 7: 磁矩绕着外磁场方向做拉莫进动

### 2.4.2 共振微波驱动

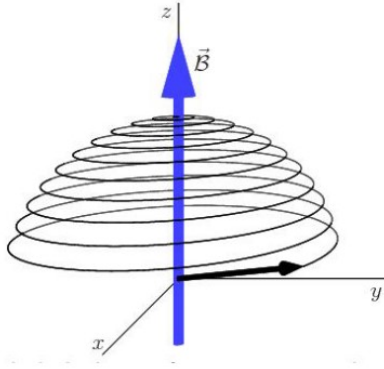


图 8: 微波频率与拉莫进动频率一致时, 磁矩绕着外磁场方向  $z$  轴做章动

考虑在施加一个 XY 平面内圆偏振的微波场:

$$\begin{cases} B_x = B_1 \cos \omega t \\ B_y = B_1 \sin \omega t \end{cases}$$

通过求解薛定谔方程, 可以得到:

$$P_{\uparrow} = |a(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2} \sin^2 \delta t.$$

其中,

$$\delta = \sqrt{\omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2}.$$

该过程也可以几何的理解。前面提到, 当有静磁场的时候, 自旋绕着静磁场方向做进动。当施加一个额外交变磁场, 自旋会感受一个力矩, 使其从  $z$  轴向  $-z$  轴方向翻转。这个过程也叫作自旋的拉比振荡, 翻转频率也称作拉比频率。

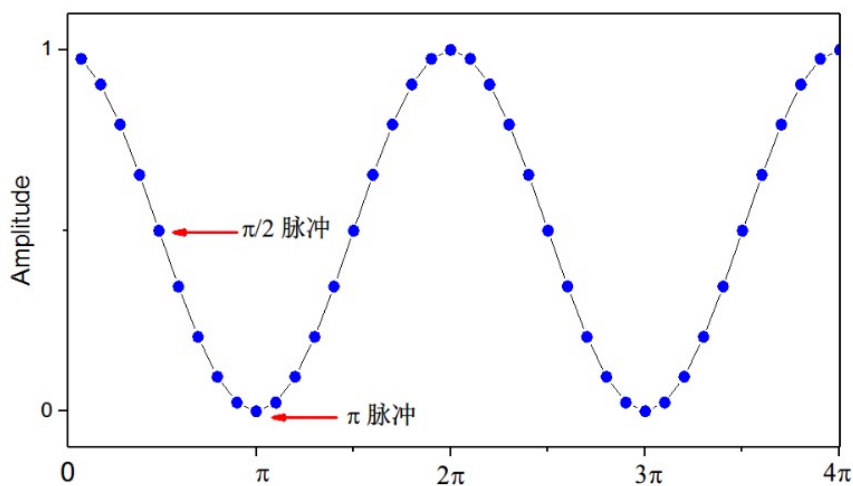


图 9: 拉比振荡曲线示意图

实现了拉比振荡, 即说明实现了对 NV 色心自旋的相干操控, 量子比特在  $|0\rangle$  态和  $|1\rangle$  态之间振荡。共振驱动的情况下, 当  $\omega_1 t = \pi$  时, 量子比特从  $|0\rangle$  态完全转到了  $|1\rangle$  态, 即实现了一个非门操

作，这个脉冲也叫作  $\pi$  脉冲。当  $\omega_1 t = \frac{\pi}{2}$  时，我们得到  $|0\rangle$  态和  $|1\rangle$  的叠加态，即  $|0\rangle \rightarrow \frac{|0\rangle + i|1\rangle}{\sqrt{2}}$ 。这是量子计算中非常重要的逻辑门，这个脉冲也叫作  $\frac{\pi}{2}$  脉冲。

## 2.5 实验装置

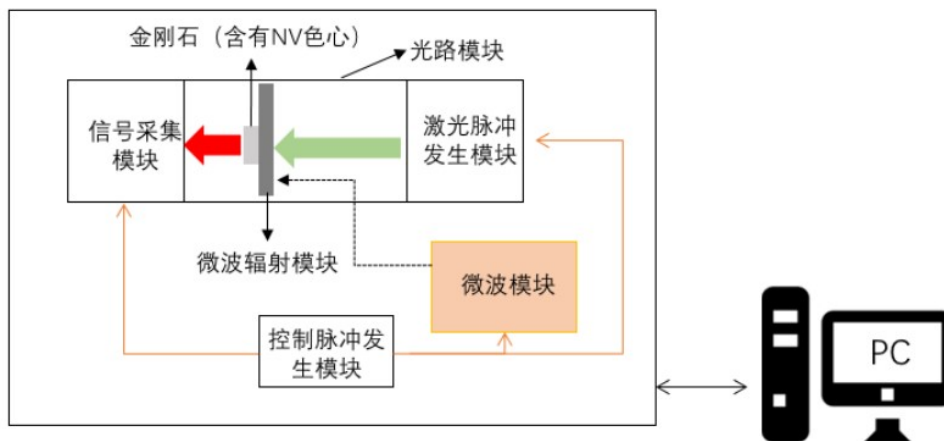


图 10: 实验装置图

### 2.5.1 光学模块

上图中的激光发生模块，光路模块和信号采集模块统称光学模块。激光脉冲发生模块产生 532 nm 的绿色激光脉冲，用于 NV 色心状态的初始化和读出。光路模块将绿色的激光聚焦到金刚石上，金刚石中的 NV 色心在绿色激光的照射下，会发出红色荧光。在金刚石之后，经过滤波，再将荧光聚焦到光电探测器中。光电探测器将光信号转化成电信号，发送给信号采集模块。

### 2.5.2 微波模块

前面提到，对于 NV 色心自旋状态的操控，是通过施加微波脉冲实现的。微波模块中，微波源产生特定频率的微波信号，经过微波开关调制成脉冲形式，然后经过微波功率放大器，实现功率增强。最后进入微波辐射模块，辐射到金刚石上。

### 2.5.3 控制脉冲发生模块

控制脉冲发生模块，负责产生 TTL 信号，输送给微波模块、激光脉冲发生模块和信号采集模块。一方面，用于触发微波开关和激光器的输出，调制微波脉冲和激光脉冲。另一方面，用于同步各个不同器件之间的时序。

## 3 实验内容

### 3.1 连续波实验

测量 NV 色心连续波谱的时候，收集的是其发出的荧光信号，这其中的物理基础是，NV 色心的自旋态能够被激光初始化，并且发出荧光的亮度是依赖于自旋状态的。施加微波到色心上，可以改变自旋在  $|m_s = 0\rangle$  态和  $|m_s = \pm 1\rangle$  态的布居，从而改变荧光强度。因为 NV 色心的荧光亮度是

依赖于自旋态的。改变施加的微波频率，当共振的微波改变了自旋状态，荧光亮度会相应的发生改变。因此，当微波频率与能级间隔共振时，谱线上会出现低谷。

### 3.2 拉比振荡实验

对于 NV 色心而言，实现拉比振荡的脉冲序列如下：首先打开激光，将 NV 色心自旋态初始化到  $|m_s = 0\rangle$ ，然后关闭激光，打开微波。微波脉冲的频率等于共振频率，最后再施加激光，将 NV 色心自旋态读出。施加的微波脉冲宽度不同，自旋演化的状态就不同。将微波脉冲宽度与荧光计数对应起来，就可以得到拉比振荡的曲线。本实验中需要用到  $|m_s = 0\rangle \rightarrow |m_s = 1\rangle$  和  $|m_s = 0\rangle \rightarrow |m_s = -1\rangle$  两个跃迁频率，所以微波模块中有两个微波源，在进行拉比振荡实验的时候，用两个波源（记为“波源 1”和“波源 2”）分别测定两个频率的拉比振荡。

### 3.3 回波实验

在磁共振实验中，回波实验是指，通过施加去耦脉冲的方式，让自旋相干信号重聚的过程。图 3.5 所示是回波实验的脉冲序列。首先用激光将 NV 色心自旋态初始化到  $|m_s = 0\rangle$  态，然后施加  $\frac{\pi}{2}$  脉冲，将自旋制备到  $|0\rangle$  态和  $|1\rangle$  态的叠加态，自由演化时间  $\tau = t_1$  后，施加  $\pi$  脉冲，然后再等待自由演化时间  $\tau = t$ ，施加第二个  $\frac{\pi}{2}$  脉冲，将相干信息转化成布居度读出。

### 3.4 $T_2$ 实验

$T_2$  实验，也叫作自旋回波实验，其目的是测量 NV 色心自旋的退相干时间。因为量子系统不是一个孤立系统，其与环境的相互作用，会引起退相干效应。图 3.7 所示是  $T_2$  实验的脉冲序列。首先用激光将 NV 色心自旋态初始化到  $|m_s = 0\rangle$  态，然后施加  $\frac{\pi}{2}$  脉冲，将自旋制备到  $|0\rangle$  态和  $|1\rangle$  态的叠加态，自由演化时间  $\tau = \frac{t}{2}$  后，施加  $\pi$  脉冲，然后再等待自由演化时间  $\tau = \frac{t}{2}$ ，施加第二个  $\frac{\pi}{2}$  脉冲，将相干信息转化成布居度读出。

### 3.5 D-J 算法实验

我们将量子比特和辅助比特均编码到  $S = 1$  的电子自旋上。 $U_f(x)$  的定义与公式 1.8 一致，即  $U_f(x) = (-1)^{f(x)}|x\rangle$ ，其中  $f(x)$  表示四个不同的函数， $f_1(x) = 0$  和  $f_2(x) = 1$  是常函数， $f_3(x) = f_4(x) = 1 - x$  是平衡函数，其输入输出情况如图 1.4 所示。对于两能级体系， $U_{fi}$  的矩阵表示见图 3.10。实现量子算法时，我们将  $|0\rangle$  和  $|-1\rangle$  编码成量子比特， $|1\rangle$  为辅助能级。在系统用激光初始化到  $|0\rangle$  后，输入态用 MW1 的  $\frac{\pi}{2}$  脉冲作用在  $|0\rangle$  上而制备得到。控制门 ( $U_{fi}$ ) 通过  $2\pi$  脉冲的四种组合实现。当 MW2 的  $2\pi$  微波脉冲作用在辅助态  $|1\rangle$  上时，会在  $|0\rangle$  上产生  $\pi$  相位，等效于  $|0\rangle$  和  $|-1\rangle$  张成的子空间进行绕 z 轴的  $\pi$  旋转。常函数作用结束后，末态是  $\pm \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ 。平衡函数作用结束后，末态是  $\pm \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$ 。两种末态分别对应正向的回波，和反向的回波。因此，我们就以通过回波测量，来判断  $U_{fi}$  操作对应的是常函数还是平衡函数。