几何量子计算简介

房启轩
202318008107008

KITS, UCAS

更新：2024 年 5 月 20 日

目录

I 几何量子计算概述

关于相位的讨论在量子力学中很早就已经开始，通常认为，相位对于物理态没有影响，因为测量时只能测量到态的模长平方，而不能测量到态的相位。但在 1959 年，Aharonov 和 Bohm 指出，自由电子的干涉模式受到受限磁通量的影响，这个效应被称为 Aharonov-Bohm 效应。该效应表明，即使在零磁场的区域，磁矢势的相位也会对电子的运动产生影响。这是几何相位作用的一个特殊例子。随后的研究中，对于分子中的规范势等方面的研究给出了更多的关于几何相位的信息。此后，又有诸多工作研究了类似的相位的一些特性，但是这些研究并没有使之成为一个显著的研究方向。

20 世纪 80 年代，Berry 指出了这种相位的几何特征。通过绝热近似条件，他证明了在量子力学中，当哈密顿量的参数发生变化时，系统的波函数会发生一个额外的不依赖时间的，只和演化路径的几何效应有关的相位。由于这样的特征，这种相位被称为几何相位或者 Berry 相。在这之后的 1987 年，Aharonov and Anandan 设法移除了绝热近似条件，证明了这种相位的一般性，于是非绝热条件下的几何相位又称为 Aharonov-Anandan 相位。

随着量子计算的发展，对高保真的，抗干扰的量子门的需求日益增加。而几何相位的特性使得研究者们对其在量子计算中的应用的可能性产生了兴趣。从长期来看，实现大规模量子纠错的量子计算是重要的目标，而对于目前来说，处于噪声环境中的量子计算也是十分重要的方向，这都要求在现阶段构建高保真的量子门以执行量子算法。因此，具备对于状态空间中的噪声干扰和环境引起的退相干的抗干扰能力的几何相位量子门成为一个合理的备选方案，使用这样的量子门的计算统称为几何量子计算，简称 GQC。

对于 GQC，其基本的思路即是量子态 $|\psi\rangle$ 在一个演化过程中获得的几何相位，在量子比特中，其正交态则获得一个符号相反的几何相位。这样的演化过程相当于在量子态上作用一个相移门。根据演化条件的不同，分别具有绝热演化和非绝热演化，对应的几何相位分别是 Berry 相位和 Aharonov-Anandan 相位。在这两种相位演化过程中，都存在动力学相位的情况，因此，在这两种情况下的核心问题是：设计演化路径或者条件，使得演化的最终态尽存在几何相位的影响。

在实验上绝热几何相位的量子门首先被实现，2000 年有研究者提出在 NMR 体系中实现这样的量子门，并给出了设计特殊循环回路的方式，即通过自旋回波技术来消除动力学相位的影响。这种思路随后被拓宽到更多的有效哈密顿量的系统中去，例如一些超导体系。而绝热几何相位存在演化时间长的问题，在实验中受限于量子态的相干时间和实验条件的限制，因此研究者们也在关注非绝热几何相位的实现。在 NMR 体系中的绝热几何量子门实现之后，研究者们提出了在 NMR 体系中实现非绝热几何量子门的方案，随后进一步扩充到了一般非绝热量子门的实现。非绝热量子门依赖的实验体系包括离子阱、超导量子体系、半导体量子点和里德堡原子等，并在实验中的到了使用。此外，研究者们发现一部分体系经过演化之后，其获得的动力学相位和几何相位之间存在一定的关系，这可以直接避免动力学相位的影响，这一类量子门即是非常规的几何相量子门。

在近一段时间以来研究的更多的是和乐量子计算，即是利用了量子和乐的特性来实现量子

计算。在几何量子计算中，由于几何相位具有交换性，其实现多比特门存在困难。而非阿贝尔几何相的引入，使得多比特几何量子门的实现成为可能。

II 几何量子计算基础

II.1 绝热几何相位理论

II.1.1 Berry phase 和绝热近似

考虑一个由含时的实参数组 $\boldsymbol{R}(t) = (R_1(t), ..., R_n(t))$ 控制的哈密顿量 $H(\boldsymbol{R}(t))$，系统的状态随时间演化由薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(\boldsymbol{R}(t))|\psi(t)\rangle \tag{1}$$

给出。将哈密顿量算符按照能量本征值对角化：

$$H(\boldsymbol{R}(t)) = \sum_n E_n(\boldsymbol{R}(t))|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle\langle n(\boldsymbol{R}(t))| \tag{2}$$

假设能谱是离散的，同时，初态 $|\psi(0)\rangle$ 是哈密顿量的本征态：

$$|\psi(0)\rangle = |m(\boldsymbol{R}(0))\rangle \tag{3}$$

为着方便，记：$H(\boldsymbol{R}(t)) = H(t)$，$E_n(\boldsymbol{R}(t)) = E_n(t)$，$|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle = |n(t)\rangle$。含时演化的薛定谔方程的解可以依能量本征态展开，得到：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'}|n(t)\rangle = \sum_n a_n(t)|\langle\rangle\, n(t)\rangle \tag{4}$$

其中动力学相位是 $\gamma_n(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'$。带回薛定谔方程，得到：

$$i\hbar\sum_n\left(\dot{a}_n(t)|n(t)\rangle + a_n(t)|\dot{n(t)}\rangle\right) = \sum_n a_n E_n(t)|n(t)\rangle \tag{5}$$

在上式两边左乘 $\langle m(t)|$，根据能量本征态的正交性：$\langle m(t)|n(t')\rangle = \delta_{mn}\delta(t-t')$，得到：

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{a}_m(t) &= E_m(t)a_m(t) - i\hbar\sum_n a_n(t)\langle m(t)|\dot{n(t)}\rangle \\
&= E_m(t)a_m(t) - i\hbar a_n(t)\langle m(t)|\dot{m(t)}\rangle - i\hbar\sum_{n\neq m} a_n(t)\langle m(t)|\dot{n(t)}\rangle
\end{aligned} \tag{6}$$

其中上式左侧为：

$$i\hbar\dot{a}_m(t) = i\hbar\dot{c}_m(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} + c_m(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'}\dot{E}_m(t) \tag{7}$$

由此可以得到：

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t)\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle + O(n) \tag{8}$$

其中：

$$
\begin{aligned}
O(n) &= -i\hbar \sum_{n\neq m} a_n(t) \langle m(t)|\, n(\dot{t})\rangle e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} \\
&= \sum_{n\neq m} c_n(t) \left\langle m(t) \middle| n(\dot{t}) \right\rangle e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t [E_m(t')-E_n(t')]dt'} \\
&= \sum_{n\neq m} c_n(t) \left\langle m(t) \middle| n(\dot{t}) \right\rangle e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t \Delta_{mn}(t')dt'}
\end{aligned} \tag{9}
$$

其中 $\Delta_{mn}(t) = E_m(t) - E_n(t)$。上式中的 $O(n)$ 项是非绝热项，可以通过绝热近似来忽略。绝热近似后的结果即是：

$$
\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle \tag{10}
$$

这也就是说，在绝热近似下的时间演化是仅和本征态相关的，这个微分方程的解是：

$$
c_m(t) = c_m(0)e^{i\gamma} \tag{11}
$$

其中：

$$
\gamma = i\int_0^t \left\langle m(t') \middle| \dot{m}(t') \right\rangle dt' \tag{12}
$$

这个相位即是几何相位，或者称为 Berry phase。

由于哈密顿量是被一组时间依赖的参数控制的，于是自然的，我们可以将 Berry 相位写成：

$$
\begin{aligned}
\gamma &= i\int_0^t \langle m(\boldsymbol{R}(t'))|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}|m(\boldsymbol{R}(t'))\rangle \, dt' \\
&= i\int_{R(0)}^{R(t)} \langle m(\boldsymbol{R})|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}R}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t'}|m(\boldsymbol{R})\rangle \, dt' \\
&= \int_{R(0)}^{R(t)} \langle m(\boldsymbol{R})|i\nabla_{\boldsymbol{R}}|m(\boldsymbol{R})\rangle \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{R}
\end{aligned} \tag{13}
$$

若参数随时间演化形成闭合轨迹，则：

$$
\gamma = \oint \langle m(\boldsymbol{R})|i\nabla_{\boldsymbol{R}}|m(\boldsymbol{R})\rangle \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{R} \tag{14}
$$

现在，定义一个矢量势 $A_m(\boldsymbol{R})$：

$$
A_m(\boldsymbol{R}) = i\langle m(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}|m(\boldsymbol{R})\rangle \tag{15}
$$

则 Berry 相位可以写成：

$$
\gamma = \oint A_m(\boldsymbol{R}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{R} \tag{16}
$$

利用 Stokes 定理，可以将 Berry 相位写成：

$$
\gamma_m = \int \boldsymbol{\nabla} \times A_m(\boldsymbol{R}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \int_S B_m(\boldsymbol{R}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{17}
$$

这个矢量势 $A_m(\boldsymbol{R})$ 即是 Berry 联络。Berry 联络是一个定义在参数空间上的矢量场，它的旋度即是曲率张量，曲率张量的积分即是 Berry 相位。Berry 相位是一个纯几何的量，它不依赖于哈密顿量的具体形式，只依赖于参数空间的拓扑结构。

Berry 联络的旋度是:

$$\begin{aligned} B_m(\boldsymbol{R}) &= \nabla_{\boldsymbol{R}} \times A_m(\boldsymbol{R}) \\ &= \nabla_{\boldsymbol{R}} \times i \langle m(\boldsymbol{R}) | \nabla_{\boldsymbol{R}} | m(\boldsymbol{R}) \rangle \\ &= i \langle \nabla_{\boldsymbol{R}} m(\boldsymbol{R}) | \times \nabla_{\boldsymbol{R}} | m(\boldsymbol{R}) \rangle + i \langle m(\boldsymbol{R}) | \nabla_{\boldsymbol{R}} \times \nabla_{\boldsymbol{R}} | m(\boldsymbol{R}) \rangle \\ &= i \langle \nabla_{\boldsymbol{R}} m(\boldsymbol{R}) | \times \nabla_{\boldsymbol{R}} | m(\boldsymbol{R}) \rangle \\ &= \sum_n i (\nabla_{\boldsymbol{R}} \langle m(\boldsymbol{R}) |) \, | n(R) \rangle \times \langle n(R) | \, (\nabla_{\boldsymbol{R}} m(\boldsymbol{R})) \end{aligned} \tag{18}$$

当 $n = m$ 时，存在:

$$\langle \nabla_{\boldsymbol{R}} m(\boldsymbol{R}) | m(\boldsymbol{R}) \rangle = - \langle m(\boldsymbol{R}) | \nabla_{\boldsymbol{R}} | m(\boldsymbol{R}) \rangle \tag{19}$$

由于: $(\nabla_{\boldsymbol{R}} \langle m(\boldsymbol{R}) |) \, | m(\boldsymbol{R}) \rangle = 0$，所以:

$$B_m(\boldsymbol{R}) = \sum_{m \neq n} i (\nabla_{\boldsymbol{R}} \langle m(\boldsymbol{R}) |) \, | n(R) \rangle \times \langle n(R) | \, (\nabla_{\boldsymbol{R}} m(\boldsymbol{R})) \tag{20}$$

记:

$$\begin{aligned} & \langle m(\boldsymbol{R}) | \nabla_{\boldsymbol{R}} H(\boldsymbol{R}) | n(\boldsymbol{R}) \rangle \\ = & \langle m(\boldsymbol{R}) | (\nabla_{\boldsymbol{R}} H(\boldsymbol{R})) | n(\boldsymbol{R}) \rangle + \langle m(\boldsymbol{R}) | H(\boldsymbol{R}) \nabla_{\boldsymbol{R}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle \\ = & \langle m(\boldsymbol{R}) | (\nabla_{\boldsymbol{R}} H(\boldsymbol{R})) | n(\boldsymbol{R}) \rangle + E_m \langle m(\boldsymbol{R}) | \nabla_{\boldsymbol{R}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle \end{aligned} \tag{21}$$

同时，有:

$$\langle m(\boldsymbol{R}) | (\nabla_{\boldsymbol{R}} H(\boldsymbol{R})) | n(\boldsymbol{R}) \rangle = \langle m(\boldsymbol{R}) | \nabla_{\boldsymbol{R}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle E_n \tag{22}$$

所以:

$$\langle m(\boldsymbol{R}) | \nabla_{\boldsymbol{R}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle = \frac{\langle m(\boldsymbol{R}) | (\nabla_{\boldsymbol{R}} H(\boldsymbol{R})) | n(\boldsymbol{R}) \rangle}{E_n - E_m} \tag{23}$$

类似地可以计算出:

$$(\nabla_{\boldsymbol{R}} \langle n(\boldsymbol{R}) |) \, | m(\boldsymbol{R}) \rangle = \frac{\langle n(\boldsymbol{R}) | (\nabla_{\boldsymbol{R}} H(\boldsymbol{R})) | m(\boldsymbol{R}) \rangle}{E_n - E_m} \tag{24}$$

于是可以得到:

$$B_m(\boldsymbol{R}) = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle m(\boldsymbol{R}) | (\nabla_{\boldsymbol{R}} H(\boldsymbol{R})) | n(\boldsymbol{R}) \rangle \times \langle n(\boldsymbol{R}) | (\nabla_{\boldsymbol{R}} H(\boldsymbol{R})) | m(\boldsymbol{R}) \rangle}{(E_n - E_m)^2} \tag{25}$$

Berry 联络是规范独立的，做规范变换:

$$| m(\boldsymbol{R}) \rangle \to e^{i \theta_m(\boldsymbol{R})} | m(\boldsymbol{R}) \rangle \tag{26}$$

于是联络的变换是:

$$A_m(\boldsymbol{R}) \to A_m(\boldsymbol{R}) - \nabla_{\boldsymbol{R}} \theta_m(\boldsymbol{R}) \tag{27}$$

经过参数的一个闭合路径，为保证单值性，应当有条件:

$$\theta_m(\boldsymbol{R}(0)) - \theta_m(\boldsymbol{R}(T)) = 2\pi n, n \in \mathbb{Z} \tag{28}$$

由此，在规范变换下，Berry 相的变换必然是整数倍的 2π，而对于闭合路径，Berry 相是一个 U(1) 规范不变量。

在这里回到绝热近似条件，绝热近似所忽略的项是：

$$\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle = \frac{\langle m(t)|\dot{H}(t)|n(t)\rangle}{E_n - E_m} << 1 \tag{29}$$

这要求 $|\langle m(t)|\dot{H}(t)|n(t)\rangle| << |E_n - E_m|$，也即是说，哈密顿量的变化速度要远小于能级差。换而言之，由于演化速度十分缓慢，系统可以在演化过程中保持在哈密顿量的本征态上，这样 Berry 相位才能够被定义。这个条件是非常苛刻的，因为在实际的过程中，哈密顿量的变化速度是非常快的，这个条件很难满足。因此，绝热近似的失效问题也是在实际考察中的重要内容，这也就要求发展非绝热的量子计算。

II.1.2 旋转磁场下的 Spin-1/2 系统

在几何量子计算中的一个简单的模型是一个在旋转磁场中的自旋 1/2 系统。考虑一个自旋 1/2 系统，外磁场在偏离 z 轴的一个小角 θ 的角度绕着 z 轴以角速度 ω 旋转，则相应的哈密顿量是：

$$H(t) = \mu\vec{B}(t)\cdot\sigma \tag{30}$$

其中：

$$\vec{B}(t) = B_0(\sin\theta\cos\omega t, \sin\theta\sin\omega t, \cos\theta) \tag{31}$$

σ 是 Pauli 矩阵，μ 是磁矩。z 方向上的自旋本征值分别如下注记：

$$\sigma_z|0\rangle = |0\rangle,\ \sigma_z|1\rangle = -|1\rangle \tag{32}$$

于是在这组本征态下，哈密顿量的矩阵形式是：

$$H(t) = \mu B_0\begin{pmatrix}\cos\theta & e^{-i\omega t}\sin\theta\\ e^{i\omega t}\sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{33}$$

对角化这个哈密顿量，可以得到本征值和本征态：

$$\begin{aligned}
&E_{\pm} = \pm\mu B_0\cos\theta\\
&|+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\omega t}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle\\
&|-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\omega t}\cos\frac{\theta}{2}|1\rangle
\end{aligned} \tag{34}$$

哈密顿量的参数分别是 θ，$\phi(t) = \omega t$ 和 B_0。可以看出量子态是在 θ 和 ϕ 的参数空间上演化的，这个演化的轨迹的拓扑结构是一个二维球面 S^2。球面上的点通过两个参数与本征态 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 相关联。演化时间取 $t\in(0, 2\pi/\omega)$，则演化的轨迹是一个闭合的轨迹。设初态是哈密顿量的本征态，在绝热演化后，在 $t = \frac{2\pi}{\omega}$ 的时刻回到初态，且只相差一个相位因子。计算这里的动力学相

位和 Berry 相位，可以得到：

$$\begin{aligned}
\gamma_{\pm}^{d} &= -\frac{1}{\hbar}\int_{0}^{2\pi/\omega} E_{\pm}dt \\
&= \mp\frac{1}{\hbar}\mu B_0\frac{2\pi}{\omega} \\
\gamma_{\pm}^{g} &= i\oint_{C}\langle\pm|\nabla_{\boldsymbol{R}}|\pm\rangle\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R} \\
&= \mp\pi(1-\cos\theta), \quad \mathrm{mod} \quad 2\pi
\end{aligned} \tag{35}$$

这里仅考虑 $\phi\in[0,2\pi]$ 中变化的情况，θ 和 B_0 均为固定参数。记绕曲线 C 的立体角：

$$\Omega(C) = 2\pi(1-\cos\theta) \tag{36}$$

由此，几何相还可以表示成：

$$\gamma_{\pm}^{g} = \mp\frac{\Omega(C)}{2} \tag{37}$$

这直观揭示了 Berry 相位的几何意义，即是曲线 C 所包围的立体角的一半。

从上式中可以看出，动力学相位依赖于演化时间和能量本征值，而几何相位仅仅依赖于立体角这一与时间无关的量。

II.2 非绝热几何相

II.2.1 非绝热相位

在绝热几何相理论的基础上，1987 年，Aharonov 和 Anandan 提出了非绝热几何相的概念。非绝热几何相放宽了绝热条件，同时，将参数空间的依赖性转为研究 Hilbert 空间和量子态本身。由于测量无法区分只相差全局相位因子的两个量子态，因此这样的量子态的集合在测量的意义下显然是等价的，为此，可以将这些等价的量子态定义成一个等价类。

在 Hilbert 空间中，量子态随时间参数的演化的演化轨迹是一条曲线，在这个曲线上的任意两点上应当存在相位变化，这是无法直接观测的。根据前文的定义，动力学相位应该具备这样的形式：

$$\gamma^{d} = -\frac{1}{\hbar}\int_{0}^{t}\big\langle\psi(t')\big|H(t')\big|\psi(t')\big\rangle\,dt' \tag{38}$$

在绝热条件下，动力学相位可以获得绝热近似下的形式。类似的，也可以估计相位中几何的部分。由此，需要计算总相位的变化。与参数空间不同，在参数空间中研究绝热条件下的几何相位时，时间演化使初末态一致，并只相差一个相位因子，这对于参数空间没有影响。因此，在参数空间中，这样的演化路径是一条闭曲线。但在非绝热条件下，我们希望研究相位的作用，因此，在 Hilbert 空间中不仅要包含态演化的信息，还要反应相位的变化信息，这就使得演化曲线不再是一条闭合曲线。

现在首先建立一类等价量子态，这些量子态之间只相差一个全局相位因子。于是可以定义投影算符 P，满足：

$$P(e^{i\gamma}|\psi\rangle) = |\psi\rangle \tag{39}$$

其中 $e^{i\gamma}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $|\psi\rangle \in \mathcal{PH}$，即前者是 Hilbert 空间中的态，后者是投影 Hilbert 空间中的态。于是，投影算符建立了 Hilbert 空间和投影 Hilbert 空间之间的映射。这种对应可以看成是态对应到物理态的对应，且能够保证每个态都被唯一地对应到一个物理态上。我们假设在演化了 $t = 2\pi/\omega$ 时间后，得到的态是：

$$|\psi(T)\rangle = e^{i\gamma_f}|\psi(0)\rangle \tag{40}$$

在投影空间中，他们都对应于 $|\phi(t)\rangle$. 投影态和物理态之间的关系是：

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma(t)}|\phi(t)\rangle \tag{41}$$

其中相位函数满足：$\gamma(T) - \gamma(0) = \gamma_f$，通过薛定谔方程，可以得到：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\gamma(t) = -\frac{1}{\hbar}\langle\phi(t)|H(t)|\phi(t)\rangle + i\langle\phi(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi(t)\rangle \tag{42}$$

于是总的相位就可以写成：

$$\gamma(T) = \gamma^d(T) + \gamma^g(T) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^T \langle\phi(t)|H(t)|\phi(t)\rangle\, dt + i\int_0^T \langle\phi(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi(t)\rangle\, dt \tag{43}$$

这说明了总的相位变化可以由两个部分获得：动力学相位和几何相位。进一步观察这里的几何相位，可以发现，这部分相位的形式与系统哈密顿量的具体形式无关，而是依赖于演化的。这里由于没有绝热条件的限制，哈密顿量的演化无需是“十分缓慢的”。或者说，这里只需要是哈密顿量演化后获得的态满足末态只相差一个相位因子即可。于是这很清楚说明了在非绝热条件下的几何作用仍然是存在的。

II.2.2 非绝热旋转磁场下的 Spin-1/2 体系

仍然以旋转磁场作为例子，计算一个体系的几何相位。在此处不再限制旋转的角速度，于是，更加一般的哈密顿量可以写成：

$$H(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}\left[\mu B_0\left(\cos\theta\sigma_z + \sin\theta\sigma_x\right)\right]e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \tag{44}$$

进一步的，这可以写成：

$$H(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}H(0)e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} = R_z(\omega t)H(0)R_z(-\omega t) \tag{45}$$

其中 $R_z(\omega t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}$ 是绕 z 轴旋转的算符。这里的哈密顿量是时间依赖的，但是是通过一个幺正算符的变换得到的。对应的，对于静止系的态 $|\psi(t)\rangle$ 可以通过旋转系中的态 $|\lambda(t)\rangle$ 进行旋转变换得到，同样依赖于旋转算符，其形式是：

$$|\psi(t)\rangle = R_z(\omega t)|\lambda(t)\rangle \tag{46}$$

并且，令初态相等，即：$|\psi(0)\rangle = |\lambda(0)\rangle$，旋转系作为相对静止系，其解由 Schrödinger 方程给出：

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\lambda(t)\rangle = \tilde{H}|\lambda(t)\rangle \tag{47}$$

其中 $\tilde{H} = H(0) - \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$。于是，可以得到：

$$|\lambda(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t}|\lambda(0)\rangle \tag{48}$$

进一步地，在静止系中的结果是：

$$|\psi(t)\rangle = R_z(\omega t)e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t}|\lambda(0)\rangle \tag{49}$$

注意到 $|\psi(0)\rangle$ 也是哈密顿量 $\tilde{H}$ 的本征态，因此时间演化算符给出了一个相位因子：

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t}|\lambda(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{E}_\pm t}|\lambda(0)\rangle \tag{50}$$

其中能量是在初态的本征态下的能量。于是现在的循环演化过程成为了从一个本征值为 $\tilde{E}_\pm$ 的态到另一个本征值为 $\tilde{E}_\pm$ 的态的演化。对于旋转系的哈密顿量，十分容易计算出其本征值和本征态：

$$\begin{aligned} E_\pm &= \pm\mu B_0\Delta \\ |\lambda_k\rangle &= e^{-i\frac{\alpha}{2}\sigma_y}|k\rangle,\ k = 0, 1 \end{aligned} \tag{51}$$

其中：

$$\begin{aligned} \Delta &= \sqrt{1 - \frac{\hbar\omega}{\mu B_0}\cos\theta + \frac{\hbar^2\omega^2}{4\mu^2 B_0^2}} \\ \tan\alpha &= \frac{2\mu B_0\sin\theta}{2\mu B_0\cos\theta - \hbar\omega} \end{aligned} \tag{52}$$

由于初态是本征态，所以末态可以写成：

$$|\psi(T)\rangle = e^{\mp i\pi - \frac{i}{\hbar}\tilde{E}_\pm T}|\lambda(k)\rangle \tag{53}$$

相应地，产生的附加相位可以得到：

$$\gamma_\pm(T) = -\frac{1}{\hbar}\tilde{E}_\pm T \mp \pi \tag{54}$$

而产生的动力学相位是：

$$\begin{aligned} \gamma^d_\pm(T) &= -\frac{1}{\hbar}\int_0^T \langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle\,dt = -\frac{1}{\hbar}\int_0^T \langle\lambda(k)|H(0)|\lambda(k)\rangle\,dt \\ &= -\frac{1}{\hbar}\tilde{E}_\pm T \mp \pi\cos\alpha \end{aligned} \tag{55}$$

于是非绝热的几何相位可以得到：

$$\gamma^g_\pm(T) = -\pi(1 \mp \cos\alpha) \tag{56}$$

对比非绝热条件下的几何相位和绝热条件下的几何相位，可以看出，非绝热条件下的几何相位是依赖于修正角度 α 的，而与绝热条件下的角度 θ 的关系可以通过极限得到，即当 $\omega/(\mu B_0) \to 0$ 时，会到绝热条件。这个条件可以通过减小旋转的角速度来实现，也就是通常情况下所说的"十分缓慢的演化"。

II.3 非阿贝尔相位

在这部分最后简单提一点非阿贝尔相的内容。无论是 Berry 相位还是非绝热几何相位，都是阿贝尔相位，即是说，这些相位是对应的哈密顿量的本征空间仅有一维的情况，即没有简并态，而对于简并态的情况，这里的相位将变成厄米矩阵。简单以绝热情况为例，考虑 $H(\boldsymbol{R})$ 的某个本征值 $E_n(\boldsymbol{R})$ 对应 k 重简并，其本征态空间是 k 维的 I_n，则整个希尔伯特空间为：

$$\mathcal{H}=\bigoplus_{n=1}^{N} I_n \tag{57}$$

每个本征态的本征矢空间中寻找一组正交完备基 $\{|\psi_n^k(t)\rangle, k=1,...,k_n\}$，也应该是哈密顿量的本征矢量。当参数绝热变化时，哈密顿量的本征空间保持不变，这使得在一个循环演化后，态仍然保持在本身的子空间中。子空间在循环演化后不变，但子空间中的一组本征态应该在一个循环后发生变化，这个变化可以用一个幺正矩阵来描述，即：

$$|\psi_n^s(t)\rangle=\sum_{m=1}^{k_n} U_{sm}^k(t)\,|\phi_n^m(t)\rangle \tag{58}$$

初态满足：

$$|\psi_n^s(0)\rangle=|\phi_n^s(0)\rangle \tag{59}$$

对演化的幺正矩阵求导后，可以得到：

$$\begin{aligned}U_n(t)&=\mathcal{T}\exp\left\{\left(i\int_0^t A_n(t')\,\mathrm{d}t'\right)\right\}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\mathrm{d}t'}\\&=\mathcal{P}\exp\left\{\left(i\int_{R(0)}^{Rt} A_n(\boldsymbol{R})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R}\right)\right\}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\mathrm{d}t'}\end{aligned} \tag{60}$$

其中：

$$A_n^{sm}(t)=i\,\langle\phi_n^s(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi_n^m(t)\rangle \tag{61}$$

在此处是一个非阿贝尔规范势。而 $\mathcal{T}$ 和 $\mathcal{P}$ 分别是编时积分和路径积分。对于演化到 $T=2\pi/\omega$ 的情况，

$$U_n(T)=\mathcal{P}\exp\left\{\left(i\oint A_n(\boldsymbol{R})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R}\right)\right\}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\mathrm{d}t'}=U_n^g(C)e^{i\gamma_n^d} \tag{62}$$

这里的 γ_n^d 是动力学相位，而 $U_n^g(C)$ 是非阿贝尔规范势的路径积分，也就是非阿贝尔的几何相位，只依赖于在子空间中的演化路径。对子空间中的态进行幺正变换，变换矩阵设为 $|\phi\rangle'=U_n\,|\phi\rangle$，可以证明：

$$A_n'=U_n^{-1}A_nU_n+iU_n^{-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U_n \tag{63}$$

证明了 A_n 确实为一个非阿贝尔规范势。

III 几何量子计算

III.1 绝热几何门

几何量子计算的理论基础依赖于几何相位理论，自然地，在几何量子计算中，要通过几何相位来实现量子门。仍然以旋转磁场中的自旋 1/2 粒子为例，我们可以通过绝热演化来实现几何相位。设 $|\psi_+(0)\rangle = |0\rangle$，$|\psi_-(0)\rangle = |1\rangle$ 对于单比特作用绝热演化将产生单比特相移门：

$$|k\rangle \to e^{ik\Omega(C)}\,|k\rangle\,,\ k=0,1 \tag{64}$$

其中 C 是一个闭合曲线，$\Omega(C)$ 是对应的立体角。这个门的作用和演化细节无关，只和演化的轨迹相关。进一步的推广到一般的哈密顿量：

$$H(t) = h(t)\left[\cos\theta\sigma_z + \sin\theta\left(\cos\phi\sigma_x + \sin\phi\sigma_y\right)\right] \tag{65}$$

通过控制参数 $\theta(0)=\theta(T)=0$ 和 $\phi(T)=\phi(0)$，可以构造出类似上面功能的单比特门。

同样，可以构造二比特门。构造哈密顿量如下：

$$H(t) = h_1(t)\left[\cos\theta_1\sigma_z^1 + \sin\theta_1\left(\cos\phi_1\sigma_x^1 + \sin\phi_1\sigma_y^1\right)\right] + h_2\sigma_z^2 + J\sigma_z^1\sigma_z^2 \tag{66}$$

上标表示对于哪一个比特的操作。上面的哈密顿量中有四个单比特参数和一个二比特参数 J。这个参数类似于 Ising model 中的相互作用项。可以在初态 $t=0$ 的情况下，如果我们设置角度参数也为 0，那么对角化这个哈密顿量，可以得到相应于二体基组 $\{|00\rangle\,,|01,|10\rangle\,,|11\rangle\rangle\}$ 的能量。可以证明对角化后的能谱是：

$$[h_1(0)+h_2+J, h_1(0)-h_2-J, -h_1(0)+h_2-J, -h_1(0)-h_2+J] \tag{67}$$

从此可以看出，第一个态的能量变化取决于第二个态。具体来看，当第二个量子态处在 $|0\rangle$ 态上时，第一个量子态的转移频率是 $\frac{h_1(0)+J}{\pi}$，而当第二个态处在 $|1\rangle$ 态上时，第一个态的转移频率是 $\frac{h_1(0)-J}{\pi}$。

在第二个量子态对应的单体哈密顿量不变的情况下，对于第一个量子态所处的单体空间，哈密顿量 $h_{xy}(t\left(\cos\phi_1\sigma_x^1 + \sin\phi_1\sigma_y^1\right))$ 部分随时间演化，其中改变含时部分 $h_{xy}(t)$ 和 ϕ_1 使在演化中仍然实现一个闭合路径，于是闭合路径的选择也是被第二个量子比特控制：当第二个量子态处于 $|0\rangle$ 时。第一个量子态的初始哈密顿量是：$(h_1(0)+J)\,\sigma_z$，角度参数 $\theta_1 = \arctan\frac{h_{xy}}{h_1+J}$；而当第二个量子态处于 $|1\rangle$ 时，第一个量子态的初始哈密顿量是 $(h_1(0)-J)\,\sigma_z$，角度参数 $\theta_1 = \arctan\frac{h_{xy}}{h_1-J}$。因此，二体哈密顿量事实上会对应不同的绝热演化路径，也就是说，对应不同的第二个量子比特，第一个量子比特绝热演化后的几何相是不同的。由此，可以写出这个量子门对应的形式：

$$U(C) = \mathrm{diag}\{e^{-i\frac{\Omega_1^0}{2}}, e^{-i\frac{\Omega_1^1}{2}}, e^{-i\frac{\Omega_1^0}{2}}, e^{-i\frac{\Omega_1^1}{2}}\} \tag{68}$$

其中 Ω_1^0 和 Ω_1^1 分别是第一个量子比特在第二个量子比特处于 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 态时的几何相位。

对于绝热演化过程中的动力学相位，注意到应当是：

$$\gamma_\pm^d(t) = \mp\int_0^t h(t')\,\mathrm{d}t' \tag{69}$$

前文设计量子门时，我们只考虑了几何相位，而没有考虑动力学相位。而这里我们看到，在演化过程中有动力学相位的累积，因此，必须设法消除动力学相位带来的影响。一种方式是通过设计演化过程，使 $\gamma_+^d - \gamma_-^d$ 是 2π 的整数倍。对于二比特门，由于第一个量子比特的演化路径是由第二个量子比特控制的，因此，条件要同时满足：

$$\int_0^T E_{\pm}^0(t)\,\mathrm{d}t = 2\pi m,\ \int_0^T E_{\pm}^1(t)\,\mathrm{d}t = 2\pi n \tag{70}$$

与前文规定类似，上标表示的是第二个量子比特的态。这样，我们就可以设计出一个绝热几何门。这里对于哈密顿量的选取有相当程度的要求，因此在实际中只能在某些特定的系统中实现这种设计。

III.2 例：NMR 体系中绝热几何相移门

在 NMR 体系中，我们可以通过设计合适的哈密顿量来实现绝热几何相移门。我们考虑这样的哈密顿量：

$$H(t) = \frac{\omega_1}{2}\sigma_z + \frac{\omega_2}{2}\left[\cos\left(\omega t + \phi\right)\sigma_x + \sin\left(\omega t + \phi\right)\sigma_y\right] \tag{71}$$

对这个哈密顿量进行一些解释：在这样的体系中，磁场包括静态部分和旋转部分。静态部分其对应的强度为 ω_1，旋转部分磁场的强度为 ω_2，旋转频率为 ω，相位为 ϕ。这样的哈密顿量可以通过适当的选择参数来实现绝热演化。仿照非绝热体系中将旋转磁场转变为旋转坐标系，我们可以将这个哈密顿量转变为：

$$\tilde{H} = R_z(\omega t)H(t)R_z(-\omega t) = \frac{(\omega_1 - \omega)}{2}\sigma_z + \frac{\omega_2}{2}\left[\cos\phi\sigma_x + \sin\phi\sigma_y\right] \tag{72}$$

其中 $R_z(\theta) = \exp\{(-i\omega t\sigma_z/2)\}$。进一步地，哈密顿量可以写成：

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}\sqrt{(\omega_1-\omega)^2 + \omega_2^2}\left[\cos\theta\sigma_z + \sin\theta\left(\cos\phi\sigma_x + \sin\phi\sigma_y\right)\right] = \tilde{H}(\theta,\phi) \tag{73}$$

其中：$\tan\theta = \frac{\omega_2}{\omega_1-\omega}$。这是一个具有两个参量的静态哈密顿量，可以对应到一个球面上。求解这个哈密顿量，得到其本征态是：$|+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$，$|-\rangle = \sin\frac{\theta}{2}|0\rangle - e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}|1\rangle$。对于角度 θ，其在 ω_2 非 0 情况下取值范围是 $(0,\pi)$。

现在设 $\theta(0) = 0,\ \phi = \phi_0$，且初态为 $|0\rangle$。调整 ω_2，使初态绝热的演化到 $|+\rangle$ 态。可以验证，在 ϕ_0 到 $\phi_0 + 2\pi$ 的过程中，态演化过程可以形成一个闭合曲线。相应的全局相位的改变是动力学相位 $\gamma_+^d = -\sqrt{(\omega_1-\omega)^2 + \omega_2^2}\frac{T}{2}$ 和几何相位 $\gamma_+^- - \pi(1-\cos\theta)$ 的和。

为消除动力学相位的影响，需要考察其特性。在实验过程中，动力学相位依赖于演化细节。在 NMR 体系中，动力学相位的计算是困难的。在实验中的困难包括场的强度不确定性，以及原子核收到化学势的影响，因此相应的动力学相位也会有不同。而如果进行平均则会导致一个广泛的去相位效应。为了应对这种困难，通常会采取自旋回波技术，这一技术可以总结为如下过

程：

$$
\begin{aligned}
|+\rangle &\xrightarrow{C_1} e^{i\gamma_+^d+i\gamma_+^g}|+\rangle \xrightarrow{\pi} e^{i\gamma_+^d+i\gamma_+^g}|-\rangle \\
&\xrightarrow{C_2} e^{i\gamma_+^d+i\gamma_-^d+2i\gamma_+^g}|-\rangle \xrightarrow{\pi} e^{i\gamma_+^d+i\gamma_-^d+2i\gamma_+^g}|+\rangle \\
|-\rangle &\xrightarrow{C_1} e^{i\gamma_-^d+i\gamma_-^g}|-\rangle \xrightarrow{\pi} e^{i\gamma_-^d+i\gamma_-^g}|+\rangle \\
&\xrightarrow{C_2} e^{i\gamma_-^d+i\gamma_+^d+2i\gamma_-^g}|+\rangle \xrightarrow{\pi} e^{i\gamma_-^d+i\gamma_+^d+2i\gamma_-^g}|-\rangle
\end{aligned} \tag{74}
$$

以初态为 $|+\rangle$ 为例，经过曲线 C_1 的绝热演化，获得一个动力学相位和一个几何相位，通过一个短波脉冲使 $|+\rangle$ 翻转为 $|-\rangle$ 态，然后令其继续绝热演化，获得第二个动力学相位和几何相位，最后再通过一个短波脉冲使 $|-\rangle$ 翻转为 $|+\rangle$ 态。这样，通过这样的过程，两组本征态的动力学相位共同组成了全局几何相位，因此可以很好的取到几何相位的影响。在实验中，由于量子态保存的难度和演化条件的苛刻性，这就要求整个演化过程必须在相同实验条件下进行。

此外，在从 $|0\rangle$ 到 $|+\rangle$ 的演化过程中，也会产生相应的动力学相位 γ_+^i，类似地，在最终缓慢退回到 $|0\rangle$ 态的过程中也会产生动力学相位 γ_0^f。在这两个过程中，并不会出现几何相位，也就是说，在球面上的演化路径是沿测地线进行的。为了抵消这两个动力学相位的影响，可以通过对路径选择的修正来实现。在这种路径选择下，可以使初末态动力学相位互为相反数。因此，最后得到的相移门是：

$$
U^g = \begin{pmatrix} e^{i2\gamma_+^g} & 0 \\ 0 & e^{i2\gamma_-^g} \end{pmatrix} \tag{75}
$$

上述讨论是对单比特门的讨论。受控量子门的实现则需要至少考虑一个二体过程。在 NMR 体系中，可以考虑如下的哈密顿量：

$$
H^{(2)}(0) = \frac{1}{2}(\omega_0^1\sigma_z^1 + \omega_0^2\sigma_z^2 + J\sigma_z^1\sigma_z^2) \tag{76}
$$

这是一个 spin-1/2 二体耦合系统，其中 ω_0^1 和 ω_0^2 分别是两个自旋的 Rabi 频率，$J/2$ 是相互作用强度。前两项给出了 z 方向的静态磁场，最后一项给出了相互作用项。通过调整两个自旋的 Rabi 频率，可以实现第二个自旋对第一个自旋的控制。当 $\omega_0^1 >> \omega_0^2$ 时，第一个自旋的演化路径和获得相位可由第二个自旋控制。

假设自旋 1 的初态为 $|0\rangle$，旋转磁场的哈密顿量为 $\frac{\omega_1(t)}{2}[\cos\omega t + \phi\sigma_x + \sin\omega t + \phi\sigma_y]$ 令 $\omega_1(t)$ 缓慢的增长到 ω_0^1，并且在这个过程中，自旋 2 的 Rabi 频率保持不变。于是自旋 1 演化到 $|+\rangle$ 态，自旋 2 则保持不变。这个过程中的相位变化等同于单比特门中的情况，而具体的相位变化取决于自旋 2 的态。因此，可以通过这样的过程实现一个受控相移门。

自旋回波技术也可以通过类似地方式实现，在 0 态和 1 态控制的相应的几何相位差是：

$$
\begin{aligned}
\Delta\gamma^g &= \gamma_0^g - \gamma_1^g \\
&= \pi(\cos\theta_0 - \cos\theta_1) = \pi\left(\frac{\omega_0^1-\omega+J}{\sqrt{(\omega_0^1-\omega+J)^2+\omega_1}} - \frac{\omega_0^1-\omega-J}{\sqrt{(\omega_0^1-\omega-J)^2+\omega_1}}\right)
\end{aligned} \tag{77}
$$

受控相移门的形式：

$$U^{(2)}(C)=\begin{pmatrix} e^{2i\Delta\gamma^g} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-2i\Delta\gamma^g} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-2i\Delta\gamma^g} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{2i\Delta\gamma^g} \end{pmatrix} \tag{78}$$

III.3 非绝热几何门

绝热演化的条件比较严格，在实际过程中，利用 Berry 的量子演化的时间相对较长，这对实验的要求就变得极高。因此，可以考虑非绝热演化。非绝热演化的条件相对宽松，可以通过适当的设计来实现。为此，可以研究时间依赖的一般的二能级体系。考虑在本征态 $|\lambda_\pm\rangle$ 的时间演化可以表示成：

$$U(T)\,|\lambda_\pm\rangle = e^{i\gamma_\pm}\,|\lambda_\pm\rangle \tag{79}$$

这表示在时间 T 时完成一个循环演化，且至多差一个相位因子。在这组本征态作为基组的情况下，演化算子，或者说相移门是 $\mathrm{diag}\{e^{i\gamma_+}, e^{i\gamma_-}\}$。为此，需要找到办法消除相应的动力学相位，来获得只保留几何相位的相移门。类似地，对本征值进行一些限制，可以得到二体的相移门。要注意到，如果需要设计受控量子门，则必须设法在哈密顿量中加入一个二体相互作用项，并调整相应的参数。否则，一个二体门总可以分解为两个单比特门。

III.4 例：NMR 体系中非绝热几何相移门

在 NMR 体系中，哈密顿量是：

$$H(t)=\frac{\omega_0}{2}\sigma_z+\frac{\omega_1}{2}[\cos\omega t\sigma_x+\sin\omega t\sigma_y] \tag{80}$$

这里在 $x-y$ 平面上的初始相位是 0。演化算符 $U(t)=e^{-i\sigma_z\frac{\omega t}{2}}e^{-i\tilde{H}t}$，其中 $\tilde{H}=\frac{\omega_z-\omega}{2}\sigma_z+\frac{\omega_1}{2}\sigma_x$。这里有两个控制系统演化的方式。一种方式是类似于之前，我们制备 $\tilde{H}$ 的本征态，使之在一个 $T=2\pi/\omega$ 的周期内形成一个循环演化。第二种形式是添加一个额外的时变磁场 $\frac{\omega}{2}\sigma_z$，并且制备 $H(0)$ 的本征态。

现在考虑单比特相移门：

$$U(C)=\begin{pmatrix} e^{-i\pi(1-\cos\theta)} & 0 \\ 0 & e^{i\pi(1-\cos\theta)} \end{pmatrix} \tag{81}$$

实现的基本逻辑：设初态处于一个 $|0\rangle$ 态，作用一个 $R_y(\theta)=e^{-i\sigma_y\frac{\theta}{2}}$，$tan\theta=\frac{\omega_1}{\omega_0}$ 旋转之后，态变化到：$|\psi(0)\rangle=\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle+\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$。这种旋转不会积累相位因子。随后，通过含时演化，$|\psi(0)\rangle$ 形成一个闭合的演化路径。相应的，动力学相位和几何相位可以计算得到，分别是：$-\pi[\cos\theta+\sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}/\omega]$ 和 $-\pi(1-\cos\theta)$。通过重参数化，使 $\omega=-\frac{\omega_0^2+\omega_1^2}{\omega_0}$，可以消除动力学相位的影响。

对于二比特门：

$$U(C)=\begin{pmatrix} e^{i\gamma^g_{+0}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\gamma^g_{+1}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\gamma^g_{-0}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\gamma^g_{-1}} \end{pmatrix} \tag{82}$$

对于第二个比特作为控制位，那么可以直接看第一个比特对应的哈密顿量：

$$H_1(t)=\frac{\omega_0^1\pm J}{2}\sigma_z^1+\frac{\omega_1}{2}[\cos\omega t\sigma_x^1+\sin\omega t\sigma_y^1] \tag{83}$$

对于相互作用能量前的正负号，是通过第二个比特的态来决定的。设 $\omega\sim\omega_0^1$，于是在旋转系：

$$\tilde{H}_1=R_Z(\omega t)H_1(t)R_Z(-\omega t)+i\frac{\mathrm{d}R_z(\omega t)}{\mathrm{d}t}R_z(-\omega t) \tag{84}$$

计算得到的结果是：

$$\tilde{H}_1=\frac{1}{2}(\omega_0^1-\omega\pm J)\sigma_z^1+\frac{\omega_1}{2}\omega_1\sigma_x^1 \tag{85}$$

令旋转系哈密顿量演化前，同之前一致，仍需制备本征态。这个过程仍旧是有条件的，可以通过类似于之前的方式来获得控制条件，详细过程可参见相关文献，不再赘述。我们直接从制备结束后的条件态：$|\psi(0)\rangle_k=\cos\frac{\theta_k}{2}|0\rangle+\sin\frac{\theta_k}{2}|1\rangle$，$k=0,1$，k 表示控制比特位。可以计算在循环演化中的动力学相位和几何相位：

$$\begin{aligned}
&\gamma^d_{+k}=-\pi[\cos\theta_k+\sqrt{(\omega_1^2+\delta_\pm^2)}/\omega],\ \gamma^g_{+k}=-\pi(1-\cos\theta_k),\ init=|0\rangle,\ k=0,1\\
&\gamma^d_{-k}=\pi[\cos\theta_k+\sqrt{(\omega_1^2+\delta_\pm^2)}/\omega],\ \gamma^g_{-k}=\pi(1-\cos\theta_k),\ init=|1\rangle,\ k=0,1
\end{aligned} \tag{86}$$

这里的 δ 是控制条件中给出的，消除动力学相位的条件是：

$$\begin{aligned}
\cos\theta_0&=-\sqrt{\delta_+^2+\omega_1^2}/\omega\\
\cos\theta_1&=\sqrt{\delta_-^2+\omega_1^2}/\omega
\end{aligned} \tag{87}$$

这样就得到了前文所述的受控相移门。

在处理动力学相位影响时，也可采取 multi-loop 的技术，特别是在对于 NMR 体系中的 CNOT 门和一些其他的自旋 1/2 体系的受控量子门设计中。此外，还有一种限制态演化始终在测地线上的方法 (orange slice scheme)，从而避免动力学相位的影响。另外，NMR 体系的哈密顿量都是自旋弱耦合体系，其相应的实现方案中备选的物质需要满足这一种特性。对于一些物态体系，存在着自旋强耦合或者更多相互作用，这会对设计量子门带来一定的困难，关于这些问题目前也已经有一部分研究。

III.5 一般相移门的实现

在上述讨论中，已经说明了几何相位实现单比特相移门和受控二比特相移门的实现方式。讨论中的态始终限制在本征态上。下面会简要介绍关于几何相移门构成通用的一般量子门的可行性问题。

对于一个单比特态，总可以将其表示为本征态的线性组合：

$$\left|\psi^i\right\rangle = c_0\left|\lambda_+\right\rangle + c_1\left|\lambda_-\right\rangle \tag{88}$$

做循环演化后，相应的末态是：

$$\left|\psi^f\right\rangle = c_0 e^{i\gamma_+^g}\left|\lambda_+\right\rangle + c_1 e^{i\gamma_-^g}\left|\lambda_-\right\rangle \tag{89}$$

这里已经设法消去了动力学相位的影响。若：

$$\begin{pmatrix}\left|\lambda_+\right\rangle \\ \left|\lambda_-\right\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\left|0\right\rangle \\ \left|1\right\rangle\end{pmatrix} \tag{90}$$

则单比特相移门的形式是：

$$U(\gamma^g,\theta) = \begin{pmatrix} e^{i\gamma^g}\cos^2\frac{\theta}{2} + e^{-i\gamma^g}\sin^2\frac{\theta}{2} & i\sin\theta\sin i\gamma^g \\ i\sin\theta\sin i\gamma^g & e^{i\gamma^g}\sin^2\frac{\theta}{2} + e^{-i\gamma^g}\cos^2\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{91}$$

其中 $\gamma^g = \gamma_+^g - \gamma_-^g$。这个相移门是一个一般的单比特相移门。

这样的一个单比特相移门有两个参数：θ 和 γ^g。根据这个量子门的形式，这两个参数都可以理解为旋转的角度。那么这样的一个相移门也可以看成一种旋转操作。可以证明，两组不同参数的单比特相移门当且仅当 $\sin\gamma^g\sin\gamma^{g'}\sin(\theta-\theta')=0$ 的情况下可以交换。由此，可以通过两个参数的选择来实现任意的单比特量子门。对于这样的量子门的实现，可以采取 multi-loop 的技术，实验上在离子阱体系由相关的实现方案。

最后，指出一种特殊的几何相移门设计，在这种设计中无需消除动力学相位的影响。在某些情况下，动力学相位恰好正比于几何相位，因此全局相位可以看成是全为几何相位的贡献。以谐振子体系为例子，谐振子哈密顿量是：

$$H_0 = \omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) \tag{92}$$

谐振子体系上添加一个常微扰，得到：

$$H = H_0 + H_1 = \omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) + \lambda(a + a^\dagger) \tag{93}$$

应用旋转门：

$$R(\omega t) = e^{-i\omega t(a^\dagger a + 1/2)} \tag{94}$$

可以得到：

$$\tilde{H} = \lambda(a^\dagger e^{i\omega t} + a e^{-i\omega t}) \tag{95}$$

注意到时间演化算符是：

$$U(t) = e^{i\frac{\lambda^2}{\omega^2}(\omega t - \sin\omega t)} D\left(\frac{\beta}{\omega}(1 - e^{i\omega t})\right) \tag{96}$$

其中 $D\left(\frac{\beta}{\omega}(1-e^{i\omega t})\right)$ 是相干态产生算符。当时间取 $T = 2\pi/\omega$ 时，相干态完成一个循环演化，此时产生的动力学相位是：

$$\gamma^d = \frac{2\lambda^2}{\omega^2}(\omega T - \sin\omega T) = 4\pi\frac{\lambda^2}{\omega^2} \tag{97}$$

而全局相位是 $2\pi\frac{\lambda^2}{\omega^2}$，因此几何相位：

$$\gamma^g = 2\pi\frac{\lambda^2}{\omega^2} - 4\pi\frac{\lambda^2}{\omega^2} = -2\pi\frac{\lambda^2}{\omega^2} = -\frac{\gamma^d}{2} \tag{98}$$

由此，动力学相位也不再依赖于时间，而是具有了和几何相位相同的时间依赖性。