

УДК 621.38

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ АСПЕКТЫ ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА

Воронов В.К., Дударева О.В.*Иркутский национальный исследовательский технический университет, Иркутск,
e-mail: voronov@istu.edu.ru*

Проведен анализ публикаций по проблеме создания квантового компьютера. На этом основании отмечаются те трудности принципиального характера, которые предстоит преодолеть на пути создания квантового компьютера. Описана блок-схема электронного устройства на основе априори визуализированных квантовых, в том числе перепутанных, состояний кубитов. Устройство включает блок, содержащий, по меньшей мере, 10^{10} нанотриггеров, выполняющих роль кубитов – битов квантового счета, созданных с использованием нанолент графена и управляемых специальным элементом. Такой элемент является действующей по принципу самоорганизации квантовой точкой с двумя существенно различными по магнитным свойствам состояниями. Квантовая точка создается на основе вещества, для молекул которого характерна внутримолекулярная перегруппировка. При этом из нанотриггеров формируются обладающие свойством обратимости логические блоки или вентили по три триггера для выполнения логических операций. Предлагаемое устройство представляет собой встраиваемый в классический компьютер дополнительный электронный блок, обеспечивающий возможность реализации вычислительного процесса в соответствии с требованиями положений квантовой физики. Предлагаемый блок квантового счета может подключаться такими же способами, как это делается по отношению к дополнительным устройствам современных ЭВМ.

Ключевые слова: квантовый процессор, нанотриггер, самоорганизованная квантовая точка, вентиль Тоффоли

MOLECULAR ASPECTS OF THE PROBLEM CREATION OF QUANTUM COMPUTER

Voronov V.K., Dudareva O.V.*Irkutsk National Research Technical University, Irkutsk, e-mail: voronov@istu.edu.ru*

The works dedicated to a problem of the quantum computer design have been analyzed. On this basis, highlights those difficulties of principle, to be overcome on the path to creating a quantum computer. A model of the electronic device on the basis of a priori visualized quantum states of q-bits is offered. The device consists of the block containing, at least, 10^{10} nanotriggers, which play a role of q-bits (the bits of the quantum calculation), obtained using graphene nanoribbons and operated by a special element. Such element represents a self-organizing quantum dot with two states having different magnetic properties. The quantum dot is created on the basis of compounds, which molecules are characterized by the intramolecular rearrangement. Besides, nanotriggers are employed to form reversible logical blocks or gates consisting of three triggers performing logical operations. The offered device is an additional electronic block, which is built in the classical computer that enables computation process according to the ideas of quantum physics.

Keywords: quantum processor, nanotrigгер, self-organizing quantum dot, Toffoli gate

Теоретические успехи в решении проблемы квантовых компьютеров основывались на идее использования физических процессоров, которые обеспечивали бы выполнение логических операций, аналогичных таковым в классических компьютерах. При этом предполагалось, что использование специфики квантовых объектов позволит улучшить технику расчета, но не изменит принципиально его суть. Казалось, что в результате были найдены необходимые условия, выполнение которых и должно вскоре обеспечить успешную экспериментальную реализацию идеи создания квантового компьютера. Тем более, что этапная работа Шора обозначила круг реальных задач, решение которых возможно только с использованием квантовых компьютеров. Уверенность в скором создании квантовых компьютеров в немалой степени была обусловлена и тем, что уже в 1998 г. появились

работы, в которых сообщалось о реализации элементарного квантового алгоритма с помощью двух q-битов на основе явления ядерного магнитного резонанса (ЯМР). В 2001 г. появилось сообщение о квантовом ЯМР-процессоре, содержащем семь кубитов, с помощью которого впервые был реализован (пока в элементарном варианте) алгоритм Шора. В упомянутом процессоре выполнение логических операций производилось с участием спинов ядер двух атомов углерода (^{13}C) и пяти атомов фтора (^{19}F). Роль элементарного процессора выполняла молекула комплекса железа с перфторбутадиеном. Следует также отметить серию работ, выполненных Дж. Джонесом с соавторами по отработке экспериментальных методик реализации операций над ЯМР-кубитами, в том числе ЯМР-клонирование (протоны), ([1] и приведенную там литературу).

Согласно законам квантовой физики, если система состоит из n двухуровневых q -битов (qubit), то ее состояние в общем случае представляет суперпозицию 2^n базовых состояний [2]. Даже в случае сравнительно небольшого значения $n = 10^2$ можно получить достаточно большой

$$2^n = 2^{100} \approx 10^{30} \quad (1)$$

математический информационный ресурс квантового компьютера. Именно отсюда вытекают основные преимущества квантового компьютера. В самом деле, в процессе записи числа, содержащего, скажем, n цифр, именно столько ячеек и будет занято из общего количества, равного 10^{30} . Остальные (не занятые) ячейки можно использовать для проведения параллельных вычислений.

Здесь необходимо подчеркнуть, что эти ячейки – не какие-то конкретные элементы схем и не магнитные участки (домены), на которые можно записать необходимую информацию. Речь идет о собственных значениях оператора физической величины, характеризующей данную систему q -битов, которые, согласно законам квантовой механики, можно определять с той или иной степенью вероятности. В определенном смысле речь идет о большом наборе виртуальных по своей доступности ячеек, использование которых далеко не очевидно. Это одна из принципиальных проблем. Далее, после того как в эти ячейки будет занесена информация (например, цифровая), ими необходимо как-то управлять с целью выполнения вычислительных операций. И, наконец, необходимо найти способ вывести результат после проведения процедуры счета. Из этого легко сделать вывод о тех трудностях принципиального характера, которые предстоит преодолеть на пути создания квантового компьютера.

Из вышеизложенного вытекает первая и, возможно, самая главная необходимость на пути решения проблемы создания квантового компьютера – визуализация или материализация упомянутых выше состояний. Только после этого можно говорить о соответствии первого этапа работы квантового компьютера – этапу внесения (записи) цифровой информации в регистр классического компьютера. Причем необходимо иметь в виду, что визуализация не должна изменить реальность, т.е. обеспечить квантовый характер состояний q -битов.

В заключение краткого анализа публикаций по проблеме создания квантового компьютера можно только констатировать достижение определенных экспериментальных успехов в реализации идеи Р. Фейнмана и Ю.И. Манина. Однако возможность

осуществления реальных квантовых вычислений на практике предстоит еще доказать.

Целью исследований, результаты которых отражены в данной работе, является обоснование на основе предложенного ранее автором подхода «сверху вниз» блок-схемы квантового устройства, обеспечивающего априори визуализацию массива состояний квантовых битов информации. Такая визуализация или материализация позволяет каждому из 2^n квантовых состояний сопоставить конкретный элемент электронного устройства. Указанным элементом в данном случае должен стать нанотриггер, сделанный из двумерного материала графена. Объединяя их соответствующим образом, можно проводить процесс счета. Для этого предлагается использовать специальное устройство, создаваемое на основе квантовой точки, действующей по принципу самоорганизации. Квантовая точка создается на основе вещества, для молекул которого характерна внутримолекулярная перегруппировка, называемая валентной таутомерией.

Блок-схема электронного квантового устройства на основе априори визуализованных состояний кубитов

Хорошо известно, что центральным устройством современного (классического) компьютера является процессор, который фактически и обеспечивает его (компьютера) работу, т.е. процедуру счета и ее управление. Работа процессора организуется на основе электронных схем, основным элементом которых является триггер, который может выполнять роль хранителя разряда двоичного кода. Совокупность триггеров, объединенных определенным образом, позволяет создавать необходимые для успешной работы процессора блоки, называемые регистрами. Количество создаваемых триггеров задается в общем случае числом n из выражения 2, которое в свою очередь определяется теми задачами, которые будут при этом решаться. Таким образом, по крайней мере в принципе создание предлагаемого устройства можно планировать со всеми вытекающими отсюда последствиями.

На основе вышеизложенного можно положить, что триггер создается на основе графеновых лент шириной 10 нм [3]. В этом случае он будет занимать площадь, равную примерно $5 \cdot 10^{-14}$ м². Следовательно, на одном квадратном сантиметре может разместиться порядка 10^{10} нанотриггеров. Это те самые квантовые объекты, которые должны выполнять роль кубитов – битов квантового счета. Однако в данном случае проблема запутанности снимается естественным обра-

зом, так как они не просто квантовые объекты, состояние которых надо как-то вовлечь в процедуру счета. Это квантовые объекты, уже готовые выполнять счет. Принципиальным моментом в использовании графенового нанотриггера для выполнения элементарной процедуры счета является необходимость обеспечения его работы по законам микромира, т.е. законам квантовой физики. Это можно сделать на основе принципа самоорганизации. Здесь необходимо следующее пояснение [4].

Очень часто нелинейные процессы могут быть описаны выражением

$$f(x) = ax - bx^n, \quad (2)$$

где a и b – постоянные положительные коэффициенты, $n \geq 2$. Если $x \ll 1$, то $bx^n \ll ax$, поэтому

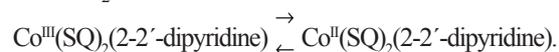
$$f(x) \approx ax. \quad (3)$$

Таким образом, в случае (3) $f(x)$ растет линейно с ростом x . Если же величина x окажется сравнимой с единицей, то членом bx^n пренебрегать уже нельзя, т.е. для описания поведения системы необходимо использовать исходное уравнение (2). Следовательно, рост отклонения функции за счет члена ax начнет испытывать нелинейное ограничение в силу вычитания величины bx^n . При некоторых значениях x функция $f(x)$ вновь будет близка к нулю и все начинается сначала. Система будет как бы автоматически себя регулировать, так как ее свойства зависят от текущего состояния (в данном случае – от величины x). Отсюда логично заключить, что, изменяя каким-либо образом данную молекулярную систему, можно в принципе добиться необходимых значений для соответствующего параметра (или параметров). Такие изменения, очевидно, можно осуществить тремя путями:

- 1) за счет ввода в состав молекулы новых атомов;
- 2) внешними воздействиями (например, электромагнитным полем);
- 3) комбинацией указанных двух путей.

Принципиальная проблема состоит как раз в том, чтобы знать, с какими молекулярными объектами подобные манипуляции возможны. Из самых общих представлений логично предположить, что речь должна идти о соединениях, для которых характерными являются такие внутримолекулярные взаимодействия, которые обеспечат реализацию искомым квантовых состояний. Такими могут быть соединения, содержащие в своем составе неспаренные электроны. В указанных соединениях возможны внутримолекулярные процессы с изменением валентности центрального иона (валент-

ная таутомерия). Именно такой процесс оказывается возможным для комплекса $\text{Co}(\text{SQ})_2(2\text{-}2'\text{-dipyridine})$ [1].



А

Б

Опуская детали фазового перехода, отраженного в приведенной схеме, следует иметь в виду, что вещество, молекулы которого находятся в состоянии А, оказывается диамагнитным, а в состоянии Б – парамагнитным.

Для кодирования чисел можно использовать два состояния парамагнитной молекулы, реализуемые вследствие фазовых расслоений. Миграция электрона между различными состояниями (спиновыми неоднородностями) – это тот самый процесс самоорганизации, соответствующий условию, который обеспечит постоянную во времени реализацию двух существенно различных по магнитным свойствам состояний.

Здесь необходимо следующее пояснение. Традиционно в качестве квантового бита информации рассматривается двухуровневая система, которая позволяет создать соответствующую элементную базу, включающую логические блоки или вентили для выполнения соответствующих логических операций. Имеются в виду, прежде всего, операции «НЕ», «ИЛИ», «И». Так два q-бита, на каждом из которых находится по одному неспаренному электрону, позволяют выполнять логическую операцию «НЕ». Соответствующим образом можно организовать и другие логические операции, реализуемые, в конечном счете, в ЭВМ. Для этого в качестве исходных универсальных логических блоков достаточно иметь такие устройства, которые позволяли бы многократно выполнять соответствующие логические операции. Другими словами, эти устройства (логические вентили) должны обладать свойством обратимости. Таковым, в частности, является трехбитовый вентиль Тоффли [2].

Можно следующим образом представить блок-схему устройства, с помощью которого будет осуществляться процедура квантового счета [5]. Логично положить, что основу его составляет блок площадью один квадратный сантиметр, на котором можно разместить, как было показано выше, порядка 10^{10} нанотриггеров. Далее, созданный на основе лент графена каждый нанотриггер управляется элементом, который представляет собой квантовую точку с двумя состояниями. Она создается на основе вещества, для молекул (кластеров) которого характерна внутримолекулярная перегруппировка, в частности валентная таутомерия.

В целом такая система является квантовой по своей сути. Следовательно, на основе такого элемента можно создать устройство, работа которого полностью определяется законами микромира (квантовой физикой), в том числе изменение состояния триггера как следствие перехода квантовой точки из одного состояния в другое. Три нанотриггера объединяются в группу, которая должна выполнять роль универсального вентиля. Будем далее считать, что работа такого вентиля может выполнять логическую операцию ИЛИ – НЕ. Это означает, что состояние одного из трех кубитов (кубит состояния цели или результата счета) меняется тогда и только тогда, когда два других кубита (биты источников, символизирующих исходную информацию, необходимую для реализации процедуры квантового счета) имеют строго конкретное значение. В соответствии с этим организуется такая коммутация между тремя триггерами, которая обеспечивает реализацию логической операции ИЛИ – НЕ, т.е. один из нанотриггеров должен выполнять роль кубита состояния цели или результата счета. Учитывая, что в отсутствие такой коммутации каждый триггер может функционировать независимо от двух других триггеров, организация их согласованной работы при современном состоянии электроники является чисто технической задачей. Исходя из вышеизложенного, процедуру счета можно организовать, положив, что исходное состояние группы из трех нанотриггеров является также собой и результат счета. Таким образом, реализуется условие обратимости универсального вентиля. Констатирование того факта, что исходное состояние суть также и результат счета, означает, что это состояние можно сопоставить с единицей. Нарушение такого состояния означает нуль.

Для оценки наименьшей скорости счета положим, что в каждом состоянии квантовая точка находится порядка 10^{-2} секунды, т.е. достаточно долго. Цикл счета при двоичной системе предполагает реализацию двух состояний, на что потребуется $2 \cdot 10^{-2}$ с для каждого из 10^8 вентилях. Если исходить из автономности их работы, то можно заключить, что описываемое здесь возможное устройство должно выполнять $5 \cdot 10^9$ счетных операций в секунду. Нетрудно заключить, что эта величина может быть заметно увеличена за счет уменьшения времени нахождения триггера в каждом из состояний. Далее, расчетную единицу площади можно увеличить до квадрата со стороной 10 см, т.е. площадью сто квадратных сантиметров. Уже такими двумя способами, предполагающими выполнение довольно мягких усло-

вий, число операций в секунду может быть доведено по порядку до 10^{12} , т.е. до одного гигаопераций в секунду. Дальнейшая обработка считанной таким образом информации может осуществляться хорошо разработанным интерфейсом современных классических ЭВМ.

К вышеизложенному относительно материала, предлагаемого в данной работе для нанотриггера и управляющего элемента (квантовой точки), необходимо добавить следующее. Исследования графена привели к возникновению интереса и к другим двумерным материалам. В частности, перспективной является система графен/дихалькогениды переходных металлов для использования в оптоэлектронике и фотонике [6]. Необходимо также отметить проводимые под руководством академика В.И. Минкина работы по синтезу и исследованию парамагнитных комплексов переходных металлов с различными гетероатомными молекулами. Материалы на основе таких соединений могут быть использованы с целью существенного расширения видов квантовых точек, предназначенных, как предложено в данной работе, для обеспечения функционирования нанотриггеров [7].

Заключение

Описанное выше устройство предполагает использование нанотехнологий, а также наноматериалов. В этих условиях важным моментом является обоснование комплектования классических современных ЭВМ достаточно дорогостоящим дополнительным блоком. Назначение такого блока – возможность проведения достаточно быстрого анализа большого массива данных. Наличие таких массивов обусловлено необходимостью решения конкретных задач из самых различных разделов науки и техники. Зная условие задач, можно задавать число кубитов m , которое определяет число возможных, в том числе перепутанных, состояний (2^m), позволяющих в конечном счете получать необходимый банк данных. В свою очередь, такая информация является основой для создания встраиваемого блока с необходимым количеством нанотриггеров, управляемых квантовыми точками, действующими по принципу самоорганизации с двумя существенно различными по магнитным свойствам состояниями и созданную на основе вещества, для молекул которого характерна внутримолекулярная перегруппировка. Предлагаемый блок квантового счета может подключаться такими же способами, как это делается по отношению к дополнительным устройствам современных ЭВМ.

Список литературы

1. Воронов В.К. Квантовый компьютер: проблемы и возможные пути их решения. Saarbrücken: Palmarium Academic Publishing, 2014. 93 с.
2. Валиев К.А. Квантовые компьютеры и квантовые вычисления // Успехи физических наук. 2005. Т. 175. № 1. С. 3–39.
3. Сорокин П.Б., Чернозатонский Л.А., Полупроводниковые наноструктуры на основе графена // Успехи физических наук. 2013. Т. 183. № 2. С. 113–132.
4. Voronov V.K. Revisiting the Possible Creation of the Quantum Information Unit – A Necessary Element of Quantum Computation Procedure. Transactions on Networks and Communications. 2015. V. 3. № 1. P. 79–84.
5. Воронов В.К. Встраиваемый в классический компьютер электронный блок и используемый в нем способ, основанный на квантовой процедуре счета, патент на изобретение № 2632129, Официальный бюллетень «Изобретения. Полезные модели». 2017. № 28.
6. Дурнев М.В., Глазов М.М. Экситоны и трионы в двумерных полупроводниках на основе дихалькогенидов переходных металлов. 2018. Т. 188. № 9. С. 913–934.
7. Minkin V.I., Starikova A.A., Minyaev R.M. Computational Design of Valence Tautomeric Adducts of Co(II) Diketonates with Redox-Active o-Benzoquinone Ligands. Dalton Transactions. 2013. V. 42. № 5. P. 1726–1734.