

УДК 004.38:621.38

ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС И ПРОБЛЕМА СОЗДАНИЯ КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА

¹Воронов В.К., ¹Дударева О.В., ²Герашенко Л.А.

¹*Иркутский национальный исследовательский технический университет, Иркутск,
e-mail: vladim.voronov1945@yandex.ru;*

²*Московский государственный университет технологий и управления им. К.Г. Разумовского,
Москва, e-mail: Gerashsenko@mail.ru*

В работе обсуждаются возможности использования явления ядерного магнитного резонанса в решении проблем, связанных с созданием квантовых компьютеров. В связи с этим отмечается, что явление ядерного магнитного резонанса высокого разрешения было впервые применено для иллюстрации возможности создания простейшего квантового алгоритма. Роль квантовых кубитов выполняли ядра атомов из верхней части таблицы Менделеева. С использованием квантового процессора на основе явления ядерного магнитного резонанса, содержащего семь кубитов (двух атомов углерода и пяти атомов фтора), впервые был реализован в элементарном варианте алгоритм Шора. Роль элементарного процессора выполняла молекула комплекса железа с перфторбутадиенилом. Отмечено, что научные достижения последних примерно тридцати лет позволяют вернуться к идее использования на новом уровне явления ядерного магнитного резонанса для решения задач, связанных с созданием квантового компьютера. Проблеме создания такого компьютера предшествует материал, относящийся к визуализации разрешенных состояний, в том числе запутанных состояний q-битов. Для этого необходим способ контроля состояний квантовых кубитов и очередность вовлечения их в выполняемые вычислительные операции. Предложено использовать явление химической поляризации ядерных спинов, находящихся в магнитном поле, с целью реализации такого контроля. Для этого можно использовать обратимый процесс, фотохимический по своей сути, в котором спины ядер будут иметь строго нужные для проведения квантовых вычислений состояния.

Ключевые слова: квантовый компьютер, ядерный магнитный резонанс, химическая поляризация ядер

NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE AND THE PROBLEM OF CREATING A QUANTUM COMPUTER

¹Voronov V.K., ¹Dudareva O.V., ²Geraschenko L.A.

¹*Irkutsk National Research Technical University, Irkutsk, e-mail: vladim.voronov1945@yandex.ru;*

²*Moscow State University of Technology and Management by K.G. Razumovskiy, Moscow,
e-mail: Gerashsenko@mail.ru*

The work discusses the possibilities of using the phenomenon of nuclear magnetic resonance in solving problems associated with the creation of quantum computers. In this regard, it is noted that the phenomenon of high-resolution nuclear magnetic resonance was first used to illustrate the possibility of creating the simplest quantum algorithm. The role of quantum qubits was performed by the nuclei of atoms from the top of the Mendeleev table. Using a quantum processor based on the phenomenon of nuclear magnetic resonance containing seven qubits (two carbon atoms and five fluoride atoms), the role of the elementary processor was for the first time in a new version of the Shore algorithm. The role of the elementary processor was performed by a molecule of the iron complex with perfluorobutadienyl. It is noted that the scientific achievements of the last about thirty years allow us to return to the idea of using the phenomenon of nuclear magnetic resonance at a new level to solve the problems associated with the creation of a quantum computer. The problem of creating such a computer is preceded by a material related to the visualization of permitted states, including tangled states of q-bits. This requires a way to control the states of quantum qubits and the order of their involvement in the operations performed by the computational operations. It is proposed to use the phenomenon of chemical polarization of nuclear spins in the magnetic field in order to implement such control.

Keywords: quantum computer, nuclear magnetic resonance, chemical polarization of nuclei

К настоящему времени физики, исходя из идеи «снизу – вверх», кажется, теоретически разработали все детали, даже тонкости проблемы создания квантового компьютера (например, публикации [1–3] обзорного характера и приведенная там литература). Здесь уместно отметить, что принципиальным требованием является наличие когерентных суперпозиций и использование универсальных квантовых логических вентилей для перевода этих суперпозиций в запутанные состояния. Соз-

даваемый таким образом большой математический ресурс затем можно использовать для выполнения вычислений, аналогичных тем, которые производятся классическим компьютером [1, 4]. Другими словами, выполнение упомянутого требования не самоцель, а в конечном счете способ проводить конкретную процедуру счета. Использование в качестве кубитов спинов ядер оказывается возможным в процессе детектирования сигналов ядерного магнитного резонанса (ЯМР).

Характерной особенностью указанного явления, обеспечивающей использование ЯМР для решения самого широкого круга задач, связанных со строением и динамикой молекул, является возможность составления ядерного спин-гамильтониана без каких-либо принципиальных ограничений [5]. С помощью методов спектроскопии магнитного резонанса высокого разрешения проиллюстрирована возможность создания квантового алгоритма (1998 г.). Роль квантовых кубитов выполняли ядра атомов из верхней части таблицы Менделеева [6]. В течение последующих лет в этом направлении была выполнена целая серия работ, направленных на увеличение числа ЯМР-кубитов в элементарном квантовом процессоре. Так, в 2001 г. появилось сообщение о квантовом ЯМР-процессоре, содержащем семь кубитов, с помощью которого впервые был реализован (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 Джонсоном с соавторами по отработке экспериментальных методик реализации операций над ЯМР-кубитами, в том числе ЯМР-клонирование [6].

Трудно представить молекулу, содержащую в своем ЯМР-спектре, например, сто не налагающихся друг на друга сигналов, манипуляция с которыми могла осуществляться по правилам, которые позволяли бы использовать такой спектр в организации процедуры квантового счета. Следует отметить, что в соответствии с этими правилами величины $|J_{ij}|$ должны быть заметно больше, чем разность значений химических сдвигов $|\delta_j - \delta_i|$, выраженная в единицах частоты. Здесь δ – химические сдвиги сигналов соответствующих ядер, J – константы спин-спинового взаимодействия между этими ядрами. В конце девяностых годов двадцатого века – начале двадцать первого века выполнение данных неравенств предполагало использование дорогостоящих спектрометров ЯМР на основе сверхпроводящих магнитов, массовое распространение которых вряд ли станет когда-либо возможным. По указанной причине, в частности, вскоре после публикации упомянутых выше работ об использовании метода ЯМР он стал считаться неперспективным.

Научные достижения последних примерно тридцати лет прежде всего в области физики, химии, биологии, информатики, материаловедения, электроники

стимулировали создание нового уровня приборов и установок научного назначения. Основные их достоинства – компактность по размерам, легкость применения для проведения соответствующих экспериментов, относительная простота в обслуживании, высокий уровень информативности получаемых на них экспериментальных данных. В полной мере это относится и к спектрометрам ЯМР. Тому подтверждение – появление в последние годы коммерческих установок высокого разрешения на основе постоянных магнитов с рабочей частотой по протонам 80 МГц с широкими возможностями по детектированию ЯМР-сигналов от целого ряда атомов.

Целью данной работы является обсуждение возможности решения проблемы создания квантового компьютера с учетом новых научных достижений в спектроскопии ЯМР. В связи с этим предложено использовать явление химической поляризации ядер с целью перевода ЯМР-кубитов в требуемые для проведения квантовых вычислений состояния. Материалу, относящемуся к этой проблеме, предшествует изложение некоторых особенностей использования квантовых объектов (кубитов) для выполнения процедуры счета.

Визуализация разрешенных состояний кубитов

В соответствии с теорией [1], математический ресурс квантового компьютера в немалой степени обусловлен запутанными состояниями квантовых объектов, выполняющих роль кубитов. Отсюда вытекает довольно жесткое требование к реализации процедуры счета – необходимость существования механизма, реализуемого в микромире и подчиняющегося законам квантовой физики, который «следит» за состоянием системы кубитов и обеспечивает их перепутанность в момент вовлечения в процедуру счета. В свою очередь наличие такого механизма должно как-то отражаться на уровне макромира, чтобы можно было пользоваться результатами счета, выполняемого системой этих кубитов. Аналогичная проблема возникает также в случае обращения к состояниям индивидуальных квантовых точек – ii -м состояниям, в том смысле, что очередность вовлечения их в процедуру счета должна быть как-то упорядочена.

Необходимо иметь в виду, что n должно быть достаточно большим числом (например, несколько сотен единиц), чтобы квантовый компьютер мог анализировать большие банки данных. Кроме того, эти состояния достаточно быстро можно было бы перебирать, чтобы включать в проце-

дуру счета. Отсюда становятся ясными существующие проблемы при реализации на практике работы квантового компьютера. Проблема больших значений n послужила основой для начала исследований по масштабированию поведения квантовых битов (q -битов) [2]. Цель таких исследований в конечном счете – создать систему кубитов, обеспечивающую анализ достаточно большого банка данных. При этом такая система не должна быть очень большой (в данном случае, по-видимому, речь должна идти о значениях n порядка десятков единиц). Критерием этого может быть возможность использования состояний кубитов, в том числе и запутанных, в реальных условиях, т.е. в процессе выполнения квантовых вычислений.

С момента обоснования идеи квантового компьютера к настоящему времени синтезировано много различных соединений, создано немало разнообразных материалов, в том числе двумерные материалы (первый среди них – графен). Возникает вопрос: «Нельзя ли попытаться их использовать с тем, чтобы *a priori* создать необходимый математический ресурс, элементы которого, оставаясь в рамках законов квантовой физики, могли бы использоваться в вычислениях?» Если исходить из положительного ответа, следует заключить, что они должны быть аналогами элементов классического компьютера, т.е. прежде всего могли выполнять роль триггеров. Так мы приходим к идее «сверху вниз». Только теперь это должны быть нанотриггеры, т.е. элементы, функционирующие на основе законов квантовой физики. Количество их может быть равным 2^n , причем значение n будет определяться теми задачами, для решения которых предполагается использовать процедуру квантового счета (размером массива данных). Упомянутые нанотриггеры, по своей сути, это квантовые объекты, уже готовые выполнять счет. Один из возможных вариантов квантового процессора на основе подхода «сверху вниз» изложен в статье [7]. Дальнейшая детализация описанного в этой работе устройства, действительно способного выполнять процедуру квантового счета, проведена в работе [8].

Хорошо известно, что триггер, имеющий два состояния (если иметь в виду протекание тока в нем) – важный элемент вычислительного процесса в ЭВМ; по своей сути это классический объект. Напротив, кубит (q -бит – квантовый бит информации) – квантовый объект. И это принципиальный момент – если он не один, а их в n раз больше, то возможно создать систему, которая характеризуется 2^n состояниями – базой ма-

тематического ресурса квантового компьютера. Это обстоятельство и сделало идею создания такого устройства в свое время очень привлекательной. Но прежде чем воспользоваться упомянутым математическим ресурсом, необходимо как-то визуализировать (приготовить) разрешенные законами квантовой физики состояния кубитов. Другими словами, добиться, чтобы какое-то время кубиты находились в разрешенных состояниях, прежде чем проводить с их использованием процедуру счета (в лабораторной системе координат или, лучше сказать, в макром мире).

В работе [7] система триггеров сопоставлена возможным состояниям квантовой системы, обеспечивающим большой математический информационный ресурс. Может показаться, что такое сопоставление означает совершенно произвольное смешивание двух объектов различной природы. Но это не просто триггеры малых размеров (наноразмерного масштаба), изготовленные и функционирующие на основе традиционных (классических) законов физики. В упомянутой работе речь идет о нанотриггерах, т.е. об элементах, *a priori* сконструированных с учетом требований, определяемых положениями квантовой физики. Можно поэтому утверждать, что указанная особенность позволяет (по крайней мере, в принципе) использовать ее как еще одну связь нанотриггера с другими элементами электрической цепи. Именно указанная связь лежит в основе предложенного в работах [7, 8] квантового логического вентиля на основе нанотриггера, управляемого квантовой точкой. Переход между ее двумя состояниями, каждое из которых контролирует протекание тока нанотранзистора (одно из плеч нанотриггера), в модельном представлении эквивалентен туннелированию через энергетический барьер, разделяющий состояния.

Важным представляется тот экспериментальный факт, что в одном из состояний квантовой точки она является диамагнитной, а в другом – парамагнитной. *Особенности магнитных свойств квантовой точки обуславливаются электронным обменным взаимодействием, квантово-механическим по своей природе. Таким образом, протекание тока или его отсутствие в электрической цепи контролируется фактически законами квантовой физики. Другими словами, нанотриггер вместе с управляющей квантовой точкой с позиции теоретических представлений можно рассматривать как реальную систему, которая позволяет установить связь между классическим явлением – протеканием тока в цепи в лабораторной системе координат*

(в макром мире) – и квантовыми свойствами элементов цепи. В этой связи представляет интерес обстоятельный обзор [9], в котором дается детальное описание новых типов логических вентилях, создаваемых на основе определенного класса молекулярных структур. Такие вентили потребляют мощность только в процессе переключения. Возможно, для этих целей может оказаться эффективным использование специально синтезированной квантовой точки, предлагаемой в работах [7, 8] для управления нанотранзисторами, выполняющими роль кубитов. Переключение в этом случае будет обуславливаться переходами квантовой точки между разрешенными состояниями. Энергия такого перехода складывается из энергии электронного обменного взаимодействия (E_e) и потребляемой электронным устройством из окружающей среды (E_o), т.е. $\Delta E = E_o \pm E_e$.

О возможностях ЯМР в решении проблемы создания квантового процессора

Принципиальным моментом для квантовых вычислений является замечательная особенность спектров ЯМР (которые, как известно, регистрируются в макросистеме), состоящая в том, что в них проявляется спин-спиновое взаимодействие (ССВ). Оно реализуется в масштабах атомов и молекул (на уровне квантового мира) и обуславливается, в частности, суперпозиционными состояниями резонирующих ядер. В теории ЯМР этот факт отражается тем, что в формулу, описывающую ССВ, входит Ферми-контактный член [5]. В эксперименте, как отмечено выше, имеет место расщепление сигналов (их мультиплетность), зависящее от величины константы ССВ, которая характеризует энергию такого взаимодействия. Современные методы магнитного резонанса позволяют влиять на характер проявления ССВ в спектрах ЯМР (например, с использованием различных методик гомо- и гетеродвойного резонанса).

Принципиальная возможность фиксировать суперпозиционные состояния спинов обусловлена спецификой явления ЯМР – его реализация связана с воздействием внешним магнитным полем на квантовую систему через спиновое пространство, в то время как ССВ реализуется в координатном пространстве. Это взаимодействие не разрушается в силу незначительной величины магнитной энергии ядра, находящегося в магнитном поле спектрометра ЯМР. Можно сказать, что спин-спиновые взаимодействия – своеобразные «отпечатки пальцев» когерентных состояний атомных спинов (потенциальных q-битов или квантовых битов информации) в спектрах ЯМР.

Применительно к современному состоянию теории квантовой информации по поводу «отпечатка пальцев» можно отметить следующее. В соответствии с законами квантовой механики, принципиальным моментом для квантовых систем является возможность нахождения их в перепутанных (entanglement) состояниях [1]. Факт перепутанности означает, что части квантовой системы находятся в скоррелированном состоянии. Перепутанность состояний (квантовая корреляция) – необходимая стадия, предшествующая проведению вычислительных операций. В этом смысле можно говорить о приготовлении таких состояний. Спин-спиновое взаимодействие является собой пример экспериментального проявления (в спектрах ЯМР) перепутанности систем, содержащих в своем составе кубиты. Продолжая такую аналогию, следует заключить, что дальнейшее спин-спиновое взаимодействие (через четыре и более химических связи) может являться мерой перепутанности сложных квантовых систем, содержащих большое число кубитов. Если это так, то открывается еще одна возможность для поиска путей использования магнитного резонанса при решении задач, связанных с квантовыми вычислениями.

В соответствии с основными положениями квантовой информации этапу проведения операций счета должна предшествовать стадия, в которой реализуется когерентное состояние квантового объекта, используемого в качестве элементарного процессора. В выполненных к настоящему времени ЯМР-экспериментах такое состояние «приготавливается» извне путем воздействия соответствующими радиочастотными импульсами ([6] и приведенная там литература). Очевидно, что указанное воздействие возмущает систему так, что во взаимодействие вовлекаются и те состояния, которым не обязательно участвовать в детектируемом явлении со всеми вытекающими отсюда последствиями. Отсюда вытекают, в частности, трудности с организацией вычислительных процессов на основе ЯМР-кубитов. По-видимому, ситуацию можно изменить принципиальным образом, если подобрать такую систему, чтобы она к моменту воздействия ЯМР-импульсов уже находилась в суперпозиционном (по спину) состоянии. Причем к такому состоянию она должна подойти за счет эволюции, не связанной (это необходимо еще раз подчеркнуть) с планируемым на нее ЯМР-воздействием.

В 1967 г. исследователями из ФРГ и США было установлено, что при протекании в магнитном поле химических реакций определенного типа, в спектрах ЯМР про-

дуктов таких реакций наблюдается аномально большая эмиссия или поглощение. Анализ показал, что указанные спектральные особенности свидетельствуют о неравновесной заселенности ядерных зеемановских уровней. В соответствии с существующими представлениями поляризация не может создаваться в готовых молекулах или радикалах. Она возникает в их предшественниках, участвующих в химических реакциях, и потому несет информацию о предыстории конечных продуктов. На каждом этапе эволюции предшественников конечных продуктов может возникать неравновесная заселенность электронных и ядерных уровней, каждый из которых по отдельности или вместе с другими может быть ответственным за описанное здесь кратко явление, получившее название химической поляризации ядер (ХПЯ) [10]. Проведенные исследования показали, что явлению ХПЯ присущи характерные особенности. Среди них – знак поляризации спинов резонирующих ядер конечных продуктов. Отсюда вытекает возможность подбора такого обратимого процесса (например, фотохимического), в котором состояние спинов ядер ЯМР-кубитов может иметь строго нужное для проведения квантовых вычислений состояние. Естественно, что в этом случае последовательность радиочастотных импульсов может быть упрощена, а значит, расширены возможности в использовании ЯМР для решения проблем, связанных с созданием квантовых компьютеров. Наверное, возможны и другие методы (помимо ХПЯ) «подготовки» ЯМР-кубитов.

Заключение

Принципиальным моментом для квантовых вычислений является замечательная особенность спектров ЯМР (которые, как известно, регистрируются в макросистеме), состоящая в том, что в них проявляется спин-спиновое взаимодействие. Оно реализуется в масштабах атомов и молекул (на уровне квантового мира) и обуславливается, в частности, суперпозиционными состояниями резонирующих ядер. В теории

ЯМР этот факт отражается тем, что в формулу, описывающую электронно-ядерное спин-спиновое взаимодействие, входит Ферми-контактный член. По ряду причин в конце двадцатого – начале двадцать первого века метод ЯМР для создания истинного квантового компьютера стал считаться неперспективным. Однако научные достижения последних тридцати лет позволяют вернуться к идее использования на новом уровне явления ЯМР для решения задач, связанных с проблемой создания квантового компьютера. В частности, обсуждена возможность использовать химическую поляризацию ядер с целью перевода ЯМР-кубитов в требуемые для проведения квантовых вычислений состояния.

Список литературы

1. Валиев К.А. Квантовые компьютеры и квантовые вычисления. Успехи физических наук // 2005. Т. 175. № 1. С. 3–39.
2. Алдошин С.М., Зенчук А.И., Фельдман Э.Б., Юрищев М.А. На пути к созданию материалов для квантовых компьютеров. Успехи химии // 2012. Т. 81. № 2. С. 91–104.
3. Harty T.P., Allcock D.T.C., Balance C.J., Guindoni L., Janacek H.A., Linke N.M., Stacey D.N., Lucas D.M. High-Fidelity Preparation, Gates, Memory, and Readout of a Trapped-Ion Quantum Bit. Phys. Rev. Lett. 2014. Vol. 113. P. 220501–220505.
4. Рябцев И.И., Бетеров И.И., Третьяков Д.Б., Энтин В.М., Якшина Е.А. Спектроскопия холодных ридберговских атомов рубидия для применений в квантовой информатике // Успехи физических наук. 2016. Т. 186. № 2. С. 206–219.
5. Chizhik V.I., Chernyshev Y.S., Donets A.V., Frolov V.V., Komolkin A.V., Shelyapina M.G. Magnetic Resonance and Its Applications. Springer Science & Business Media, 2014. 782 p.
6. Jones J.A. Quantum Computing with NMR. Progress in NMR Spectroscopy. 2011. Vol. 59. No. 2. P. 91–120.
7. Voronov V.K. Quantum-dot Controlled Electronic Block Triggering a Quantum Computation Procedure. International Journal of Information Technology and Computer Science. 2020. Vol. 12. No. 2. P. 42–48.
8. Voronov V.K., Dudareva O.V., Geraschenko L.A. 2D Material-based Quantum Logic Gate Operating Via Self Organization of Quantum Dots. Global Journal of Science Frontier Research: A // 2020. Vol. 20. No. 8. P. 13–20.
9. Горбачевич А.А., Шубин Н.М. Квантовые логические вентили // Успехи физических наук. 2018. Т. 188. № 11. С. 1208–1225.
10. Бучаченко А.Л. Химическая поляризация электронов и ядер. М.: Наука, 1974. 246 с.