Vilniaus universiteto
Fizikos fakulteto
Cheminės fizikos institutas

Jonas Franukevičius

KVANTINIO KOMPIUTERIO KUBITŲ MODELIAVIMAS TANKIO FUNKCIONALŲ METODAIS

Bakalauro studijų baigiamasis darbas

Kompiuterinės fizikos ir modeliavimo
studijų programa

Studentas	Jonas Franukevičius
Leista ginti	2020-06-01
Darbo vadovas	doc. Mindaugas Mačernis
Instituto direktorius	prof. Valdas Šablinskas

Vilnius 2020

Turinys

Įvadas 1

1 Teorinis įvadas 2

1.1 Fundametalios sąvokos 2

1.1.1 Kubitas 2

1.1.2 Blocho sfera 3

1.1.3 Dviejų kubitų sistema 4

1.1.4 Kvantinis loginis elementas 5

1.1.5 Kvantinio kompiuterio reikalavimai 7

1.2 Matematinis įvadas 7

1.2.1 Rotacinė transformacija 7

1.2.2 Hilberto erdvė 8

1.3 Branduolių magnetinis rezonansas 8

1.4 Fizikinė kvantinio kompiuterio realizacija 10

1.4.1 Kubito realizacija 10

1.4.2 Šriodingerio lygtis vieno kubito sistemai 11

1.4.3 Precesija 12

1.4.4 Sukinio operatoriaus laikinė priklausomybė 13

1.4.5 LC grandinės pritaikymas 14

1.4.6 Kubito kontrolė 15

1.4.7 Dviejų kubitų sistema 17

1.4.8 Dviejų kubitų energijos lygmenys 18

1.5 Tankio funkcionalų teorija 19

1.5.1 Tankio funkcionalai 19

1.5.2 BMR skaičiavimo teorija 20

1.6 Kvantinė teleportacija be negrįžtamo matavimo 21

2 Tyrimo metodai 25

2.1 Programų paketai.....25
2.2 Skaičiavimo metodika.....25
3 Rezultatai.....26
Pagrindiniai rezultatai ir išvados.....31
Literatūra.....32
Summary.....34

Įvadas

Kvantiniai kompiuteriai gana nauja kompiuterijos atšaka, pranašaujanti didelį efektyvumą skaičiuojant kriptografinius, kvantinės chemijos, paieškos ar kitus reikalaujančius milžiniškų skaičiavimo ir energetinių resursų uždavinius. Kvantinės kompiuterijos užuomazgos atsirado dvidešimto amžiaus antroje pusėje ir teorija yra vystoma iki šių dienų, matant perspektyvą, jog kvantinis procesorius turi galimybę apskaičiuoti nepolinominius uždavinius per polinominį arba superpolinominį laiko tarpą [1]. Žmonijai kvantinė skaičiavimo mašina suteiktų didelį pranašumą, todėl tuo yra susidomėjusios vyriausybinės institucijos ir tarptautinės kompanijos kaip IBM, Google ir Microsoft. Šiuo metu pasaulyje vyksta kokurencinė kova dėl pirmo praktiškai ir komerciškai pritaikomo kvantinio kompiuterio. Ją kol kas laimi daugiausiai kubitų turintis kvantinis kompiuteris „D – Wave 2000Q“ [2] turintis du tūkstančius veikiančių kubitų.

Egzistuoja keli kvantinio kompiuterio realizavimo būdai: kvantinis taškas, jonų spąstai, optinis fotonas ir branduolių magnetinio rezonanso metodas (toliau BMR).

Galimybė atlikti skaičiavimus kambario temperatūros aplinkoje ir iki molekulės dydžio sumažinti kvantinio registro matmenis, BMR būdui suteikia pranašumą prieš kitas fizikines realizacijas. Kol kas BMR pagrindu realizuoti daugiausiai septynis kubitus turintys [3] kvantiniai kompiuteriai. Kubitų skaičių lemia naudojamos molekulės ir galimybės panaudoti jų savybes, todėl yra intensyviai ieškoma tinkamų tyrimo objektų, bet šiuo metu nėra nei programinės įrangos, nei kitų būdų, leidžiančių tiksliai prognozuoti reikiamas savybes.

Darbo tikslas: išanalizuoti kvantinio kompiuterio fizikinės realizacijos branduolių magnetinio rezonanso būdu veikimo principą pagal eksperimentinius duomenis pateiktus mokslinėje publikacijoje [16] ir atlikti modeliavimo darbus naudojantis tankio funkcionalo teorijomis.

Darbo uždaviniai: išnagrinėti BMR veikimo principą ir BMR skaičiavimo metodiką su tankio funkcionalais, sumodeliuoti L-Alanino molekulės trijų kubitų sistemą tankio funkcionalų metodais ir atlikti bandomuosius skaičiavimus naudojant Lietuvos nacionalio fizinių ir technologijos mokslų centro, aukšto našumo superkompiuteriu, Vilniaus Universitete, fizikos fakultete, „HPC Saulėtekis“.

1 Teorinis įvadas

1.1 Fundametalios sąvokos

Šiame skyriuje aptarsime sąvokas reikalingas suprasti kvantinės informacijos teoriją ir kvantinio kompiuterio realizaciją.

1.1.1 Kubitas

Kvantinis bitas [4] (angl. quantum bit, qubit) yra elementarus kvantinės informacijos vienetas. Palyginimui – klasikinis bitas gali būti nulis arba vienetas, tuo tarpu kubitas pasižymi ne tik tuo, kad gali turėti kvantinę būseną, nusakančią loginį nulį arba vienetą, bet taip pat gali būti ir šių būsenų tiesinė kombinacija, kitaip vadinama superpozicija:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \qquad 1.1.1$$

Amplitudės α ir β bendru atveju yra kompleksinės ir normuotos į vienetą:

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1 \qquad 1.1.2$$

Skaičiavimo metu mes tiksliai nežinome kokia yra kubito būsena, žinome tik galimų būsenų tikimybes, kurias nusako būsenos apmlitudės α ir β.

Apskaičiuokime kubito būsenos amplitudes, kai nulinę arba vienetinę būseną sutiksime su vienoda tikimybe:

$$\alpha = \beta \qquad 1.1.3$$

Įvykdę pakeitimus, perrašome 1.1.2 formulę:

$$\alpha^2 + \alpha^2 = 1 \qquad 1.1.4$$

Sutraukę narius nesunkiai randame, kad:

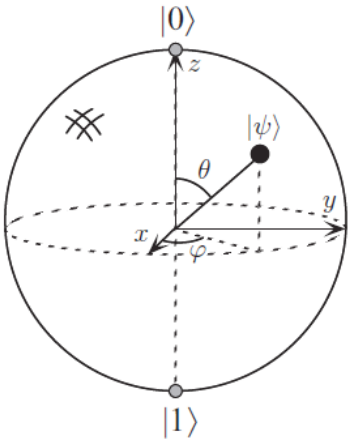
$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad 1.1.5$$

Panašiai kaip klasikinis kompiuteris nustato procesoriaus registre esančio bito vertę nuskaitydamas atmintį, kvantinis bitas įgyja tikslią reikšmę, kai jį pamatuojame. Šiai dienai yra žinoma keletas kubito realizavimo būdų, atitinkančių kvantinio kompiuterio reikalavimus:

- kvantinis taškas,
- optinis fotonas,
- jonų spąstai,
- branduolių magnetinis rezonansas.

Kubitą atspindėti gali fermioninių dalelių sukinys ar optinio fotono poliarizacija, svarbu, kad kubito kvantinė sistema turėtų dvi būsenas ir būtų įmanoma kontroliuoti būsenų amplitudes.

1.1.2 Blocho sfera



1 pav. Blocho sfera [5]

Patogus ir vaizdus kubito būsenos atvaizdavimo būdas yra Blocho sfera (žr. 1 pav.) [5] - tai vienetinio spindulio sfera Dekarto atskaitos sistemoje, kur sferos atskaitos taškas sutampa su sistemos atskaitos tašku, o jos poliai nusako galimas kubito kvantines būsenas:

$$|\psi\rangle = cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \quad 1.1.6$$

Sferos vektoriaus projekcija į z ašį nusako tikimybę kubitą sutikti vienoje iš būsenų, kampas tarp vektoriaus projekcijos į x-y plokštumą ir x ašies vadinamas reliatyviaja faze φ. Toks kubito būsenos atvaizdavimas tampa ypatingai patogus, bandant suprasti, kaip kubitą veikia aplinka, elektromagnetinis laukas ar, optinio fotono atveju, įvairūs kristalai, kurie veikia fotono poliarizaciją. Tegu, kubito būsena yra viršutinė (angl. up state) ir θ = 0; nesunku pastebėti kuo tampa, formulėje 1.2.1, nuo kampo θ priklausantys nariai:

$$|\psi\rangle = cos\,0\,|0\rangle + e^{i\varphi}sin\,0\,|1\rangle = |0\rangle \quad 1.1.7$$

Tuo pačiu verta paminėti, kad nuo realiatyviosios fazės kubito būsenos amplitudės nepriklauso. Sakykime kubito būsenos vektorius Blocho sferoje nukreiptas išilgai y ašies:

$$\varphi = \frac{\pi}{2}, \theta = \frac{\pi}{2} \quad 1.1.8$$

Įsistačius šias vertes į 1.1.6 formulę ir išnaudojant tikrinių banginių funkcijų ortogonalumą, banginę funkciją daugindami iš atitinkamos tikrinės būsenos, gauname būsenų amplitudes:

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad 1.1.9$$

1.1.3 Dviejų kubitų sistema

Norint suprasti kaip veikia daugiau nei vieno kubito kvantinės sistemos, užtenka panagrinėti dviejų kubitų sistemą:

$$|\psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle \quad 1.1.10$$

Matome, kad kvantinė sistema yra keturių būsenų superpozicija, kurioje atitinkamos būsenos tikimybę nusako amplitudė α_{ij}, kuri bendru atveju yra kompleksinė. Sistemos būsenų amplitudės yra normuojamos į vienetą:

$$\sum_{i}^{N} |\alpha_i|^2 = 1 \quad 1.1.11$$

Analogiškai yra ir su sistemomis, kurios turi daugiau kubitų. Daugiau negu vieno kubito sistemos yra vadinamos kvantiniu registru. Kvantiniu registru gali būti bet kokia kvantinė sistema, kurios būsenų kiekį, atitinka dėsnis 1.1.12, kur N yra būsenų kiekis, o n – kubitų skaičius:

$$N = 2^n \quad 1.1.12$$

1.1.4 Kvantinis loginis elementas

Fizikinis poveikis kubitui arba kvantiniam registrui vadinamas kvantiniu loginiu elementu [6] (angl. quantum logic gates). Poveikį gali sukelti fotonas, elektromagnetinio lauko pokytis, optinės terpės pakitimas - priklauso nuo kvantinio kompiuterio fizikinės realizacijos. Kvantinį loginį elementą X galime palyginti su klasikiniais loginiais vartais NOT – pasirinkto bito būsena apverčiama.

Universalūs kvantiniai loginiai elementai yra elementų šeima iš kurių kombinacijos galima sukurti bet kokius kitus kvantinius elementus. Pagrindiniai universalūs kvantiniai elementai yra šie:

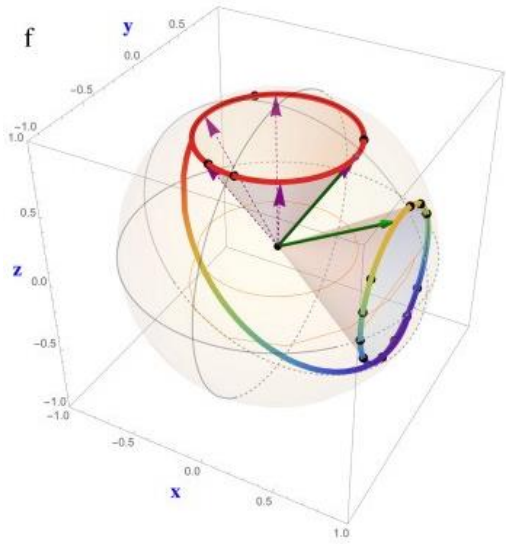
- CNOT
- X
- Y
- Z

Kvantiniai loginiai elementai yra skirstomi į vieno kubito ir kontrolinių elementų grupes. Vieno kubito kvantiniai elementai matematiškai aprašomi kaip dviejų eilučių ir stulpelių ermitiškai jungtinė, kvadratinė matrica, pavyzdžiui X, Y ir Z elementai atitinka kvantinėje mechanikoje plačiai naudojamas Pauli matricas ir pasuka kubito būseną pasirinktos ašies atžvilgiu kampu π:

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad 1.1.13$$

Dviejų arba daugiau kubitų kvantiniai loginiai elementai yra vadinami kontroliniais elementais. Šis pavadinimas nusako jų poveikio prasmę – vieno iš pasirinkto kubito būsenos poveikis priklauso nuo kito kubito būsenos. Kubitas, kurio būsena yra keičiama yra taikinys, o kontroliniu kubitu vadinamas kubitas, nuo kurio priklauso taikinio būsenos pokytis. Vienas iš plačiausiai naudojamų kontrolinių elementų yra CNOT (angl. controlled not), jo paskirtis yra apversti taikinio būseną, tada ir tik tada, kai kontrolinio kubito būsena yra viršutinė. Matematiškai CNOT elementą reiktų aprašyti kaip keturių eilučių ir stulpelių kvadratinę, ermitiškai jungtinę matricą:

$$CNOT = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad 1.1.14$$



2 pav. H loginio elemento poveikio vizualizacija rotuojančiai kubito būsenai [7]

Labai svarbu žinoti H (angl. Hadamard) loginį elementą, kuris kubito būseną pasuka y ašyje 90° sekant 180° rotacijai aplink x ašį (žr. 2 pav.) [7]. Matrica nusakanti H elementą atrodys taip:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix} \quad 1.1.15$$

Dabar galime parodyti, kaip kubitą veikia kvantinis loginis elementas. Paprasčiausiu atveju paimkime loginį elementą X ir kubitą, kurio būsenų amplitudės yra α ir β:

$$H|\psi\rangle = \begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\beta\\ \alpha\end{bmatrix} \quad 1.1.16$$

Matome, kad gautas rezultatas yra būsenos apvertimas.

1.1.5 Kvantinio kompiuterio reikalavimai

Kvantinis kompiuteris turi atitikti kelis reikalavimus [8]:

- turėtų būdą atvaizduoti kvantinę informaciją,
- galėtų taikyti universalių kvantinių loginių elementų šeimą,
- paruošti pradinę būseną,
- atlikti būsenos matavimą.

1.2 Matematinis įvadas

Šis skyrius skirtas supažindinti su būtinais matematiniais įrankiais nagrinėjant BMR kvantinio kompiuterio realizaciją.

1.2.1 Rotacinė transformacija

Sukininę būseną galime matematiškai pasukti panaudoję unitarinę transformaciją:

$$U = e^{-\frac{i\vec{n}\vec{\sigma}\phi}{2}} \quad 1.2.1$$

Skleidžiame eksponentę Teiloro eilute:

$$U = I \sum_{j=0,2,4,\ldots} \frac{i^j}{j!}(\frac{\varphi}{2})^j + i(\vec{n}\vec{\sigma}) \sum_{j=1,3,5,\ldots} \frac{i^{j-1}}{j!}(\frac{\varphi}{2})^j \quad 1.2.2$$

Atlikus pakeitimus išraiška supaprastėja:

$$U = I\cos\frac{\varphi}{2} + i(\vec{n}\vec{\sigma})\sin\frac{\varphi}{2} \quad 1.2.3$$

1.2.2 Hilberto erdvė

Kelių dalelių sistemos dinamikai aprašyti reikia operatorių, kurie įskaitytų visas sistemos daleles. Pavyzdžiui, Pauli matricos Z operatorių veikiantį tik vieną kubitą iš trijų, atitinkamai galime perskaičiuoti tokiu būdu:

$$Z_1 = Z \otimes I \otimes I \quad 1.2.4$$

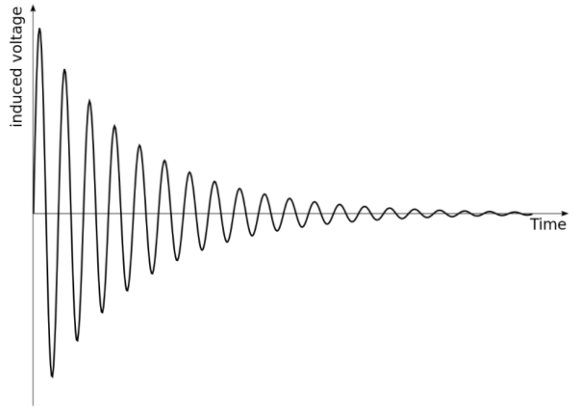
$$Z_2 = I \otimes Z \otimes I \quad 1.2.5$$

$$Z_3 = I \otimes I \otimes Z \quad 1.2.6$$

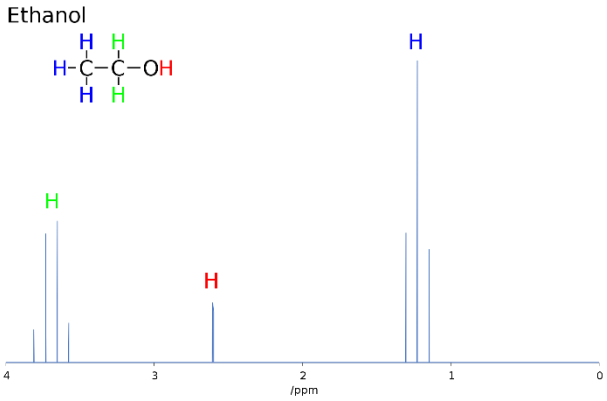
1.3 Branduolių magnetinis rezonansas

Tai yra fizikinio tyrimo metodas, kai molekulių ansamblis patalpinamas į stiprų išorinį magnetinį lauką ir yra taikomi silpno kintančio magnetinio lauko trikdžiai megahercų srityje. Išorinio magnetinio lauko stiprumas gali būti 10 – 20 T, šis magnetinis laukas sukuria kvantavimą, kuris žinomas kaip Zeeman‘o efektas. Bandinys taip pat veikiamas kintamu magnetiniu lauku, statmenu išoriniam magnetiniui laukui. Jeigu kintamo magnetinio lauko dažnis sutampa su branduolių Larmoro precesijos dažniu, bandinys rezonuoja ir bandinio įmagnetėjimo vektorius pradeda precesuoti aplink išorinio magnetinio lauko vektorių.

Nutrūkus trikdžiui įmagnetėjimo vektorius grįžta atgal į pusiausvyros būseną išilgai išorinio magnetinio lauko vektoriaus, šioje stadijoje bandinys indukuoja ritėje elektrinį eksponentiškai slopstantį harmoninį signalą vadinamą laisvosios indukcijos gęsimu (žr. 3 pav.) [9]. Signalas fiksuojamas ir jam skaitmeniškai atliekama Furjė transformacija, taip gaunamas BMR spektras. Spektras (žr. 4 pav.) [10] parodo molekulės branduolių Larmoro precesijos dažnio pokytį dėl cheminės aplinkos. Abscisių ašyje nurodytas cheminis poslinkis (angl. chemical shift) nusakomas santykiniais matavimo vienetais (angl. parts per million, ppm.). Žymimas δ ir jo fizikinė prasmė yra nurodyti kokia santykine dalimi skiriasi branduolio Larmoro precesijos dažnis dėl cheminės aplinkos. Ordinačių ašyje nusakomas intensyvumas.



3 pav. Laisvosios indukcijos gęsimas [9]



4 pav. Etanolio molekulės branduolinio magnetinio rezonanso spektras [10]

1.4 Fizikinė kvantinio kompiuterio realizacija

1.4.1 Kubito realizacija

Nagrinėjant branduolių magnetinį rezonansą, galime įsivaizduoti neturinčią krūvio sukininę dalelę, kurios Hamiltonianas:

$$\hat{H} = -\vec{B}\vec{\mathfrak{m}}_s, \tag{1.4.1}$$

kur sukinio operatorius aprašomas taip:

$$\vec{\mathfrak{m}}_s = -\frac{2\mu_B}{\hbar}(\hat{S}_x\vec{n}_x + \hat{S}_y\vec{n}_y + \hat{S}_z\vec{n}_z) \tag{1.4.2}$$

Magnetinio lauko vektorių galime pažymėti kaip einantį lygiagrečiai z ašies:

$$\vec{B} = B\vec{n}_z \tag{1.4.3}$$

Giromagnetinis santykis nusakomas taip:

$$\gamma_n = \frac{e}{2m_p}g_n = \frac{g_n\mu_N}{\hbar}, \tag{1.4.4}$$

Kur g_n yra branduolio g – faktorius, o μ_N yra branduolio magnetonas. Skirtingų cheminių elementų branduoliai turi nevienodą g_n, dėl to skirtingų cheminių elementų branduolių precesijos dažnis homogeniniame išoriniame magnetiniame lauke B yra skirtingas. Tai vadiname Larmoro precesija, o jos dažnis aprašomas taip:

$$\omega = -\gamma B = \frac{2B\mu_B}{\hbar} \tag{1.4.5}$$

Hamiltonianą galime perrašyti:

$$\hat{H} = \frac{\omega}{2}\hat{Z} \tag{1.4.6}$$

1.4.2 Šriodingerio lygtis vieno kubito sistemai

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = \hat{H}|\varphi(t)\rangle \tag{1.4.7}$$

Jeigu atkreipsime dėmesį, mūsų sistemos hamiltonianas nepriklauso nuo laiko, taigi banginę funkciją galime perrašyti taip:

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\varphi(0)\rangle = U(t)|\varphi(0)\rangle \tag{1.4.8}$$

Įsivaizduokime, kad mūsų kubito būsena yra bet kokioje superpozicijoje:

$$|\varphi(0)\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \tag{1.4.9}$$

Dabar galime užrašyti lygtį, kaip atrodo vieno kubito sistema laiko momentu – t:

$$|\varphi(t)\rangle = U(t)|\varphi(0)\rangle = \alpha e^{-i\hat{H}t}|0\rangle + \beta e^{-i\hat{H}t}|1\rangle \tag{1.4.10}$$

Vietoje hamiltono operatoriaus įrašome narius iš 1.4.6 formulės ir gauname:

$$|\varphi(t)\rangle = \alpha e^{-i\frac{\omega}{2}\hat{Z}t}|0\rangle + \beta e^{-i\frac{\omega}{2}\hat{Z}t}|1\rangle \tag{1.4.11}$$

Matome, kad kubito sistemos tikrines vertes paveikia funkcija, kurios argumentas yra Pauli matrica, sandauga. Tai galime interpretuoti kaip:

$$|\varphi(t)\rangle = \alpha f(\hat{Z})|0\rangle + \beta f(\hat{Z})|1\rangle = \alpha f(1)|0\rangle + \beta f(-1)|1\rangle \tag{1.4.12}$$

Iš to išplaukia:

$$|\varphi(t)\rangle = \alpha e^{-i\frac{\omega}{2}t}|0\rangle + \beta e^{i\frac{\omega}{2}t}|1\rangle \quad 1.4.13$$

1.4.3 Precesija

Įdomumo dėlei pažiūrėkime, kokia yra tikimiausios vertės priklausomybė nuo laiko, kai kubitą paveikia Pauli matrica. Teigiame, kad būsenas galime aptikti su vienoda tikimybe:

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad 1.4.14$$

Sukinio projekcijos vidurkis į pasirinktą ašį apskaičiuojamas pagal formulę:

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \langle \varphi(t)|\hat{X}|\varphi(t)\rangle \quad 1.4.15$$

Įsistatome narius ir perrašome:

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{2}(e^{i\frac{\omega}{2}t}\langle 0| + e^{-i\frac{\omega}{2}t}\langle 1|)\,\hat{X}\,(e^{-i\frac{\omega}{2}t}|0\rangle + e^{i\frac{\omega}{2}t}|1\rangle) \quad 1.4.16$$

Bendru atveju, kubito sistemą patogu įsivaizduoti Blocho sferoje kaip vienetinį vektorių, kurio atskaitos taškas sutampa su sferos centru, o Pauli matricų operatorių poveikį kaip kubito vektoriaus rotacijas aplink pasirinktą ašį π rad. kampu. Šiuo atveju mūsų pasirinkta ašis yra x, todėl būsenos apsiverčia.

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{2}(e^{i\frac{\omega}{2}t}\langle 0| + e^{-i\frac{\omega}{2}t}\langle 1|)(e^{i\frac{\omega}{2}t}|0\rangle + e^{-i\frac{\omega}{2}t}|1\rangle) \quad 1.4.17$$

Dėl būsenų ortogonalumo, skirtingų būsenų sandaugos atrodys taip:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}\; i,j = 0,1 \quad 1.4.18$$

Atlikus veiksmus gauname:

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = cos(\omega t) \quad 1.4.19$$

Analogiškai:

$$\langle \hat{Y} \rangle_t = sin(\omega t) \quad 1.4.20$$

Matome, kad dalelė turinti dipolinį magnetinį momentą patalpinta magnetiniame lauke, kuris lygiagretus z ašiai, precesuoja - juda apskritimine trajektorija x-y plokštumoje.

1.4.4 Sukinio operatoriaus laikinė priklausomybė

Skaičiavimų palengvinimui, apskaičiuosime sukinio operatorių priklausomybes nuo laiko:

$$\frac{d\hat{S}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{S}_z] = 0 \quad 1.4.21$$

Taigi matome, kad projekcijos į z ašį operatorius nekinta, kitiems dviems operatoriams naudosime :

$$\frac{d}{dt}(\hat{S}_x \pm i\hat{S}_y) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y] \quad 1.4.22$$

Gauname kad:

$$\hat{S}_x(t) \pm i\hat{S}_y(t) = e^{\pm i\omega t}(\hat{S}_x(0) \pm i\hat{S}_y(0)) \quad 1.4.23$$

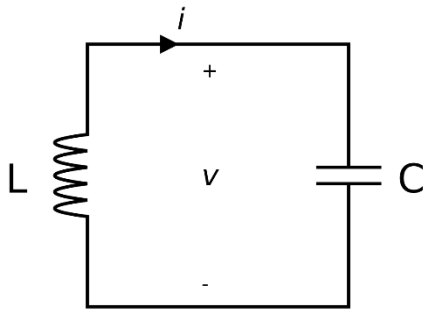
Arba:

$$\hat{S}_x(t) = cos(\omega t)\hat{S}_x(0) - sin(\omega t)\hat{S}_y(0) \quad 1.4.24$$

$$\hat{S}_y(t) = sin(\omega t)\hat{S}_x(0) + cos(\omega t)\hat{S}_y(0) \quad 1.4.25$$

1.4.5 LC grandinės pritaikymas

Neįmanoma mechaniškai išsukti magnetą tokiu greičiu, kuris būtų tinkamas branduolinių magnetiniui rezonansui tirti, todėl naudojama elektronikoje plačiai taikoma LC grandinė (žr. 5 pav.) [11].



5 pav. LC grandinė [11]

Šiuo būdu nesunkiai galime pasiekti norimą kintamo magnetinio lauko dažnį. Magnetinio lauko nuo laiko priklausomybė aprašoma taip:

$$\vec{B}_{rf} = B_{rf}\, cos(\omega t)\vec{x} \qquad 1.4.26$$

Tai nėra tinkama išraiška nes, magnetinis laukas kinta tik pagal x ašį. Galime interpretuoti, kad magnetinis laukas susideda iš dviejų, priešinga kryptimi besisukančių, magnetinių laukų, tai matematiškai galime padaryti pridėdami nulį:

$$\vec{B}_{rf} = \frac{1}{2}B_{rf}[cos(\omega t)\vec{x} + sin(\omega t)\,\vec{y} + cos(\omega t)\vec{x} - sin(\omega t)\,\vec{y}] \qquad 1.4.27$$

Matome, kad pirmieji du trigonometriniai nariai nusako magnetinio lauko sukimasį prieš laikrodžio rodyklę, o kiti du – pagal laikrodžio rodyklę. Patogumo dėlei perrašysime:

$$\vec{B}_{\pm} = \frac{1}{2}B_{rf}[cos(\omega t)\vec{x} \pm sin(\omega t)\vec{y}] \qquad 1.4.28$$

1.4.6 Kubito kontrolė

Kintantį magnetinį lauką galime laikyti nuo laiko priklausančia perturbacija, kurios dažnis lygus trikdomo branduolio Larmoro precesijos dažniui ir fazinis kampas tarp branduolio įmagnetėjimo vektoriaus ir kintamo magnetinio lauko vektoriaus lygus nuliui. Darant prielaidą, jog redukuota Planko konstana lygi vienetui, trikdžio matematinis pavidalas būtų toks:

$$\hat{V}(t) \;=\; \mu_B B_{rf}\, \vec{\sigma} cos(\omega t)\, \vec{x} \;=\; \mu_B B_{rf}\, \hat{X} cos(\omega t) \tag{1.4.29}$$

Pritaikę praeito skyrelio žinias formulę galime perrašyti į:

$$\hat{V}_{\pm}(t) \;=\; \frac{\omega_{rf}}{2}(\hat{X} cos(\omega t) \;\pm\; \hat{Y}\, sin(\,\omega t)) \tag{1.4.30}$$

Transformavus sukinio projekcijų operatorius į rotuojančią atskaitos sistemą panaudojus išraiškas 1.4.24 ir 1.4.25 gauname:

$$\begin{aligned}\hat{V}_{r\pm}(t) \;=\; \omega_{rf}(cos^2(\omega t)\hat{X}(0) \;-\; cos(\omega t) sin(\omega t)\hat{Y}(0) \\ \pm\; sin^2(\omega t)\hat{X}(0) \;\pm\; cos(\omega t) sin(\omega t)\hat{Y}(0))\end{aligned} \tag{1.4.31}$$

Sutraukus narius ir panaudojus trigonometrines tapatybes gauname:

$$\hat{V}_{r+}(t) \;=\; \omega_{rf}\hat{X}(0) \tag{1.4.32}$$

$$\hat{V}_{r-}(t) \;=\; \omega_{rf}(cos(2\omega t)\hat{X}(0) \;-\; sin(2\omega t)\hat{Y}(0)) \tag{1.4.33}$$

Matome, kad perturbacija atsiskiria į dvi dalis, viena yra statinė, o kita virpa dvigubai didesniu greičiu. Logiška, kadangi rotuojančioje atskaitos sistemoje besisukantis magnetinis laukas pagal rotacijos kryptį ir turėtų būti be jokios dinamikos, tuo tarpu priešingos sukimosi krypties magnetinis laukas juda dvigubai greičiau. Su nykstamai maža paklaida galime

atmesti antrąjį narį ir spręsti Šriodingerio lygtį branduolio sukinio banginei funkcijai rotacinėje atskaitos sistemoje:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = \hat{V}_{r+}(t)|\varphi(t)\rangle \qquad 1.4.34$$

Kadangi trikdis nuo laiko nepriklauso, banginę funkciją galime perrašyti taip:

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{V}_{r+}(t)}{\hbar}}|\varphi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega_{rf}\hat{X}(0)}{\hbar}}|\varphi(0)\rangle \qquad 1.4.35$$

Pasinaudojus rotacinės transformacijos formule (žr. 1.2.1 sk.) gauname tokią išraišką:

$$|\varphi(t)\rangle = (I\,cos(-\frac{\omega_{rf}}{2}t) + i\hat{X}(0)\,sin(-\frac{\omega_{rf}}{2}t))|\varphi(0)\rangle \qquad 1.4.36$$

Sakykime kubito pradinė būsena buvo viršutinė, tada bus galima apskaičiuoti būsenos sukininę banginę funkciją:

$$\begin{pmatrix}|0\rangle\\|1\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} cos(\frac{\omega_{rf}}{2}t) & -isin(\frac{\omega_{rf}}{2}t)\\ -isin(\frac{\omega_{rf}}{2}t) & cos(\frac{\omega_{rf}}{2}t)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-isin(\frac{\omega_{rf}}{2}t)\\ cos(\frac{\omega_{rf}}{2}t)\end{pmatrix} \qquad 1.4.37$$

Taigi, mes žinome iš 1.4.4 skyrelio, kad sukinio projekcijos operatoriaus į z ašį laikinė evoliucija lygi nuliui, tai galime apskaičiuoti, kaip ji priklauso nuo trikdžio:

$$\langle\hat{Z}(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}isin(\frac{\omega_{rf}}{2}t) & cos(\frac{\omega_{rf}}{2}t)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-isin(\frac{\omega_{rf}}{2}t)\\ cos(\frac{\omega_{rf}}{2}t)\end{pmatrix} \qquad 1.4.38$$

$$\langle\hat{Z}(t)\rangle = -\frac{\hbar}{2}cos(\omega_{rf}t) \qquad 1.4.39$$

Gavome labai svarbų rezultatą – jeigu kintamo magnetinio lauko kampinis dažnis sutampa su branduolio Larmoro precesijos dažniu ir branduolio įmagnetėjimo vektoriaus fazinis kampas

lygus trikdžio magnetinio lauko vektoriaus faziniui kampui, kinta sukinio projekcija į z ašį. Taip galime kontroliuoti kubito būseną ir atlikti kvantinį loginį elementą X.

1.4.7 Dviejų kubitų sistema

Dviejų kubitų sistemai Hamiltonianą galime užrašyti taip:

$$\hat{H} = \omega_{01}\hat{Z}_1 + \omega_{02}\hat{Z}_2 \qquad 1.4.40$$

Matome, kad Hamiltonianas susideda iš dviejų dalių – pirmo ir antro kubito, bet šis Hamiltonianas nusako dvi vieno kubito sistemas, kurios nesąveikauja tarpusavyje, o tai reiškia, kad CNOT loginio elemento taikymas yra neįmanomas, todėl Hamiltonianą reikia papildyti dar vienu nariu, nusakančiu sąveiką tarp dviejų kubitų:

$$\hat{H} = \omega_{01}\hat{Z}_1 + \omega_{02}\hat{Z}_2 + \hat{H}_{int} \qquad 1.4.41$$

Šis sąveikos Hamiltonianas susideda iš dviejų dalių – tiesioginės magnetinių dipolių sąveikos (angl. direct dipole – dipole coupling) ir netiesiogines magnetinių dipolių sąveikos (angl. J – coupling, indirect dipole - dipole coupling).

$$\hat{H}_{int} = \hat{H}_{DD} + \hat{H}_J \qquad 1.4.42$$

Trumpai aptariant pirmąjį narį reika paminėti, kad branduoliai turintys nenulinį sukinį, sukuria magnetinį lauką, kuris veikia kitus branduolius. Šiuo atveju, šis narys tampa nereikšmingas, nes mūsų tariamas branduolinio magnetinio rezonanso bandinys yra skystas ir tai lemia, kad molekulių pozicijos yra išsidėsčiusios įvairiais kampais ir atstumais, atžvilgiu viena kitos. Iš to išplaukia, kad gretimų branduolių kuriamas magnetinis laukas visada bus atsveriamas kitų aplink esančių molekulių branduolių, todėl šį narį galime prilyginti nuliui. Antrasis narys yra dviejų branduolių sąveika per valentinius ryšius, kuri pasireiškia, kai turintis sukinį branduolys sąveikauja su arti esančiais elektronais, jo matematinė išraiška atrodo taip:

$$\hat{H}_J = \frac{\pi}{2} J(\hat{X}_1\hat{X}_2 + \hat{Y}_1\hat{Y}_2 + \hat{Z}_1\hat{Z}_2) \quad 1.4.43$$

Išraiškoje matome narį J, kuris nusako dažnį, kuriuo dalelė precesuos aplink pasirinktą ašį. Bendru atveju J būtų tenzorius, bet kai bandinys yra skystos būsenos, su nykstamai maža paklaida galime daryti prielaidą, kad tai yra skaliaras. Jeigu, mūsų turimos kvantinės sistemos tiriamųjų branduolių Larmoro precesijos dažnių skirtumas yra žymiai didesnis negu branduolių netiesioginės sąveikos dažnis, galime taikyti sekuliariąją aproksimaciją [12] ir gauname:

$$\hat{H}_J = \frac{\pi}{2} J\hat{Z}_1\hat{Z}_2 \quad 1.4.44$$

Taigi, pilną sistemos Hamiltonianą galime perrašyti taip:

$$\hat{H} = \omega_{01}\hat{Z}_1 + \omega_{02}\hat{Z}_2 + \frac{\pi}{2} J\hat{Z}_1\hat{Z}_2 \quad 1.4.45$$

Tai reiškia, kad sistema turi keturis energijos lygmenis, o BMR spektre bus keturi rezonansiniai pikai. Taip atsitinka dėl to, nes priklausomai nuo valentiniu ryšiu susieto branduolio sukinio būsenos, keičiasi pastarojo branduolio Larmoro precesijos dažnis ir jo rezonansinis pikas skyla į du, per konstantą J nutolusius pikus. Kadangi sąveika yra abipusė, vyksta analogiškas rezonansinio piko skilimas ir kitam valentiniu ryšiu susietam branduoliui.

1.4.8 Dviejų kubitų energijos lygmenys

Dabar galime panagrinėti dviejų kubitų sistemos energijos lygmenis, kurie nusakys kubitų būsenas.

$$E_{\uparrow\uparrow} = \omega_{01} + \omega_{02} + \frac{\pi}{2} J \quad 1.4.46$$

$$E_{\uparrow\downarrow} = \omega_{01} - \omega_{02} - \frac{\pi}{2} J \quad 1.4.47$$

$$E_{\downarrow\uparrow} = -\omega_{01} + \omega_{02} - \frac{\pi}{2}J \quad 1.4.48$$

$$E_{\downarrow\downarrow} = -\omega_{01} - \omega_{02} + \frac{\pi}{2}J \quad 1.4.49$$

Matome, kad energijos lygmenys nėra išsigimę ir skirtumai tarp visų energijos lygmenų yra nevienodi. Būtent dėl netiesioginės branduolių sukinių sąveikos suteiktas energijos lygmenų skirtumų nevienodumas suteikia galimybę skirtingų dažnių kintamo magnetinio lauko trikdžiais paveikti kvantinę sistemą analogiškai kaip CNOT loginis elementas. Paveikus sistemą CNOT vartais turėtumėme apversti vieno iš kubitų būseną, tada ir tik tada, kai kontrolinio kubito būsena yra viršutinė (angl. up state). Reiškia, reikia kad būtų skirtingas kintamo magnetinio lauko trikdžio dažnis kiekvienam kvantinės sistemos būsenos šuoliui. Paprastai tariant, su vienu ir tuo pačiu kintamo magnetinio lauko trikdžio dažniu, neturėtumėme indukuoti dviejų arba daugiau skirtingų kubitų būsenos pokyčių.

1.5 Tankio funkcionalų teorija

Tai kvantinės mechanikos skaičiavimo modelis [13], naudojamas kvantinėje chemijoje, modeliuojant daugelio dalelių elektroninę struktūrą. Naudojant šią teoriją, daugiaelektroninės sistemos savybės nustatomos naudojant funkcionalus. Tankio funkcionalų teorija yra vienas plačiausiai panaudojamų metodų tiriant kvantinius reiškinius.

1.5.1 Tankio funkcionalai

Šiuo metu molekulių skaičiavimuose naudojamos dvi funkcionalų klasės: gradientiškai pataisyti (BLYP) ir hibridiniai funkcionalai (B3LYP).

Molekulės banginė funkcija yra sudaryta iš molekulinių orbitalių elementų, kurios sukonstruotos kaip tiesinės bazinių funkcijų kombinacijos. Bazinės funkcijos turi būti parinktos taip, kad būtų pakankamai gerai aprašomas elektronų pasiskirstymas atomuose ir molekulėse. Bazinių funkcijų tipai yra šie: minimalios, padidinto valentingumo ir Pople bazinės funkcijos.

1.5.2 BMR skaičiavimo teorija

Cheminio poslinkio tenzorius BMR spektroskopijoje yra vienas svarbiausių spektroskopijos parametrų kvantinėje chemijoje [14]. Kiekvienam branduoliui N cheminis poslinkis nusakomas mišria energijos antros eilės išvestine pagal magnetinį lauką ir branduolio magnetinį momentą, kur i ir j nusako erdvines komponentes:

$$\sigma_{ij}^{N} = \frac{\partial^2 E}{\partial B_i \partial m_{N_j}} \quad 1.5.1$$

Cheminio poslinkio tenzorius susideda iš dviejų dalių, paramagnetinio ir diamagnetinio tenzorių:

$$\sigma = \sigma_p + \sigma_d \quad 1.5.2$$

Šių tenzorių matematinių išraiškų pavidalas, kur k yra elektrono skaičius, N branduolio skaičius, n energijos lygmens skaičius, o i ir j yra erdvinės komponentės, yra toks [14]:

$$\sigma_{ij}^{d} = \frac{1}{2c^2}\left\langle \psi_0 \middle| (r_{Nk}^2 \delta_{ij} - r_{Nk_i} r_{Nk_j}) r_{Nk}^{-3} \middle| \psi_0 \right\rangle \quad 1.5.3$$

$$\sigma_{ij}^{p} = \frac{-1}{2c^2} \sum_{n} \frac{1}{E_n - E_0} \langle \psi_0 | L_{k_i} | \psi_n \rangle \left\langle \psi_n \middle| L_{Nk_j} r_{Nk}^{-3} \middle| \psi_0 \right\rangle + C.C. \quad 1.5.4$$

Kvantinės sistemos banginės funkcijos ir energijos lygmenys apskaičiuojami tankio funkcionalo teorijomis, šie parametrai po to yra naudojami pagal formules 1.5.3 ir 1.5.4 apskaičiuoti diamagnetinį ir paramagnetinį cheminio poslinkio tenzorius.

Netiesioginė branduolių sukinio – sukinio sąveika (angl. Fermi contact) yra abipusis sąveikaujančių branduolių Larmoro precesijos dažnių pokytis priklausantis nuo branduolių sukinių būsenų. Ši sąveika nusakoma kaip mišri energijos išvestinė pagal sąveikaujančių branduolių sukinio judesio kiekio momentą [15]:

$$J_{=AB} = \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial I_A} \otimes \frac{\partial}{\partial I_B} E \quad 1.5.5$$

Molekulių ansambliams, kurie yra dujų arba skysčio pavidalo galime daryti prielaidą:

$$J_{AB} = \frac{1}{3} Tr J_{=AB} \quad 1.5.6$$

Dabar galime įvesti universalesnį sąveikos matematinį aprašymą, kai branduolių giromagnetiniai santykiai yra įskaičiuoti:

$$K_{=AB} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{\gamma_A \gamma_B} J_{=AB} \quad 1.5.7$$

Kai molekulių ansamblis yra dujų ar skysčio pavidalo galioja ta pati prielaidos taisyklė. Apskaičiuoti izotropinę Fermi kontakto sąveiką galime pagal formulę [15]:

$$K_{AB}^{FC} = \frac{2}{3} \sum_{k\sigma} \left\langle \psi_{k\sigma}^{(0)} \middle| h_A^{FC} \middle| \psi_{k\sigma}^{(B)FC} \right\rangle \quad 1.5.8$$

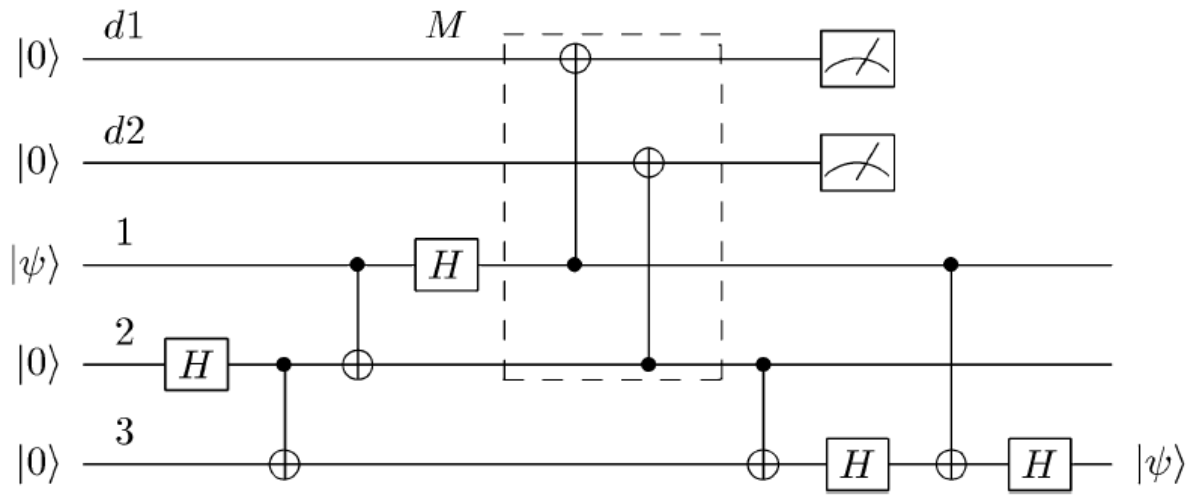
Simboliai A ir B nurodo branduolius, kurie sąveikauja, FC nurodo netiesioginę branduolių sąveiką, raidė k nusako orbitales, o simbolis σ – sukininę būseną. Skliausteliuose esantys indeksai nusako banginės funkcijos pataisą: (0) – nesutrikdyta orbitalė, (B)FC – sutrikdyta branduolio B netiesioginės sąveikos orbitalė. Išraiškos viduryje esantis operatorius matematiškai atrodo taip [15]:

$$h_A^{FC} = \left\{ \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^3}{em} \right\} \frac{8\pi}{3} \alpha^2 \delta(r_N) s \quad 1.5.9$$

Čia matomi simboliai α yra Somerfeldo smulkiosios struktūros konstanta, Dirako delta funkcijos argumentas yra skirtumas tarp elektrono spindulio vektoriaus ir branduolio spindulio vektoriaus, o raidė s simbolizuoja elektrono sukinį. Tankio funkcionalo teorijų pagalba apskaičiuojamos orbitalės, kurios vėliau yra naudojamos pagal ... formulę gauti netiesioginės sąveikos dažniams.

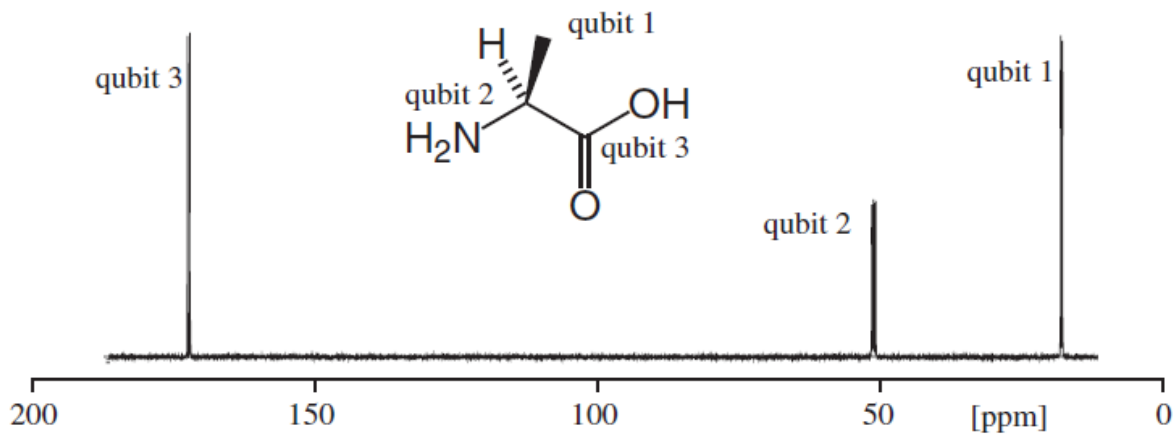
1.6 Kvantinė teleportacija be negrįžtamo matavimo

Mokslinėje publikacijoje [16] L – Alanino molekulė buvo panaudota kaip trijų kubitų registras su dviejais pagalbiniais detektoriaus kubitais teleportuoti neapibrėžtą kubito būseną neatlikus negrįžtamų matavimų. Metilo anglis buvo parinkta kaip pirmas kubitas, alfa anglis kaip antras kubitas ir trečias kubitas buvo karbonilinė anglis. Tuo tarpu du detektoriaus kubitus atvaizdavo alfa protonas ir metilo grupės trys protonai. Detektoriaus pirmas ir antras kubitai susiejami CNOT loginiais elementais su registro pirmu ir antru kubitu atitinkamai. Pritaikius kvantinę grandinę (žr. 6 pav.) [16] ir negrįžtamai pamatavus detektoriaus kubitus, kvantinė būsena teleportuojama iš pirmo kubito į trečią.



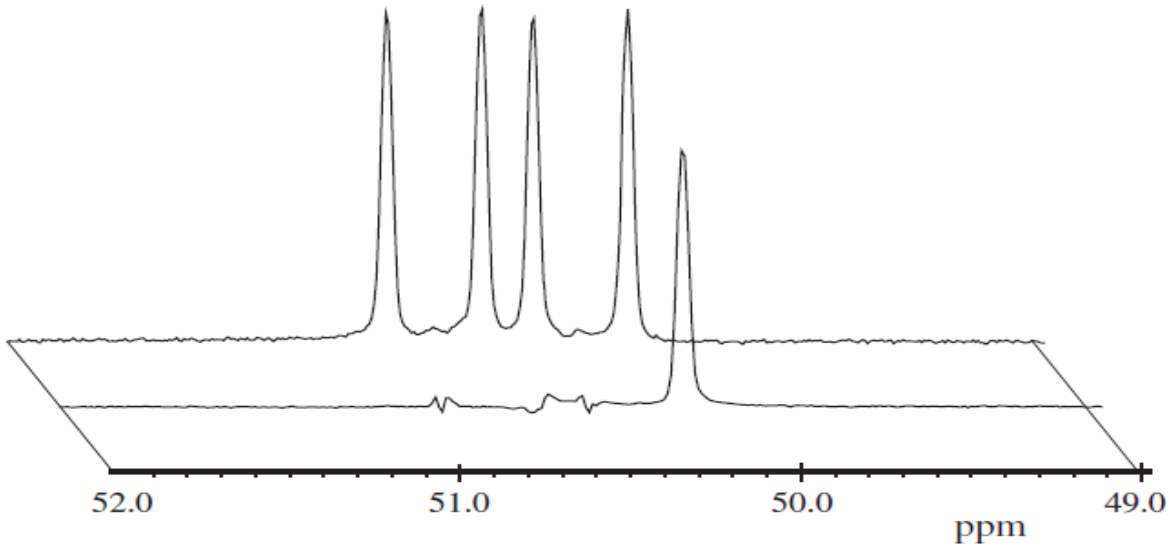
6 pav. Kvantinės teleportacijos grandinė su detektoriumi [16]

Kvantinio registro kubitai nematuojami, todėl kubitų būsenos lieka neapibrėžtos. Ši kvantinė grandinė fiziškai realizuojama taikant megahercinių kintamo magnetinio lauko Gausinių pulsų seką, kurios trukmė maždaug viena šimtoji sekundės. Eksperimente buvo nustatytas L – Alanino molekulės BMR spektras ir išgrynintas naudojant WALTZ-16 metodą anglies atomų sistemos BMR spektras (žr. 7 pav.) [16].



7 pav. Eksperimentiniai L – Alanino anglies atomų, branduolinio magnetinio rezonanso spektro duomenys [16]

Vizualiai matomi tik trys rezonansiniai pikai, nors trijų kubitų sistemai esant visų būsenų superpozicijoje idealiomis sąlygomis BMR spektre turėtų matytis aštuoni vienodo intensyvumo rezonansiniai pikai. Trečią ir pirmą kubitus dėl netiesioginės branduolių sąveikos atvaizduotų po du rezonansinius pikus, tačiau antro kubito spektras dėl abipusės netiesioginės branduolių sąveikos iš pirmo ir trečio kubitų būtų sudarytas iš keturių rezonansinių pikų. Tą atvaizduoja detalesnė antro kubito BMR spektro vizualizacija (žr. 8 pav.) [16].



8 pav. Antro kubito smulkusis BMR spektras kai kvantinis registras yra superpozicijoje (gale) ir po Gausinio π/2 pulso (priekyje) [16]

1 lentelėje pateikti sąveikų dažniai remiantis eksperimentiniais rezultatais [16]. Minuso ženklu pažymėtas lentelės laukas reiškia, kad eksperimentiškai nustatyti duomenų nepavyko, o i ir j nusako kubito numerį.

1 lentelė eksperimentiniai J_{ij} sąveikos rezultatai [16]

i	j	J_{ij}, Hz
2	3	53.8
1	3	-
1	2	34.8

2 Tyrimo metodai

2.1 Programų paketai

Skaitmeniniam modeliavimui buvo naudotas Gaussian kvantinės chemijos modeliavimo paketas, leidžiantis skaičiuoti molekulės geometriją, branduolinio magnetinio rezonanso savybes, bei kitus norimus uždavinius.

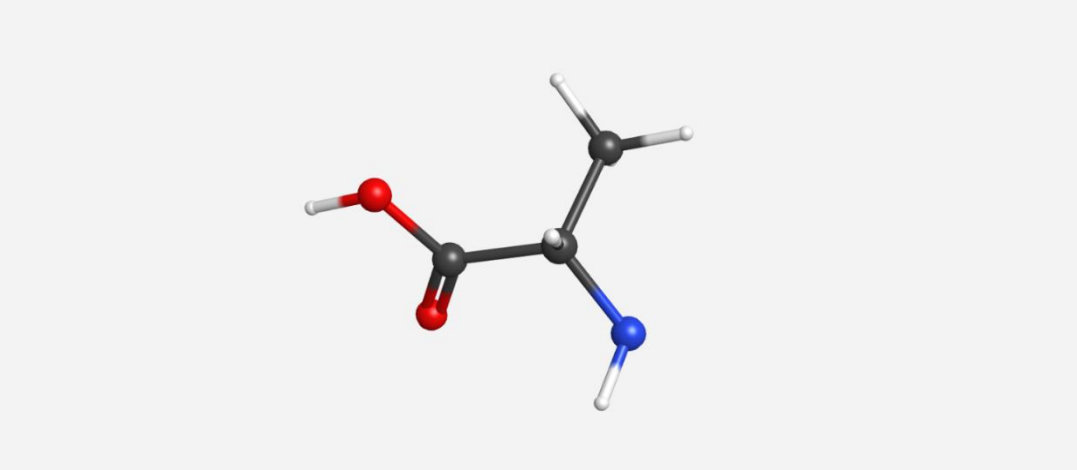
WebMO prieiga prie „HPC Saulėtekis“ superkompiuterio per internetinę naršyklę, kurioje yra Gaussian skaičiavimų paketas. WebMO leidžia patogiai vykdyti skaičiavimo užklausas ir peržiūrėti gautus rezultatus.

2.2 Skaičiavimo metodika

Dirbtinai sukurta cheminė struktūra: L – Alanino molekulė (C3H7O2N). Struktūra optimizuota vakuume, naudojant B3LYP/6-311+G(2d, p) tankio funkcionalą. Optimizuota struktūra panaudota branduolinio magnetinio rezonanso skaičiavimams atlikti, kurie naudojo tą patį funkcionalą ir gauti L – Alanino molekulės vandenilio bei anglies BMR spektrai. Taip pat su optimizuota struktūra atlikti trys skaičiavimai netiesioginėms branduolių sąveikoms gauti, šiems modeliavimams panaudoti funkcionalai yra: B3LYP/6-311+G**, B3LYP/6-311+G(2d, p) ir B3LYP/EPR-III. Gauti netiesioginio sukinio – sukinio sąveikos rezultatai palyginti su eksperimentiniais duomenimis [14] ir kartu su anglies atomų BMR spektru išanalizuoti pagal 1.4.7 – 1.4.8 skyrius nagrinėjant ar L – Alanino molekulė turi pilnai veikiantį kvantinį registrą.

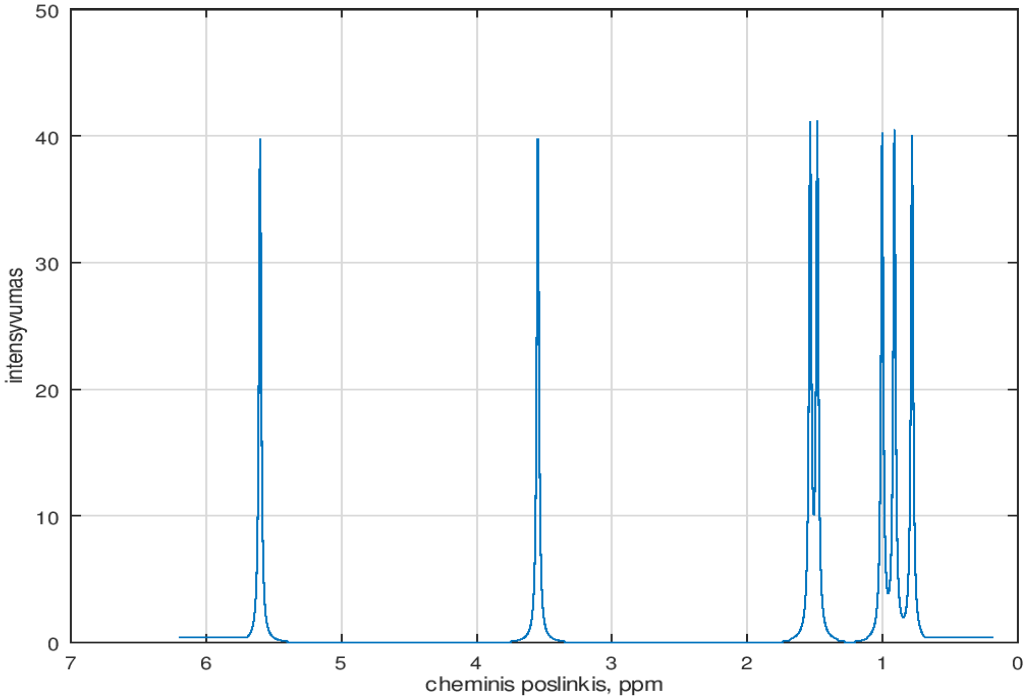
3 Rezultatai

L - Alanino molekulė (8 pav.) buvo optimizuota naudojant B3LYP/6-311+G(2d, p) funkcionalą.



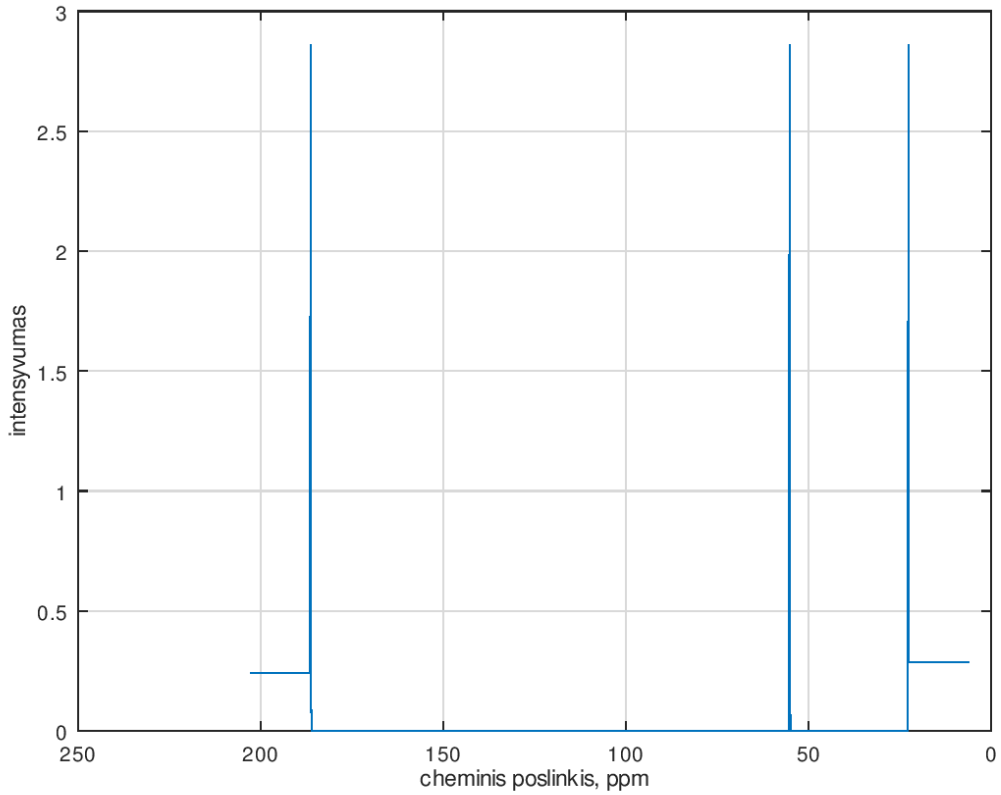
9 pav. L – Alanino molekulės geometrija

L - Alanino vandenilio branduolių BMR spektras pateiktas 9 pav. Dabar galime atsakyti į klausimą, kodėl kvantiniams skaičiavimams netinka visi vandenilio branduoliai. Taip yra todėl, kad kai kurių branduolių Larmoro precesijos dažniai persikloja ir tai gali suteikti energijos lygmenų išsigimimą. Taip pat vandenilio branduoliai nebūtinai yra susieti valentiniais ryšiais su kitais kvantinio registro branduoliais, tai reiškia kad, nebus skirtingų tarpų tarp energijos lygmenų ir sistemą paveikus kintamo magnetinio lauko trikdžiu neįmanoma indukuoti konkretaus branduolio būsenos pokyčio.



10 pav. L - Alanino vandenilio atomų branduolinio magnetinio rezonanso spektras

10 pav. pateiktas L - Alanino anglies atomų branduolių magnetinio rezonanso spektras, kuriame matome tris rezonansinius pikus. Tai reiškia, kad trys skirtingi anglies branduoliai turi skirtingą Larmoro precesijos dažnį. Priešingai negu vandenilio branduolių atveju, matome, kad anglies branduolių Larmoro precesijos dažniai atskirti dideliais tarpais: 32.5 dalimis iš milijono tarp pirmo ir antro kubito ir 131.1 dalimis iš milijono tarp trečio ir antro kubito (žr. 2 lent.). Pagal 1.4.7 skyrių galime daryti išvadą, jog L – Alanino anglies branduoliai gali atvaizduoti kvantinę informaciją.



11 pav. L – Alanino anglies atomų branduolinio magnetinio rezonanso spektras

2 lentelėje nurodoma kubitų cheminiai poslinkiai dalimis iš milijono neįskaitant netiesioginės branduolių sukinių sąveikos.

2 lentelė Anglies atomų - kubitų cheminis poslinkis

Kubito nr.	1	2	3
δ	22.623	55.169	186.334

Kvantiniams skaičiavimams nėra pakankama sąlyga, kad sistema galėtų atvaizduoti pavienius kubitus, bet kartu kubitai privalo turėti sąveiką tarp jų. Ši sąveika galutinai tenkina kvantinio kompiuterio reikalavimą pritaikyti universalius kvantinius loginius elementus įskaitant ir kontrolinius elementus daugiau negu vienam kubitui. Kaip ir minėjome anksčiau (žr. 1.4.7 sk.), molekulėje esantys branduoliai sąveikauja tarpusavyje per valentinius ryšius pakoreguodami energijos lygmenų tarpus. Gaussian skaičiavimo pakete pavyko suskaičiuoti šias sąveikas pakankamai tiksliai. Gaussian paketas L – Alanino anglies branduolius

sunumeravo skaičiais 2, 4, 6, kurie atvaizduoja pirmą, antrą ir trečią kubitus atitinkamai. Lentelėse esantys duomenys yra pateikti hercais, kurie nusako branduolinę sukinio – sukinio sąveiką J (angl. total nuclear spin – spin coupling J).

3 lentelėje pateikti duomenys apskaičiuoti branduolių netiesioginės sąveikos dažniai naudojant Spin - Spin algoritmą, kai funkcionalas buvo parinktas B3LYP/6-311+G**. Skaičiavimo laikas pagal WebMO buvo 38 minutės.

3 lentelė J_{ij} sąveikos rezultatai modeliuojant su B3LYP/6-311+G** funkcionalu

i	j	J_{ij}, Hz
2	4	53.2
2	6	0.216
4	6	35.5

4 lentelėje pateikti duomenys apskaičiuoti branduolių netiesioginės sąveikos dažniai naudojant Spin - Spin algoritmą, kai funkcionalas buvo parinktas B3LYP/6-311+G(2d, p). Skaičiavimo laikas pagal WebMO buvo 54 minutės.

4 lentelė J_{ij} sąveikos rezultatai modeliuojant su B3LYP/6-311+G(2d, p) funkcionalu

i	j	J_{ij}, Hz
2	4	52.4
2	6	0.148
4	6	35

5 lentelėje pateikti duomenys apskaičiuoti branduolių netiesioginės sąveikos dažniai naudojant Spin - Spin algoritmą, kai funkcionalas buvo parinktas B3LYP/EPR-III. Skaičiavimo laikas pagal WebMO buvo 2 valandos 29 minutės.

5 lentelė J_{ij} sąveikos rezultatai modeliuojant su B3LYP/EPR-III funkcionalu

i	j	J_{ij}, Hz
2	4	52.7
2	6	0.534
4	6	34.6

Iš gautų duomenų matome, kad sąveika tarp L – Alanino molekulės anglies branduolių egzistuoja, o anglies BMR spektre (žr. 11 pav.) yra aštuoni rezonansiniai pikai, kurie yra per arti vienas kito, kad tai pamatytumėme vizualiai.

Pagal 11 pav. ir 2 lentelę matome, kad L – Alanino molekulės anglies atomų branduoliai turi nevienodą Larmoro precesijos dažnį, iš to išplaukia kad, L – Alanino anglies atomų sistema turi aštuonis neišsigimusius energijos lygmenis (žr. 1.4.7 ir 1.4.8 sk.). Iš pateiktų 3 – 5 lentelių matome, kad anglies atomų branduoliai tarpusavyje sąveikauja, tai reiškia kad, sistemos energijos lygmenys yra atskirti nevienodais tarpais (žr. 1.4.8 sk.). Tai leidžia šiai kvantinei sistemai atlikti CNOT vartus – apversti vieno branduolio sukinį jei kito sąveikaujančio branduolio sukinys yra viršutinis. Sąveika tarp antro ir šešto branduolio (pirmo ir trečio kubito) yra labai maža, to pasekoje, atlikti CNOT vartus šiems branduoliams neišvengiamai tektų panaudojant ketvirtą branduolį. Taigi galime daryti išvadą kad, L – Alanino molekulė gali būti trijų kubitų veikiantis kvantinis registras.

Pagrindiniai rezultatai ir išvados

- Išanalizuotas BMR tipo kvantinio kompiuterio veikimo principas: universaliųjų loginių elementų X ir CNOT taikymas.
- Atlikti L – Alanino molekulės BMR spektrų skaičiavimai naudojant B3LYP funkcionalą.
- BMR spektrų rezultatai nuo eksperimentinių duomenų skyrėsi mažiau negu vienu hercu, nepriklausomai nuo naudotų bazinių funkcijų: B3LYP/6-311+G**, B3LYP/6-311+G(2d, p), B3LYP/EPR-III.
- Tikslingiausia naudoti greičiausiai skaičiuojančią B3LYP/6-311+G** metodiką, kuri skaičiuoja keturis kartus greičiau negu B3LYP/EPR-III.
- Išanalizuota L – Alanino molekulės anglies atomų sistema. L – Alanino anglies atomų sistema turi aštuonis energijos lygmenis su skirtingais tarpais tarp energijos lygmenų, todėl L - Alaniną galime realizuoti kaip trijų kubitų kvantinį registrą.

Literatūra

[1] M. A. Nielsen, I. L. Chuang (2010) Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press. ISBN 978-1-107-00217-3 (p. 138 – 153)

[2] Elizabeth Gibney (2017) D-Wave upgrade: How scientists are using the world‘s most controversial quantum computer prieiga per: https://www.nature.com/news/d-wave-upgrade-how-scientists-are-using-the-world-s-most-controversial-quantum-computer-1.21353 [žr. 2020]

[3] L. M. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood, I. L. Chuang (2001) Experimental realization of Shor‘s factoring algorithm using nuclear magnetic resonance

[4] M. A. Nielsen, I. L. Chuang (2010) Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge: University Press. ISBN 978-1-107-00217-3 (p. 13)

[5] M. A. Nielsen, I. L. Chuang (2010) Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge: University Press. ISBN 978-1-107-00217-3 (p. 15)

[6] M. A. Nielsen, I. L. Chuang (2010) Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge: University Press. ISBN 978-1-107-00217-3 (p. 17)

[7] J. Roell (2018) Demystifying Quantum Gates – One Qubit At A Time prieiga per: https://towardsdatascience.com/demystifying-quantum-gates-one-qubit-at-a-time-54404ed80640 [žr. 2020]

[8] M. A. Nielsen, I. L. Chuang (2010) Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge: University Press. ISBN 978-1-107-00217-3 (p. 279)

[9] Free induction decay, Wikipedia, prieiga per: https://en.wikipedia.org/wiki/Free_induction_decay [žr. 2020]

[10] Nuclear magnetic resonance spectroscopy, Wikipedia, prieiga per: https://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_magnetic_resonance_spectroscopy [žr. 2020]

[11] LC circuit, Wikipedia, prieiga per: https://en.wikipedia.org/wiki/LC_circuit [žr. 2020]

[12] https://inst.eecs.berkeley.edu/~cs191/fa14/homework/hw2sol.pdf [žr. 2020]

[13] M. Mačernis (2011) Aplinkos poveikis fotoindukuotiems reiškiniams organinėse molekulėse, Kvantinės chemijos skaičiavimai (p. 10)

[14] J. C. Facelli (2010). Chemical shift tensors: Theory and application to molecular structural problems. Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, 58(3-4), 176-201.

[15] V. Sychrovsky, J. Grafenstein, D. Cremer (2000). Nuclear magnetic resonance spin – spin coupling constants from coupled perturbed density functional theory. The Journal of Chemical Physics, 133(9), 3530-3547.

[16] Y. Kondo (2007) Quantum Teleportation without Irreversible Detection: NMR – Experiment. Journal of the Physiscal Society of Japan.

Summary

Quantum computer qubit modeling using density functional theory

Jonas Franukevičius

The paper analyzes physical realization of quantum computer by nuclear magnetic resonance (NMR), digital model made using density functional theory (DFT) of L – Alanine molecule and its capabilities to realize quantum register.

Main goals:

- Describing NMR technology for the quantum computing with the L – Alanine molecule as it is discussed in ref. [16].
- Modeling of L – Alanine using DFT.

Tasks:

- Examine quantum computing using NMR.
- Calculating NMR calculations using DFT.
- Making the digital model of L – Alanine three qubit system and perform calculations for testing parameters using DFT methods.

Broad theoretical introduction acquaints with fundamentals of quantum computing and delves deeper into understanding of physical quantum gates in NMR. Introduction has the review of methods to calculate needed parameters by density functional theory (DFT) and resume of experiment about quantum teleportation without irreversible detection [16].

Modeling data were performed with quantum chemistry methods implemented into the Gaussian package. The WebMO interface was used. Computations were performed on resources at the High – Performance Computing Center „HPC Saulėtekis“ in Vilnius University Faculty of Physics. Firstly L – Alanine geometry was optimized by DFT and then put to further NMR calculations. Results of NMR spectrum and values of indirect nuclear spin – spin coupling J, were put to comparison with experimental data [16], and analyzed whether L – Alanine system of carbon nuclei is a valid quantum register.

Main results and conclusions:

- Described physical quantum gates X and CNOT which are usefull for quantum computer realization with NMR.
- Calculations made with B3LYP functional. For calculations of J coupling B3LYP/6-311+G** method is faster than other two used.
- Calculations made for J coupling had accuracy up to one hertz in comparison with experimental data.
- Digital model shows that system of L – Alanine carbon atoms has eight non–degenerate energy levels with different gaps in-between what allows it to be a quantum register capable of applying CNOT gates and therefore valid.