

# 核磁共振量子计算实验 研究进展<sup>\*</sup>

罗 军 詹明生

(武汉物理与数学研究所波谱与原子分子国家重点实验室 武汉 430071)

**摘要** 简要评述了核磁共振量子信息处理实验研究进展。提出了我院进一步发展的建议。

**关键词** 核磁共振,量子计算



物质、能量与信息

是构成现代社会的三大资源,物质是基础、能量是动力,而信息则是知识、智慧与灵魂。物质与能量可以相互转化,能量与物质的量子化是上世纪创立的量子理论的基础。最近十年,信息与量子力学

检验。

在已经实现量子计算的诸多物理方案中,利用液相核磁共振(NMR)进行量子计算研究是当前量子信息实验最为现实和进展尤为突出<sup>[1]</sup>的方案,是实验上惟一演示四量子位以上量子算法的方案。它的优点是:处于液相的核自旋体系与环境耦合较弱,核自旋体系可具有较长的相干时间;核自旋体系又可精确而简单地表现出各种微观效应;可使用已相当成熟的相干控制核自旋体系动力学磁共振技术等。但同时也面临着一些困难:由于 NMR 信号的低灵敏度以及它的信噪比随量子位数的增加而呈指数下降,现有的有效纯态的制备方法无法扩展到多量子位,再受可选择核种类及同核频率空间太小的限制,所以 NMR 多量子位很难扩展,预计液相 NMR 量子计算机的量子位只可达 10 个<sup>[2]</sup>;相干时间与门操作时间之比偏小,无法在较短的相干时间内完成较复杂的量子算法;无法重置量子位,以致无法重复实现量子误码纠正。

结合,产生了以量子计算和量子通信为主要标志的量子信息科学。

量子信息科学是量子理论与信息论、计算机科学、数学等学科的交叉。量子信息以微观体系的量子态为信息载体,奇妙的量子特性具有提高运算速度、确保信息安全、增大信息容量和提高检测精度的功能。量子信息科学引起了各国政府、科学界和信息产业界的高度重视,该领域目前是科学研究的热点之一,在理论和实验上不断取得突破性进展。

量子计算机<sup>[3]</sup>是基于量子力学原理工作、具有存储和处理量子信息的物理装置。它具有有效地解决在经典计算机上无法解决(至少对于现在已知的经典算法)的某些问题(如大数的质因子分解)以及验证量子物理中某些基本物理问题的能力。量子计算机的研究还处在初级阶段,然而初级的量子计算机已经可用来研究某些具有重要科学意义的物理效应,例如,几位的量子计算机可用于 Bell 测量、量子隐形传态以及对量子力学理论进行严格的实验

NMR 量子计算可用来对量子算法的原理进行验证及对其它量子效应进行模拟,为其它量子体系实现量子计算提供技术和经验上的积累,NMR 量子信息处理中所发展的技术有可能成为在其它体系实现量子计算的技术源泉。目前在几个量子位的 NMR 量子计算机研究中所遇到的一些基本问题,例如消相干问题、精确的量子逻辑门和多位扩展的实用方案等,这些基本问题的研究对其它量子体系实现量子计算具有十分重要的借鉴意义。例如,最近利用囚禁离子实现 Deutsch-Jozsa (D-J) 量子算法

<sup>\*</sup> 收稿日期:2003 年 4 月 22 日

就用到了 NMR 量子计算中组合脉冲的思想。

1 国内外现状与发展趋势

目前,开展 NMR 量子信息实验研究的主要有美、英、中诸国。如,美国 MIT 核工程系 Cory 和 Havel 领导的小组、MIT 原子和比特研究中心 Chuang 小组、Los Alamos 国家实验室 Knill 小组、英国剑桥大学 Freeman 小组和牛津大学 Jones 小组等等。国内开展这方面实验工作的单位有:中国科学院武汉物理与数学研究所、中国科学技术大学、清华大学等。下面简要评述一下相关领域的研究进展及发展趋势。

1.1 量子算法实验

D-J 量子算法:Chuang, Jones, Linden 和 Marx 等人先后实验实现了两位、三位和五位 D-J 量子算法。Collins 等人建议使用  $n$  量子位的样品实现  $n$  位的 D-J 量子算法,即不需要附加量子位。Arvind, Collins 和魏达秀等人分别从实验上实现了两位、三位和七位改进后的 D-J 量子算法。D-J 量子算法不仅是最先提出的量子算法,而且是第一个使用 NMR 技术实现的量子算法。尽管此算法实用价值不大,但是能演示某些复杂的量子算法的特点,加深了人们对量子信息处理优越性的了解。特别是实现较多量子位的 D-J 量子算法时,实验上最困难的地方在于精确相干控制多量子位的自旋体系的演化。这些关键技术是实现量子计算中具有重要的作用。

Shor 量子算法: Vandersypen 等人实验上用七量子位的样品演示了在 Shor 量子算法中最简单的例子  $15=5\times3$  的质因子分解。实验上第一次对 Shor 量子算法进行了原理性的验证,同时证明了消相干效应是实验结果的重要误差来源之一。这促使人们重新研究如何实现对较多量子位量子体系精确地相干控制的问题。Shor 量子算法是最重要的量子算法之一,正是由于这一算法的发现才重新激起了人们对量子计算机的研究兴趣。

Grover 量子搜索算法:Chuang, Jones 和 Vandersypen 等人使用两位和三位的样品实验上分别演示了两量子位和三量子位的 Grover 量子搜索算法。尽管此算法只提供了二次方加快,但它还是

比量子 Fourier 变换等量子算法有更大的应用范围,如可用于量子计数 (quantum counting)、加快解决 NP-完全问题、无序结构性数据库的搜索等。

Hogg 高度结构性搜索算法:朱熙文和彭新华等人实验上分别演示了两量子位和三量子位 Hogg 量子算法。第一次实验上演示了在每一逻辑子句中含一个变量的满足性问题(1-SAT)。由于使用了数据库的结构信息,Hogg 量子算法是一种指数加快的量子搜索算法,实验上演示了可在确定的概率(0.9)下一次完成对所要结果的搜索。

量子 Fourier 变换及其应用:付利平和 Weinstein 等人实验上分别实现了两量子位和三量子位离散 Fourier 变换。量子 Fourier 变换可在相位估计、指数搜索算法、Shor 量子算法(质因子分解)、寻找函数周期、离散对数、隐变量量子群等问题中获得应用。基于量子 Fourier 变换,Vandersypen 等人在实验上使用五位样品演示了指数搜索算法。

绝热量子最优化算法:Steffen 等人在三量子位的样品上模拟了绝热量子最优化算法。绝热量子算法为使用量子资源解决某些难题提供了新的方法。实验中引入了一种新技术,将给定的最优算法的一般例子编码在可应用的哈密顿上来实现。实验上验证了完成最优算法所需的时间与简单的消相干模型所预言的一致。

量子博弈:杜江峰等人在两量子位的样品上演示了量子博弈并研究了量子纠缠所起的作用。第一次实验验证了理论所预见的量子纠缠在量子博弈中所起的作用。量子算法、量子密码术和量子克隆在某种意义上可看成是量子博弈。实验结果有助于加深对量子算法、量子密码术和量子克隆等的了解。

Brüschweiler 量子算法:杨晓冬等人对 Brüschweiler 量子算法进行了改进,使其不使用附加量子位,改进后的 Brüschweiler 量子算法使用资源的较少且易于实现,达到了原算法同样的效果;并且在四量子位的样品上实验实现了改进后的 Brüschweiler 量子算法。但是此类算法可能只能在 NMR 体系中实现。

1.2 纠缠态的产生和应用

量子隐形传态:Nielsen 等人在三量子位的

NMR 量子计算机上成功实现了分子内的量子隐形传态。尽管实验上是在分子内部将量子态从一个核隐形传递到另一核,但是隐形传态方案可作为在更大的量子计算中的子程序或应用到量子通信中。利用量子隐形传态和任意单位转动也许可实现普适的量子计算。

量子超密编码:方细明等人用二量子位样品实验演示了量子超密编码原理,在分子内部实验实现了经典信息的传递。尽管量子纠缠的本身并不能用作传递经典信息,但是它能减少在分布式计算中所要求的经典通信容量。量子超密编码是量子纠缠在量子通信中应用的另一例子。

纠缠态的产生:Chuang, Laflamme 和 Knill 等人在实验上实现了两位、三位和七位纠缠态,这些在实验上产生的纠缠态仅仅是有效的纠缠态。量子纠缠作为量子信息处理重要的资源之一,可以在更复杂的量子信息处理中获得应用。Boulant 和 Teklemariam 实验上实现了在分子内部纠缠态的传输和擦除。实验初步演示了在可扩展的量子计算机中所需要的量子信息转移的基本操作,演示了使用脉冲的梯度磁场模拟投影测量的操作。此类实验是模拟实现相干和非相干操纵量子自旋体系重要的一步。Braunstein 等人从理论上证明,当量子位数大于 13 时,液相 NMR 量子系统才有可能存在纠缠。有关产生纠缠态方面的实验将有助于澄清 NMR 量子计算中是否存在纠缠的问题。

### 1.3 模拟量子行为

模拟量子混沌:Weinstein 等人在三量子位的样品上实验模拟了面包师变换,试验了量子混沌对控制性微扰的灵敏性。这可用于研究某些量子混沌动力学中的理论预言。

模拟三体相互作用和截断性谐振子和反简谐振子:Tseng 和 Somaroo 等人使用四量子位和二量子位样品分别模拟了三体相互作用和谐振子与受迫振子问题。量子计算机在对量子系统的模拟理论上优于经典计算机。这些实验初步演示了量子计算机可用于模拟另一量子系统的行为以及截断性或反简谐量子谐振子等特例。

模拟量子擦除:Teklemariam 等人在二量子位和三量子位的样品上模拟了量子擦除行为,在两量

子位系统上演示了量子擦除的基本特征,在两量子位系统上演示了量子擦除可作为操纵量子纠缠的一种方式。实验中使用了 NMR 去耦技术实现部分求迹操作,同时提供了一种实验模拟在强测量中相位失相的非相干控制方法。

近似量子克隆:Cummins 等人在两量子位的样品上实验演示了近似量子克隆的方案。实验结果表明:基于克隆的量子网络,所有输入态的克隆具有接近的保真度,但是不均匀射频场导致的消相干和非相干演化,使实验结果的保真度未能达到理论所预言的阈值。

模拟量子测量中相位丢失和部分求迹操作:Cory 等人用脉冲梯度磁场模拟了在强测量中相位信息损失的过程。Teklemariam 等人用 NMR 去耦技术实现了部分求迹的过程。这两种实验方法在 NMR 量子计算中将会有重要的应用。

模拟消相干效应:Fortunato, Havel 和 Teklemariam 等人使用梯度磁场-扩散诱导的消相干过程研究了消相干现象。这类实验有助于研究消相干效应在量子计算中所起的作用,也可用来研究无消相干子空间等。

### 1.4 控制消相干

量子误码纠正:Cory 等人使用  $^{13}\text{C}$  全标记的丙氨酸样品演示纠正相位误码的三位码方案。实验上不仅第一次验证了量子误码纠正理论的正确性,而且演示了控制三自旋体系的能力。Knill 等人使用七位样品演示了五位量子纠错码,实验上演示了五位量子纠错码可纠正在单量子位中出现的所有错误。在此实验中所取得的保真度足以保持量子纠缠。这些实验仅仅是原理性演示误码纠正理论,而不是纠错码的实际实现。

无消相干子空间和无噪声子系统:Fortunato 和 Viola 等人分别从实验上演示了这两种理论方案中最简单情形。实验上分别实现了无消干单量子位的一般控制和保护单量子位免于环境中集体噪声的影响。这些实验方法将在今后的量子计算中获得重要的应用。

### 1.5 量子逻辑门和精确相干控制

普适量子逻辑门集:Chuang 和 Jones 等人在实验上充分演示了单量子位任意转动、受控相移门、

几何相移门和受控非门等。这些实验是实现复杂量子计算的基础。几何相移门可用来构造容错的量子逻辑门。

对复杂体系精确相干控制 :Cory, Chuang, Collins, Jones, Price 和 Leung 等人分别从实验上演示了在复杂体系中实现精确逻辑门方法、实现对复杂体系精确相干控制其相互作用。这些实验是实现多量子位量子计算的基础。

1.6 NMR 量子计算可能的发展趋势

人们正在探索基于核自旋体系实现实用量子计算机的新方案。进一步发展的趋向是基于固体 NMR<sup>[4]</sup>, 如保留 NMR 优点并且克服其中缺点的 Kane 方案<sup>[5]</sup>、氙代色心晶体中核自旋、超极化 <sup>129</sup>Xe 和 HCl 固体混合物和光泵半导体 NMR<sup>[6]</sup>等。液相 NMR 量子计算机使用预极化分子样品, 如最近提出的仲氢诱导极化(PHIP)样品, 光泵预极化样品等。人们正在探索基于纳米尺度的微加工技术、高效的光探测方法、结合自旋电子学以及其它量子体系所积累的相关技术, 并研究实现单个核自旋量子态的测量和量子计算机的可能方案。

2 我院研究态势与发展建议

2.1 我院研究态势

我院在国内率先启动了“量子物理与信息”知识创新试点方向性项目, 组织武汉物理与数学研究所、半导体研究所、中国科学技术大学、物理研究所和理论物理研究所五单位参加合作研究。该项目和研究队伍后转为承担“973”项目“量子通信与量子信息技术”。我院还在中国科学技术大学组建了量子信息重点实验室。通过项目带动, 培养了一批从事量子信息研究的人才, 我院已初步建成量子信息研究基地。

在 NMR 量子信息处理实验方面, 基于波谱与原子分子物理国家重点实验室在 NMR 原理与方法学研究方面多年的积累, 武汉物理与数学研究所实验演示了两量子位离散 Fourier 变换<sup>[7]</sup>、量子超密编码<sup>[8]</sup>、二量子位和三量子位 Hogg 算法<sup>[9]</sup>、改进的三量子位 Bruschweiler 量子算法<sup>[10]</sup>和七位改进 D-J 量子算法和七级耦合变换<sup>[11]</sup>等。中国科学技术大学在两量子位的样品上演示了量子博弈<sup>[12]</sup>、量子随机游走

和非绝热几何相移门等。这些研究基本处于国际前列。

2.2 建议

量子计算的研究方向是最终实现一种多量子位可扩展的可靠的计算机。虽然在少数几个量子位时, 从理论原理上已不存在障碍, 但伴随多位扩展过程中出现的多位纠缠与解纠缠理论问题<sup>[13]</sup>及在技术上的复杂性并不与量子位数成简单的线性关系。如何有效和精确地实现对单量子体系量子态的测控, 以及如何由其组成多个量子位的量子逻辑网络, 是问题的关键所在。这也绝对是一个基础性的、多门学科交叉的科学和技术问题, 应组织队伍, 花大气力进行攻关。

基于自旋体系的量子信息处理有很大的发展空间, 多种新的实用方案都与之相关。如可使用核自旋作为量子信息存储器, 而用电子自旋做量子计算, 通过超精细相互作用实现在电子自旋和核自旋之间的信息转换或转移。核自旋同时也是超导量子计算中消相干效应的重要来源之一。今后在这方面应加强研究的内容是: 在固体 NMR 量子计算中演示量子位、单量子位转动、受控非门和简单的量子算法, 实现单个核自旋测量和初始核极化增强及消相干效应和多位纠缠态, 全光 NMR、动态核极化、光学核极化和光探测等。这些研究将液相 NMR 量子计算研究所积累的方法和技术与固体 NMR 量子计算、离子阱、冷原子系统、腔中原子等研究相结合。这些研究将有助于推动我国量子信息科学的发展。

我院在量子信息理论、原子分子物理和波谱学、量子光学、凝聚态物理、数学等研究领域拥有一支学科齐全的队伍, 故对需多学科支持的量子计算的发展具有明显的比较优势。鉴于量子计算研究的基础性和多学科性及其在未来信息产业、国家安全方面的重要性, 建议我院应加强量子信息长期发展的战略部署, 强化支持, 以重大项目凝聚队伍, 保持我院的优势地位, 争取使其不断取得突破性进展。

主要参考文献

1 赵志, 冯芒, 詹明生. 量子算法与量子计算实验. 物理学进展, 2001, 21(2): 183-215.



2 Jones J A. NMR quantum computation. Prog. NMR. Spectrosc, 2001, 38(4): 325-360.

3 Warren W S. The usefulness of NMR quantum computing. Science, 1997, 277(5 332): 1 688-1 690.

4 Berman G P et al. Solid-state quantum computation-a new direction for nanotechnology. Superlattices and Microstructures, 2000, 27(2/3): 89-103.

5 Kane B E. A silicon-based nuclear spin quantum computer. Nature, 1998, 393(6 681): 133-137.

6 Luo J, Zeng X. NMR quantum computation with a hyperpolarized nuclear spin bulk. LANL e-print, 1998, quant-ph/9811044.

7 Fu L P et al. Experimental realization of discrete Fourier transformation on NMR quantum computers. Appl. Magn. Reson., 2000, 19: 153-159.

8 Fang X M et al. Experimental implementation of dense coding using nuclear magnetic resonance. Phys. Rev. A, 2000, 61(2): 022307/1-5.

9 Peng X H et al. Experimental implementation of Hogg's algorithm on a three-quantum-bit NMR quantum computer. Phys. Rev. A, 2002, 65(4), 042315/1-7.

10 Yang X D et al. Modification and realization of Brüschweiler's search. Phys. Rev. A, 2002, 66(4), 042305/1-5.

11 Wei D X et al. NMR experimental realization of seven-qubit D-J algorithm and controlled phase-shift gates with improved precision. Chin. Science Bulletin, 2003, 48(3): 239-243. See also LANL e-print quant-ph/0209002.

12 Du J F et al. Experimental realization of quantum games on a quantum computer. Phys. Rev. Lett., 2002, 88(13): 137902/1-4.

13 Zhao Z et al. Practical Scheme for Entanglement Concentration. Phys. Rev. A, 2001, 64: 014301/1-3; Bi Q et al. Two-qubit quantum computing in a projected subspace. Phys. Rev. A, 2002, 65(4): 042325/1-11; Feng J et al. Probablilistic deletion of copies of linearly independent quantum states. Phys. Rev. A, 2002, 65(5): 052311/1-5; Yu Y F et al. Multioutput programmable quantum processor. Phys. Rev. A, 2002, 66(5): 052310/1-5.

Progress in Experimental Quantum Computations Based on Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy

Luo Jun Zhan Mingsheng

(State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics,  
Wuhan Institute of Physics and Mathematics, CAS, 430071 Wuhan)

This article briefly reviews the progress and future prospects in the experimental realization of quantum information processing based on nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy. Suggestion for organizing efficient research on quantum information inside CAS is also proposed.

**Keywords** nuclear magnetic resonance, quantum computation

罗 军 武汉物理与数学研究所副研究员。1962 年出生于湖北黄陂。1983 年毕业于湖北大学物理系，1988 年 7 月获吉林大学原子分子物理研究所理学硕士学位。发表学术论文 20 余篇。

詹明生 男，武汉物理与数学研究所所长，研究员，博士生导师。1961 年 8 月出生于湖北大冶。1988 年 8 月获博士学位，后在日本国立电气通信大学激光极限技术中心博士后研究 3 年，1995 年入选中国科学院“百人计划”，1996—2002 年与英国帝国理工学院 Blackett 实验室保持合作研究，其中 1997 年度为 EPSRC Senior Fellow。中国科学院知识创新工程方向性项目“冷原子物理”、“量子物理与信息”首席科学家之一。发表学术论文 110 篇，培养博士 10 名，硕士 11 名。