

激光与光电子学进展

量子控制非门核磁共振实现最优脉冲序列

彭永刚*

南京邮电大学理学院应用物理系, 南京 210003

摘要 利用单量子位转动门及量子控制非门的定义, 设计了四种脉冲序列, 这些脉冲序列在逻辑上与量子控制非门核磁共振(NMR)实现是等价的。在射频脉冲作用时间远小于两个自旋核相互作用时间条件下, 在旋转参考系中近似求解核磁共振时的两体含时薛定谔方程, 给出了量子控制非门核磁共振脉冲序列参量的最优取值, 并利用 Suzuki 对称乘积公式, 对含时薛定谔方程进行了数值计算, 通过数值计算模拟演示了量子控制非门的四种序列的性能, 判断了不同脉冲序列的性能优劣。

关键词 量子光学; 量子控制非门; 核磁共振; 脉冲序列性能; 数值计算

中图分类号 O431.2

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202158.0127002

Optimal Pulse Sequence of Quantum Controlled Not-Gates via Nuclear Magnetic Resonance Realization

Peng Yonggang*

Department of Applied Physics, College of Science, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210003, China

Abstract Using the definitions of quantum controlled not-gates and single qubit rotating-gates, we design four kinds of pulse sequences, which are logically equivalent to the nuclear magnetic resonance (NMR) realization of quantum controlled not-gates. Under the condition that the radio frequency pulse duration is much shorter than the interaction time between two nuclear spins, the two-body time-dependent Schrödinger equation with NMR is approximately solved in the rotating reference frame and the optimal NMR pulse sequence parameter value for the quantum controlled not-gate is given. Meanwhile, according to the Suzuki's symmetric product formula, the time-dependent Schrödinger equation is numerically calculated, the performance of these four sequences of quantum controlled not-gates is demonstrated by numerical calculation, and the performance advantages and disadvantages of different pulse sequences are judged.

Key words quantum optics; quantum controlled not-gate; nuclear magnetic resonance; performance of pulse sequence; numerical calculation

OCIS codes 270.5585; 270.5565

1 引言

核磁共振量子算法是一种利用核磁共振技术实现量子算法的方法, 近年来基于核磁共振实现量

子算法的理论和实验研究^[1-6]快速发展, 核磁共振技术成为量子算法物理实现的候选方案之一。量子算法的核磁共振实现是将分子中的原子核自旋作为量子比特, 通过外加均匀磁场和射频脉冲磁场来

收稿日期: 2020-04-27; 修回日期: 2020-06-08; 录用日期: 2020-06-17

* E-mail: pengyg@njupt.edu.cn

产生核磁共振以控制体系量子态的演化,实现不同的量子逻辑门,并将其组合成复杂的量子算法。为了有效地实现量子算法,需要设计射频磁场来驱动核自旋系统以实现期望的量子逻辑门,这是核磁共振量子算法的关键问题,已成为核磁共振量子算法的研究热点问题。2007年,Carlini等^[7]研究了量子算法的最优幺正变换问题;2012年,Boozer^[8]研究了单自旋的能量最优控制解析解的问题。从理论上讲,量子算法实现由一序列基本操作组合(幺正变换的乘积)构成,这些基本操作(幺正变换)通过含时薛定谔方程改变量子系统的状态。从物理上讲,量子算法的核磁共振实现就是把一序列基本操作编译成可在现代超导核磁共振谱仪上直接执行的核磁共振脉冲序列。Barenco等^[9]已证明:任意一个量子算法可以写成两量子位控制非门和单量子位逻辑门的组合运算。因此,研究量子控制非门的核磁共振实现对研究量子算法的核磁共振实现具有重要意义。本文把两个自旋原子核作为量子处理器,利用量子控制非门的定义,设计出四种不同的

脉冲序列,这四种脉冲序列在逻辑上与量子控制非门核磁共振实现是等价的,脉冲序列参量取值参考文献[1]。在文献[1]的实验中,作用在单个自旋原子核上的射频脉冲持续时间远小于两个自旋原子核的相互作用时间,此时两体含时薛定谔方程^[2,10-11]有足够精确的近似解。根据这个足够精确的近似解可给出控制非门脉冲序列的参量最优取值。根据Suzuki乘积公式^[12-14]数值求解了含时薛定谔方程,通过执行一系列基本操作的组合(幺正变换的乘积),模拟演示了量子控制非门核磁共振实现随时间的演化过程,分析了不同脉冲序列的性能优劣,讨论了不同脉冲序列下运算结果的稳定性与正确性。

2 单量子位逻辑门核磁共振实现

¹H、¹³C、¹⁴N和³¹P等原子的核自旋均为1/2,可作为量子比特使用。在一个分子中,如果有两个核自旋为1/2的原子,该分子可作为两量子位处理器^[15]。在外加的均匀磁场和射频磁场中,这个核自旋为1/2的两原子核自旋系统的哈密顿量^[1,15]为

$$H = J_{12}^z S_1^z S_2^z - h_1^z S_1^z - h_2^z S_2^z - \sum_{j=1}^2 \sum_{\alpha=x,y} \bar{h}_j^\alpha \sin(f_j^\alpha t + \varphi_j^\alpha) S_j^\alpha, \quad (1)$$

式中: S_1^z 为核自旋1沿 z 轴方向的自旋算符; S_2^z 为核自旋2沿 z 轴方向的自旋算符; t 为时间; S_j^α 为第 j 核自旋算符; J_{12}^z 为自旋核1和自旋核2相互作用的强度; h_j^z 为作用于第 j 核的沿 z 轴方向的均匀磁场; \bar{h}_j^α 为作用于第 j 核的射频磁场; f_j^α 和 φ_j^α 分别为作用于第 j 核自旋射频磁场的频率和初相位。

对于核自旋为1/2的原子核,其自旋波函数是一个二分量的列旋量,可表示为

$$\begin{cases} |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases}, \quad (2)$$

式中: $|0\rangle$ 表示自旋向上基矢量; $|1\rangle$ 为自旋向下基矢量。

容易推出第 j 核绕 β 轴旋转 φ 角的转动可表示为

$$S_j^\alpha(\varphi, \beta) = \exp(i\varphi S_j^\beta / \hbar) S_j^\alpha \exp(-i\varphi S_j^\beta / \hbar) = S_j^\alpha \cos \varphi + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_j^\gamma \sin \varphi, \quad (3)$$

式中: S_j^β 为第 j 原子核沿 β 方向的自旋算符; \hbar 为约化普朗克常数; $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 为列维-斯维塔记号; S_j^γ 为第 j 原子核沿 γ 方向的自旋算符。

考虑第 j 核自旋受到沿 z 轴的均匀磁场和沿 x 轴的射频磁场的作用,其状态随时间的演化遵守含时薛定谔方程,即

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = -\left(h_j^z S_1^z + \bar{h}_j^x S_j^x \sin \omega t\right) |\Phi(t)\rangle, \quad (4)$$

作变换替换:

$$|\Phi(t)\rangle = \exp(i\omega t S_j^z / \hbar) |\psi(t)\rangle, \quad (5)$$

式中: $\Phi(t)$ 为核自旋系统在 t 时刻的波函数; ω 为射频磁场的圆频率; $\psi(t)$ 为变量替换后核自旋系统在 t 时刻的波函数。

(4)式变为

$$i\hbar \left(\frac{i\omega S_j^z}{\hbar} \right) \exp(i\omega t S_j^z / \hbar) |\psi(t)\rangle + i\hbar \exp(i\omega t S_j^z / \hbar) \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\left(h_j^z S_j^z + \bar{h}_j^x S_j^x \sin \omega t\right) \exp(i\omega t S_j^z / \hbar) |\psi(t)\rangle, \quad (6)$$

由(3)式推出

$$\exp(-i\omega t S_j^z / \hbar) S_j^x \exp(i\omega t S_j^z / \hbar) = S_j^x \cos \omega t + S_j^y \sin \omega t, \quad (7)$$

代入(6)式得到

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -[(h_j^z - \omega)S_j^z + \hbar_j^x S_j^x \sin \omega t \cos \omega t + \hbar_j^y S_j^y \sin \omega t \sin \omega t] |\psi(t)\rangle, \quad (8)$$

核磁共振时 $\omega = h_j^z$, 得到

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\frac{\hbar_j^x}{2} (S_j^x + S_j^y \sin 2h_j^z t - \cos 2h_j^z t) |\psi(t)\rangle, \quad (9)$$

二次谐波项 $\sin 2h_j^z t$ 和 $\cos 2h_j^z t$ 的影响可忽略不计, 因此

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \approx -\frac{\hbar_j^x}{2} S_j^y |\psi(t)\rangle, \quad (10)$$

解出

$$|\psi(t)\rangle \approx \exp(i t \hbar_j^x S_j^y / 2\hbar) |\psi(t=0)\rangle, \quad (11)$$

式中: \hbar_j^x 为作用于第 j 核的沿 z 轴方向的射频磁场。

将(11)式代入(5)式得核自旋波函数为

$$|\Phi(t)\rangle \approx \exp(i t \hbar_j^z S_j^z / \hbar) \exp(i t \hbar_j^x S_j^y / 2\hbar) |\psi(t=0)\rangle, \quad (12)$$

作用在自旋核上的射频脉冲磁场的持续时间由 t 变为 $t + \tau$ 时, 核自旋的波函数为

$$|\Phi(t + \tau)\rangle \approx \exp(i \tau \hbar_j^z S_j^z / \hbar) \exp(i \tau \hbar_j^x S_j^y / 2\hbar) |\Phi(t)\rangle. \quad (13)$$

(13)式表明, 射频脉冲磁场的作用时间为

$$\tau = \frac{\pi}{\hbar_j^x}, \quad (14)$$

时, 第 j 核绕 y 轴顺时针旋转 $\pi/2$ 角度。如果自旋核受到沿 z 轴方向的均匀磁场和沿 y 轴方向的射频磁场的作用, 就会绕 x 轴顺时针转动。由此推出, 自旋核绕 x 和 y 轴顺时针转动 $\pi/2$ 的操作表示为

$$\begin{cases} X = \exp(i\pi S_j^x / 2\hbar) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \\ Y = \exp(i\pi S_j^y / 2\hbar) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \end{cases}, \quad (15)$$

同理可推出第 j 核绕 x 轴和 y 轴逆时针转动 $\pi/2$ 的操作表示为

$$\begin{cases} \bar{X} = \exp(-i\pi S_j^x / 2\hbar) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \\ \bar{Y} = \exp(-i\pi S_j^y / 2\hbar) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{cases}, \quad (16)$$

转动算符 Y_2 作用于 $|\psi\rangle$ 态, 得到

$$Y_2 |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [(a_0 + a_1)|00\rangle + (a_1 - a_0)|01\rangle + (a_2 + a_3)|10\rangle + (a_3 - a_2)|11\rangle], \quad (20)$$

接着相互作用的受控相移门 I_{12} 作用于 $Y_2 |\psi\rangle$, 即

$$I_{12} Y_2 |\psi\rangle = \frac{1}{2} [\exp(i\phi_{00})c_0|00\rangle + \exp(i\phi_{01})c_1|01\rangle + \exp(i\phi_{10})c_2|10\rangle + \exp(i\phi_{11})c_3|11\rangle], \quad (21)$$

式中: X 、 Y 、 \bar{X} 和 \bar{Y} 称为核自旋 1/2 系统的单量子位转动算符。

3 量子控制非门核磁共振实现的不同脉冲序列设计

量子算法中两量子位之间需要某种形式的信息交换, 量子位 1 和量子位 2 之间的信息交换是通过量子位之间的相互作用来实现的, 量子位 1 和量子位 2 之间的受控相移门^[16]为

$$I_{12} = \begin{pmatrix} \exp(i\phi_{00}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(i\phi_{01}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(i\phi_{10}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(i\phi_{11}) \end{pmatrix}, \quad (17)$$

式中: ϕ_{00} 为 $|00\rangle$ 的相位; ϕ_{01} 为 $|01\rangle$ 的相位; ϕ_{10} 为 $|10\rangle$ 的相位; ϕ_{11} 为 $|11\rangle$ 的相位。

用直积方法定义两量子位逻辑门:

$$\begin{cases} X_1 = X \otimes I = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & i \\ i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & i & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ Y_2 = I \otimes Y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \end{cases}, \quad (18)$$

式中: I 为恒等算符; \otimes 为直积符号。

假设两原子核自旋系统的初始状态为

$$|\psi\rangle = a_0|00\rangle + a_1|01\rangle + a_2|10\rangle + a_3|11\rangle, \quad (19)$$

式中: a_0 、 a_1 、 a_2 和 a_3 为概率幅; $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 和 $|11\rangle$ 为基矢量。

式中: $c_0 = a_0 + a_1; c_1 = a_1 - a_0; c_2 = a_2 + a_3; c_3 = a_3 - a_2$ 。最后将 \bar{Y}_2 作用于 $I_{12}Y_2|\psi\rangle$, 即

$$\bar{Y}_2 I_{12} Y_2 |\psi\rangle = \frac{1}{2} \left\{ \left[\exp(i\phi_{00})c_0 - \exp(i\phi_{01})c_1 \right] |00\rangle + \left[\exp(i\phi_{00})c_0 + \exp(i\phi_{01})c_1 \right] |01\rangle + \left[\exp(i\phi_{10})c_2 - \exp(i\phi_{11})c_3 \right] |10\rangle + \left[\exp(i\phi_{10})c_2 + \exp(i\phi_{11})c_3 \right] |11\rangle \right\} \quad (22)$$

由于量子控制非门的作用是当且仅当第一量子位处于态 $|1\rangle$ 时, 才对第二量子位进行反转, 因此要求 $\phi_{00} = \phi_{01}$, (22) 式改写为

$$\bar{Y}_2 I_{12} Y_2 |\psi\rangle = \exp(i\phi_{00}) \left[a_0 |00\rangle + a_1 |01\rangle + \exp(i\beta) (a_2 \cos \eta + ia_3 \sin \eta) |10\rangle + \exp(i\beta) (a_3 \cos \eta + ia_2 \sin \eta) |11\rangle \right] \quad (23)$$

式中: $\beta = \eta + \phi_{11} - \phi_{00}; \eta = (\phi_{10} - \phi_{11})/2; \exp(i\phi_{00})$ 是无关紧要的全局相位因子。

伊辛模型为

$$H = -JS_1^z S_2^z - h_1^z S_1^z - h_2^z S_2^z, \quad (24)$$

式中: J 为自旋核 1 和自旋核 2 相互作用的强度。执行

控制相移门 $I_{12} = \exp(-i\tau H)$, 则 $\phi_{00} = \tau(J/4 + h)$,

$$\phi_{01} = \phi_{10} = -\tau J/4, \phi_{11} = \tau(J/4 - h)。$$

由于 $\phi_{00} = \phi_{01}$, (23) 式改写为

$$\bar{Y}_2 I_{12} Y_2 |\psi\rangle = \exp\left(i\frac{\eta}{2}\right) \left[a_0 |00\rangle + a_1 |01\rangle + \exp(-i\eta) (a_2 \cos \eta + ia_3 \sin \eta) |10\rangle + \exp(-i\eta) (a_3 \cos \eta + ia_2 \sin \eta) |11\rangle \right] \quad (25)$$

将 $\bar{Y}_2 I_{12} Y_2$ 写成矩阵形式:

$$\bar{Y}_2 I_{12} Y_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-i\eta) \cos \eta & \exp(-i\eta) i \sin \eta \\ 0 & 0 & \exp(-i\eta) \sin \eta & \exp(-i\eta) \cos \eta \end{pmatrix} \quad (26)$$

在上述推导中, 要求: $\phi_{00} = \phi_{01} = \phi_{10} = \frac{\eta}{2}, \phi_{11} = -\frac{3}{2}\eta$ 。这时, 令 $\eta = \frac{\pi}{2}$, 则量子控制非门矩阵表示为

$$C_{\text{CNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (27)$$

由 $\phi_{00} = \phi_{01} = \phi_{10} = \frac{\eta}{2}$ 及 $\phi_{01} = \phi_{10} = -\tau J/4$, 可知

$$\tau J = -\pi. \quad (28)$$

τ 表示在没有外界射频磁场作用时, 量子处理器的态在哈密顿量(24)式的支配下随时间演化的时间间隔。

在伊辛模型(24)式中, 两个自旋核受到相同的均匀磁场作用。但实际上两个自旋核受到的是不同均匀磁场的作用, 这个静态磁场为

$$H_{\text{NMR}} = -J_{12}^z S_1^z S_2^z - h_1^z S_1^z - h_2^z S_2^z, \quad (29)$$

上述量子控制非门 $\bar{Y}_2 I_{12} Y_2$ 修改为

$$C_{\text{CNOT}} = \bar{Y}_2 \exp[-i\tau(h_1^z - h)S_1^z] \exp[-i\tau(h_2^z - h)S_2^z] \exp(-i\tau H_{\text{NMR}}) Y_2 = \bar{Y}_2 \exp[-i\tau(h_1^z - h)S_1^z] \exp[-i\tau(h_2^z - h)S_2^z] Y_2 \bar{Y}_2 \exp(-i\tau H_{\text{NMR}}) Y_2 \quad (30)$$

利用 $Y_2 \bar{Y}_2 = I$, (30) 式中的额外相移可以用单量子位操作来表示, 即

$$\begin{cases} \exp[-i\tau(h_1^z - h)S_1^z] = Y_1 X_1' \bar{Y}_1 = \bar{X}_1 Y_1' X_1 \\ \exp[-i\tau(h_2^z - h)S_2^z] = Y_2 X_2' \bar{Y}_2 \end{cases}, \quad (31)$$

式中: Y_1 为自旋核 1 绕 y 轴顺时针转动 $\pi/2$ 的操作; \bar{Y}_1 为自旋核 1 绕 y 轴逆时针转动 $\pi/2$ 的操作; \bar{X}_1 为

自旋核 1 绕 x 逆时针转动 $\pi/2$ 的操作。

(31) 式定义了单量子位转动算符 X_1', Y_1', X_2' 和 Y_2' , 由此可推导出在逻辑上与量子控制非门核磁共振实现等价的四种不同脉冲序列:

$$C_{\text{CNOT}1} = Y_1 X_1' \bar{Y}_1 X_2' \bar{Y}_2 I_{12} Y_2, \quad (32)$$

$$C_{\text{CNOT}2} = Y_1 X_1' X_2' \bar{Y}_1 \bar{Y}_2 I_{12} Y_2, \quad (33)$$

$$C_{\text{CNOT}3} = \bar{X}_1 Y_1' X_2' X_1 \bar{Y}_2 I_{12}' Y_2, \quad (34)$$

$$C_{\text{CNOT}4} = \bar{X}_1 Y_1' X_2' \bar{Y}_2 X_1 I_{12}' Y_2, \quad (35)$$

式中： I_{12}' 是通过系统随时间演化的 $\exp(-i\tau H_{\text{NMR}})$ 来实现的。 $C_{\text{CNOT}2}$ 序列与 $C_{\text{CNOT}1}$ 序列的不同在于只是 $\bar{Y}_1 X_2'$ 交换顺序变为 $X_2' \bar{Y}_1$ ， $C_{\text{CNOT}4}$ 序列与 $C_{\text{CNOT}3}$ 序列的不同在于只是 $X_1 \bar{Y}_2$ 交换顺序变为 $\bar{Y}_2 X_1$ 。

4 量子控制非门核磁共振脉冲序列参量的设定

对于上述四个不同脉冲序列的操作时间 τ 以及 J, h 等参数, 为了使参量取值有实验依据, 参考 Chuang 等^[1] 实验工作中参数 h_1^z, h_2^z 和 J_{12}^z 的取值:

$$\begin{cases} h_1^z/2\pi \approx 500 \text{ MHz} \\ h_2^z/2\pi \approx 125 \text{ MHz} \\ J_{12}^z/2\pi \approx -215 \text{ MHz} \end{cases}, \quad (36)$$

将上述 h_1^z, h_2^z 和 J_{12}^z 参数重新标度为

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = -[h_1^z S_1^z + h_2^z S_2^z + \bar{h}_1^x (S_1^x \sin \omega t + S_1^y \cos \omega t) + \bar{h}_2^x (S_2^x \sin \omega t + S_2^y \cos \omega t)] |\Phi(t)\rangle. \quad (38)$$

采用自然单位, 令 $\hbar=1$ 。这时两个自旋核处于一个均匀磁场和一个随时间变化的射频磁场中。在随动参考

系^[10]下, 作变换 $|\Phi(t)\rangle = \exp[i\omega t (S_1^z + S_2^z)] |\psi(t)\rangle$, 代入(38)式, 并利用(3)式化简(38)式得

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -[(h_1^z - \omega) S_1^z + (h_2^z - \omega) S_2^z + \bar{h}_1^x S_1^y + \bar{h}_2^x S_2^y] |\psi(t)\rangle. \quad (39)$$

自旋核 1 与射频磁场发生共振时, 有

$$\omega = h_1^z, \quad (40)$$

这时(39)式的解为

$$|\Phi(t)\rangle = \exp[i\bar{h}_1^x (S_1^z + S_2^z)] \exp(i\bar{h}_1^x S_1^y) \exp(i\bar{h}_2^x S_2^y) |\Phi(0)\rangle, \quad (41)$$

式中： $V_{12} = (0, \bar{h}_2^x, h_2^z - h_1^z)$ 。(41) 式中第三项 $\exp(i\bar{h}_2^x S_2^y)$ 会使自旋原子核 2 绕矢量 V_{12} 的方向转动, 第三项可表示为

$$\exp(i\bar{h}_2^x S_2^y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos \frac{t |V_{12}|}{2} + |V_{12}|^{-1} \begin{pmatrix} h_2^z - h_1^z & -i\bar{h}_2^x \\ i\bar{h}_2^x & h_1^z - h_2^z \end{pmatrix}. \quad (42)$$

(42)式表明, 为了不改变自旋原子核 2 的状态, 射频脉冲磁场的持续时间 t_1 要满足

$$t_1 |V_{12}| = t_1 \sqrt{(h_1^z - h_2^z)^2 + (\bar{h}_2^x)^2} = 4\pi n_1, \quad (43)$$

式中： n_1 是整数。(41)式中的第二项会使自旋原子核 1 绕 y 轴转动, 若使其转动 $\frac{\pi}{2}$, 则

$$t_1 \bar{h}_1^x = \frac{\pi}{2}. \quad (44)$$

$$\begin{cases} J_{12}^z = -0.43 \times 10^{-6} \text{ MHz} \\ h_1^z = 1 \text{ MHz} \\ h_2^z = 1/4 \text{ MHz} \\ \gamma = h_2^z/h_1^z = 1/4 \end{cases}. \quad (37)$$

当原子自旋绕 y 轴旋转 $\pi/2$ 角度时, 射频脉冲磁场的持续作用时间需满足 $\tau = \frac{\pi}{h_1^x}$ 。然而, 理论上完美的一个和两个量子位操作与其物理实现的操作之间是有差异的, 当操控某一量子位时, 其他量子位的状态也会发生改变, 因此如果要精确确定射频脉冲磁场的持续时间, 就必须求解两体含时薛定谔方程。本文参数取值采用 Chuang 等^[1] 实验工作中参数 h_1^z, h_2^z 和 J_{12}^z 的数值, 其中射频脉冲作用的持续时间远小于 $1/J$, 原子核自旋在射频脉冲作用下随着时间演化, 自旋核之间的相互作用强度对其的影响可以忽略, 则这时两体含时薛定谔方程为

当原子自旋绕 y 轴旋转 $\pi/2$ 角度时, 射频脉冲磁场的持续作用时间需满足 $\tau = \frac{\pi}{h_1^x}$ 。然而, 理论上完美的一个和两个量子位操作与其物理实现的操作之间是有差异的, 当操控某一量子位时, 其他量子位的状态也会发生改变, 因此如果要精确确定射频脉冲磁场的持续时间, 就必须求解两体含时薛定谔方程。本文参数取值采用 Chuang 等^[1] 实验工作中参数 h_1^z, h_2^z 和 J_{12}^z 的数值, 其中射频脉冲作用的持续时间远小于 $1/J$, 原子核自旋在射频脉冲作用下随着时间演化, 自旋核之间的相互作用强度对其的影响可以忽略, 则这时两体含时薛定谔方程为

(41)式中的第一项会使核自旋产生一个相位改变, 要消除这个相位改变对核自旋状态的影响, 要求

$$t_1 \bar{h}_1^x = 4\pi k_1, \quad (45)$$

式中： k_1 是正整数。脉冲参数的最后一个限制来自文献[1]的参量取值, 即

$$\begin{cases} h_2^z = \gamma h_1^z \\ \bar{h}_2^x = \gamma \bar{h}_1^x \\ \alpha = x, y, z \end{cases}, \quad (46)$$

式中： γ 为比例系数, 且 $0 < \gamma < 1$ 。联立条件(43) ~ (46)式, 得出

$$(1 - \gamma)^2 k_1^2 + \frac{\gamma^2}{4} = n_1^2. \quad (47)$$

同理, 可推导出自旋核 2 绕 y 轴转动 $\pi/2$, 但又不会改变自旋核 1 的状态的条件为

$$(1 - \gamma)^2 k_2^2 + \frac{1}{4^3 \gamma^2} = n_2^2, \quad (48)$$

式中: k_2, n_2 是正整数。(47)式和(48)式无法精确求解,但如果 k_1, k_2 很大, γ 为有理数,即 $\gamma = N/M, 0 < N < M$ (N 和 M 为正整数),且满足 $2kN(M - N) \gg 1$,那么 $k_1 = kMN^2$ 和 $k_2 = kNM^2$ 将使(47)式和(48)式具有足够精确的近似解。这时相关参量关系式为

$$\begin{cases} \frac{t_1 h_1^z}{2\pi} = 2kMN^2 \\ \frac{\bar{h}_1^x}{h_1^z} = \frac{1}{8kMN^2} \\ \frac{t_2 h_1^z}{2\pi} = 2kM^3 \\ \frac{\bar{h}_2^x}{h_1^z} = \frac{1}{8kM^3} \end{cases}. \quad (49)$$

表 1 $k = 1$ 时不同操作下量子控制非门脉冲序列的参数 J, h 和 f

Table 1 Parameters J, h and f of pulse sequence of quantum controlled not-gate under different operation when $k = 1$

Parameter	Y_1	X'_1	\bar{Y}_1	X'_2	\bar{Y}_2	I'_{12}	Y_2
J_{12}^z	-4.3×10^{-7}	-4.3×10^{-7}	-4.3×10^{-7}	-4.3×10^{-7}	-4.3×10^{-7}	-4.3×10^{-7}	-4.3×10^{-7}
h_1^z	1	1	1	1	1	1	1
h_2^z	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
\bar{h}_1^x	3.125×10^{-2}	5.596×10^{-2}	-3.125×10^{-2}	4.451×10^{-2}	-7.812×10^{-3}	0	7.812×10^{-3}
\bar{h}_2^x	7.812×10^{-3}	1.399×10^{-2}	-7.813×10^{-3}	1.113×10^{-2}	-1.953×10^{-3}	0	1.953×10^{-3}
f_1^x	1.00	1.00	1.00	0.25	0.25	0	0.25
f_2^x	1.00	1.00	1.00	0.25	0.25	0	0.25
\bar{h}_1^y	3.125×10^{-2}	5.595×10^{-2}	-3.125×10^{-2}	4.451×10^{-2}	-7.812×10^{-3}	0	7.812×10^{-3}
\bar{h}_2^y	7.812×10^{-3}	1.398×10^{-2}	-7.812×10^{-3}	1.112×10^{-2}	-1.953×10^{-3}	0	1.953×10^{-3}
f_1^y	1.00	1.00	1.00	0.25	0.25	0	0.25
f_2^y	1.00	1.00	1.00	0.25	0.25	0	0.25

表 2 $k = 1$ 时不同操作下核磁共振脉冲序列的参数
执行时间

Table 2 Parameter execution time of NMR pulse sequence under different operation when $k = 1$ unit: 4π ns

Operation	Y_1	X'_1	\bar{Y}_1	X'_2	\bar{Y}_2	I'_{12}	Y_2
Value	8.00	8.00	8.00	128.00	128	1.16×10^6	128.00

5 数值计算结果及不同脉冲序列的性能分析

5.1 数值求解含时薛定谔方程的方法

为了分析上述不同脉冲序列性能的优劣、运算的稳定性以及输出结果的正确性,利用含时薛定谔方程进行数值计算。两原子核自旋体系随时间的演化遵守含时薛定谔方程(采用自然单位,即 $\hbar = 1$),即

(28)、(31)和(49)式是量子控制非门脉冲序列参量取值的关系式,自旋原子核 1 和自旋原子核 2 绕 x 轴转动 $\pi/2$ 的脉冲序列参量取值也有同样的关系式。在(49)式中,取 $k = 1, M = 4, N = 1$,再利用(31)式,可计算出射频脉冲序列的操作时间 τ 以及 $J, h_i^z, \bar{h}_i^x, \bar{h}_i^y$ 等参数,结果如表 1 所示,其中各参量的单位为 $\pi \times 10^9$ Hz。在(49)式中,取 $k = 1, M = 4, N = 1$,再利用(28)式计算出实现量子控制非门核磁共振脉冲序列量子逻辑门及控制相移门 $Y_1 X'_1 \bar{Y}_1 X'_2 \bar{Y}_2 I'_{12} Y_2$ 的执行时间 τ ,得到的执行时间参量如表 2 所示,其中执行时间单位为 4π ns。当 $k = 2, 4, 8, 32$ 时,射频脉冲序列的操作时间 τ 以及 $J, h_i^z, \bar{h}_i^x, \bar{h}_i^y$ 等参数不予赘述。

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = H(t) |\Phi(t)\rangle, \quad (50)$$

式中: $|\Phi(t)\rangle$ 为两原子核自旋体系在时刻 t 的波函数; $H(t)$ 为受到均匀磁场和射频磁场作用的两原子体系的哈密顿量。

定义

$$Q_j = Q_j^z = \frac{1}{2} - \langle \Phi(t) | S_j^z | \Phi(t) \rangle, \quad (51)$$

式中: Q_j^z 是一个与自旋核 1 和自旋核 2 的核自旋 z 分量期望值有关的量。

含时薛定谔方程(50)式的数值求解是通过么正变换 $U(t + \tau, t) \equiv \exp_+ \left[-i \int_t^{t+\tau} H(u) du \right]$ 确定的, \exp_+ 表示时序指数函数^[10,12-13]。从理论上说,量子算法是由一系列基本操作组成的,即为么正变换的乘

积, 每一个基本操作将输入状态 $|\psi(t)\rangle$ 改变为输出状态 $|\psi(t+\tau)\rangle$, 利用半群性质 $U(t_1+t_2)=U(t_1)U(t_2)$,

可以写出 $U(\tau)=U(\delta)^m$, 其中, $\tau=m\delta$, 且 $m \geq 1$, τ 为执行时间, δ 为时间步长, m 为时间步数, 即

$$U(t+\tau, t)=U[t+m\delta, t+(m-1)\delta] \otimes \dots \otimes U(t+\delta, t). \quad (52)$$

用 Suzuki 对称乘积公式^[12-13]取代每个 $U[t(n+1)\delta, t+n\delta]$, 有

$$U(\delta) \approx \bar{U}(\delta) = \exp(-i\delta H_z/2) \exp(-i\delta H_y/2) \exp(-i\delta H_x) \exp(-i\delta H_y/2) \exp(-i\delta H_z/2), \quad (53)$$

$$\bar{U}[t+(n+1)\delta, t+n\delta] = \exp\{-i\delta H_z[t+(n+1/2)\delta]/2\} \exp\{-i\delta H_y[t+(n+1/2)\delta]/2\} \otimes \exp\{-i\delta H_x[t+(n+1/2)\delta]\} \exp\{-i\delta H_y[t+(n+1/2)\delta]/2\} \exp\{-i\delta H_z[t+(n+1/2)\delta]/2\}, \quad (54)$$

$$H_\alpha(t) = \sum_{j,k=1}^L J_{jk}^z S_j^\alpha S_k^\alpha - \sum_{j,k=1}^L [h_j^\alpha + \bar{h}_j^\alpha \sin(f_j^\alpha t + \varphi_j^\alpha)] S_j^\alpha, \quad \alpha = x, y, z. \quad (55)$$

在特定的射频脉冲持续过程中, 参量 J, h 和 \bar{h} 可看成是恒定的。在上述构造中, $\bar{U}(\delta)$ 是么正的, 含时薛定谔方程的数值求解算法是无条件稳定^[12-13]的, 由于 $|U(\delta) - \bar{U}(\delta)| \leq c\delta^3$, 因此在二阶时间步长 δ 内, 数值求解结果是足够精确的, 与含时薛定谔方程的精确解没有区别。

5.2 数值计算结果及不同脉冲序列的性能分析

在参数设定规则(49)式中, 令 $k=1$ 时, 构造量子控制非门的单量子位量子逻辑门及控制相移门 $Y_1 X_1' \bar{Y}_1 X_2' \bar{Y}_2 I_{12}' Y_2$ 的执行时间 τ 、时间步长 δ 和时间步数 m 如表 3 所示。当 $k=2, 4, 8, 32$ 时, 单量子位量子逻辑门及控制相移门的时间参量不予赘述。

表 3 $k=1$ 时不同操作下核磁共振脉冲序列的执行时间、时间步长和执行步数

Table 3 Execution time, time step and number of execution steps of NMR pulse sequence under different operation when $k=1$
unit: 4π ns

Parameter	Y_1	X_1'	\bar{Y}_1	X_2'	\bar{Y}_2	I_{12}'	Y_2
τ	8	8	8	128	128	1.162×10^6	128
δ	8.00×10^{-2}	8.00×10^{-2}	8.00×10^{-2}	1.28	1.28	1.162×10^6	1.28
m	100	100	100	100	100	1	100

用上述数值求解含时薛定谔方程的方法执行计算得到, 当 $k=1$ 和 $k=32$ 时, 量子控制非门四种不同核磁共振脉冲序列 $C_{\text{CNOT}1}$ 、 $C_{\text{CNOT}2}$ 、 $C_{\text{CNOT}3}$ 和 $C_{\text{CNOT}4}$ 作用于 $|11\rangle$ 后, Q_1 和 Q_2 随时间的演化如图 1~8 所示。当 $k=1, 2, 4, 8, 32$ 时, $C_{\text{CNOT}1}$ 、 $C_{\text{CNOT}2}$ 、 $C_{\text{CNOT}3}$ 和 $C_{\text{CNOT}4}$ 作用于 $|11\rangle$ 后, 运行结果的数值 Q_1 和 Q_2 如表 4 所示。

在图 1~8 中, 执行受控相移门 I_{12}' 的时间步数是 1, 执行每一个单量子位转动门操作的时间步数是 100。

由图 1~8 和表 4 可知, C_{CNOT} 作用于 $|11\rangle$ 后, 原子 2 的核自旋状态由 $|1\rangle$ 态变为 $|0\rangle$ 时, 原子 1 的核自旋状态仍为 $|1\rangle$ 。在图 1 中, $C_{\text{CNOT}1} = Y_1 X_1' \bar{Y}_1 X_2' \bar{Y}_2 I_{12}' Y_2$ 。当 $0 < m < 300$ 时, $C_{\text{CNOT}1}$ 作用在原子 2 的核自旋上, 在发生核磁共振时, 核自旋方向可以自由变化, 原子 2 的核自旋方向朝上朝下翻转几次, 原子 2 的状态由 $|1\rangle$ 变为 $|0\rangle$, 原子 1 的核自旋不受影响, 保持 $|1\rangle$ 状态不变; 当 $m=300$ 时, 原子 1

的核自旋平稳地随时间步数演化到状态 $|1\rangle$, 不会影响原子 2 的核自旋状态。 $C_{\text{CNOT}1}$ 操控原子 1 的核自旋和原子 2 的核自旋时, 核自旋互不干扰, 且当 $k \leq 32$ 时, 演化过程是一样的, 运算过程的稳定性和和

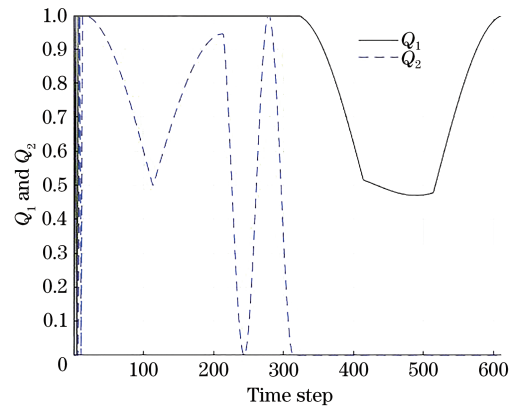


图 1 $k=1$, 执行 $C_{\text{CNOT}1}|11\rangle$ 运算时 Q_1 和 Q_2 随时间步数的演化

Fig. 1 Q_1 and Q_2 versus time step obtained by executing $C_{\text{CNOT}1}|11\rangle$ when $k=1$

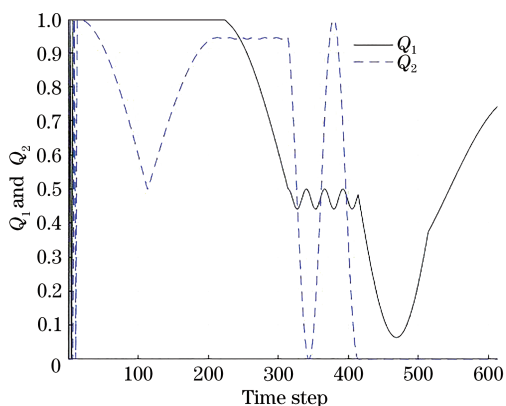


图 2 $k=1$, 执行 $C_{\text{CNOT}_2}|11\rangle$ 运算时, Q_1 和 Q_2 随时间步数的演化

Fig. 2 Q_1 and Q_2 versus time step obtained by executing $C_{\text{CNOT}_2}|11\rangle$ when $k=1$

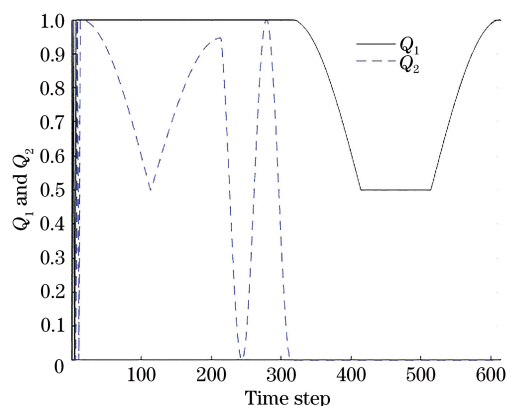


图 5 $k=32$, 执行 $C_{\text{CNOT}_1}|11\rangle$ 运算时 Q_1 和 Q_2 随时间步数的演化

Fig. 5 Q_1 and Q_2 versus time step obtained by executing $C_{\text{CNOT}_1}|11\rangle$ when $k=32$

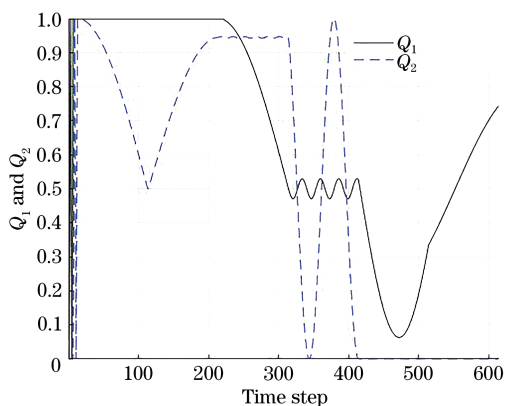


图 3 $k=1$, 执行 $C_{\text{CNOT}_3}|11\rangle$ 运算时 Q_1 和 Q_2 随时间步数的演化

Fig. 3 Q_1 and Q_2 versus time step obtained by executing $C_{\text{CNOT}_3}|11\rangle$ when $k=1$

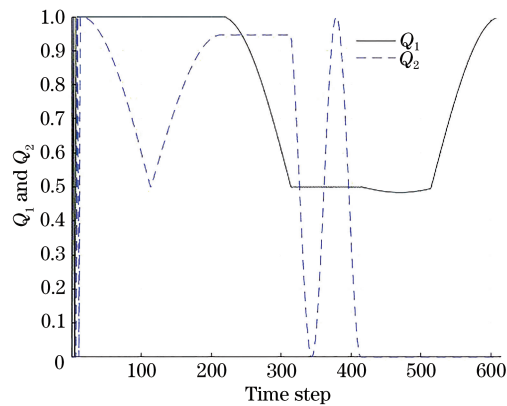


图 6 $k=32$, 执行 $C_{\text{CNOT}_2}|11\rangle$ 运算时 Q_1 和 Q_2 随时间步数的演化

Fig. 6 Q_1 and Q_2 versus time step obtained by executing $C_{\text{CNOT}_2}|11\rangle$ when $k=32$

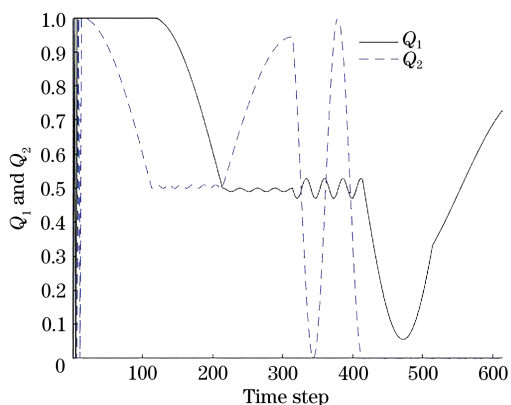


图 4 $k=1$, 执行 $C_{\text{CNOT}_4}|11\rangle$ 运算时 Q_1 和 Q_2 随时间步数的演化

Fig. 4 Q_1 and Q_2 versus time step obtained by executing $C_{\text{CNOT}_4}|11\rangle$ when $k=1$

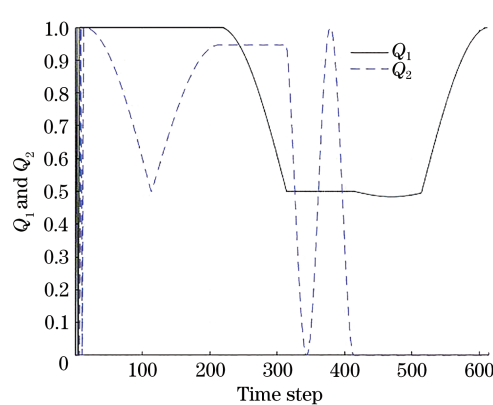


图 7 $k=32$, 执行 $C_{\text{CNOT}_3}|11\rangle$ 运算时 Q_1 和 Q_2 随时间步数的演化

Fig. 7 Q_1 and Q_2 versus time step obtained by executing $C_{\text{CNOT}_3}|11\rangle$ when $k=32$

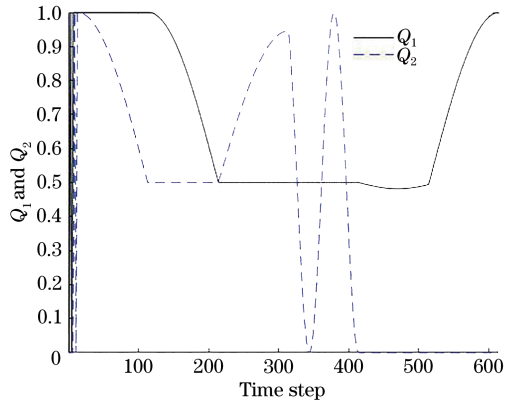


图 8 $k=32$, 执行 $C_{\text{CNOT}_4}|11\rangle$ 运算时 Q_1 和 Q_2 随时间步数的演化

Fig. 8 Q_1 and Q_2 versus time step obtained by executing $C_{\text{CNOT}_4}|11\rangle$ when $k=32$

行结果的正确性均最优。在图 2 中, $C_{\text{CNOT}_2} = Y_1 X_1 X_2' \bar{Y}_1 \bar{Y}_2 I_{12} Y_2$ 。当 $0 < m < 200$ 时, C_{CNOT_2} 操控原子 2 的核自旋, 但不影响原子 1 的核自旋, 当 $200 \leq m < 300$ 时, C_{CNOT_2} 操控原子 1 的核自旋, 原子 2 的核自旋状态基本不变; 当 $m < 300$ 时, 在 $k \leq$

32 的条件下, 系统随时间步数的演化过程是一样的; 当 $300 \leq m < 400$ 时, C_{CNOT_2} 操控原子 2 的核自旋, 在 $k < 32$ 的条件下, 原子 2 的核自旋方向朝上朝下翻转几次, 状态变为 $|0\rangle$, 同时引起原子 1 的核自旋方向反复振荡; 当 $400 \leq m < 600$ 时, C_{CNOT_2} 操控原子 1 的核自旋, 原子 1 的核自旋状态随时间步数演化, 但不能给出正确结果, 原子 2 的核自旋保持 $|0\rangle$ 状态不变; 在 $k=32$ 的条件下, 当 $200 \leq m < 300$ 时, C_{CNOT_2} 操控原子 1 的核自旋, 原子 1 的核自旋状态随时间步数演化, 原子 2 的核自旋状态不变; 当 $300 \leq m < 400$ 时, C_{CNOT_2} 操控原子 2 的核自旋, 原子 2 的核自旋方向朝上朝下翻转几次, 核自旋随时间步数演化到 $|0\rangle$ 状态, 原子 1 的核自旋状态不变; 当 $400 \leq m < 600$ 时, C_{CNOT_2} 操控原子 1 的核自旋, 原子 1 的核自旋状态随时间步数演化到状态 $|1\rangle$, 原子 2 的核自旋状态 $|0\rangle$ 保持不变。由图 3 和图 4 可以看出, 对于 C_{CNOT_2} 、 C_{CNOT_3} 和 C_{CNOT_4} , 脉冲序列运行过程的稳定性和运行结果的正确性均较差, 而 C_{CNOT_1} 在这两方面的性能最优。

表 4 $k=1, 2, 8, 32$ 时四个不同操作下的 Q_1 和 Q_2 的期望值

Table 4 Expectation values of Q_1 and Q_2 under four different operation when $k=1, 2, 4, 8, 32$

Operation	$k=1$		$k=2$		$k=4$		$k=8$		$k=32$	
	Q_1	Q_2	Q_1	Q_2	Q_1	Q_2	Q_1	Q_2	Q_1	Q_2
$C_{\text{CNOT}_1} 11\rangle$	0.999	0	1.000	0	1.000	0	1.000	0	1.000	0
$C_{\text{CNOT}_2} 11\rangle$	0.745	0	0.931	0	0.982	0	0.996	0	1.000	0
$C_{\text{CNOT}_3} 11\rangle$	0.744	0	0.931	0	0.982	0	0.996	0	1.000	0
$C_{\text{CNOT}_4} 11\rangle$	0.729	0	0.927	0	0.981	0	0.995	0	1.000	0

在理想的量子处理器上, 控制非门是由一系列基本操作的乘积构成的, 基本操作的顺序对计算结果没有影响, 即不同么正变换是对易的。但核磁共振实现的控制非门的运算结果与量子控制非门脉冲序列的顺序有关, 基本操作顺序不同, 运算结果不同, 即 $X_1 X_2 \neq X_2 X_1$, 基本操作不对易。 C_{CNOT_2} 只是将 C_{CNOT_1} 中的 $Y_1 X_2'$ 交换顺序变为 $X_2' \bar{Y}_1$, C_{CNOT_4} 只是将 C_{CNOT_3} 中的 $X_1 \bar{Y}_2$ 交换顺序变为 $\bar{Y}_2 X_1$, 这表明核磁共振实现脉冲序列顺序对运算结果有影响。当 $k < 32$ 时, 量子控制非门 C_{CNOT_2} 、 C_{CNOT_3} 和 C_{CNOT_4} 的运算结果出错, 这些基本操作不是么正变换, 当 $k=32$ 时四种不同序列都得到准确值, 这表明脉冲序列的参量优化取值可以消除不同脉冲序列操作顺序对物理实现结果正确性的影响, 同时说明 C_{CNOT_1} 中的每一个基本操作都是理想么正变换。

上述分析表明: 在量子控制非门 C_{CNOT_2} 、 C_{CNOT_3} 和 C_{CNOT_4} 中, 有些基本操作作用于原子 2 的核自旋时, 会对原子 1 的核自旋状态产生影响。产生影响的原因之一是这些基本操作会产生相位误差, 相位误差会累积, 当累积的相位误差不是 2π 的整数倍时, 运算结果就会出错, 当 $k < 32$ 时, C_{CNOT_2} 、 C_{CNOT_3} 和 C_{CNOT_4} 在运行过程中累积的相位误差会造成运行结果出错, 当 $k=32$ 时这三种不同脉冲序列都得到准确值。这表明脉冲序列的参量优化取值可以消除不同脉冲序列对物理实现运行结果的影响, 当累积的相位误差是 2π 的整数倍时, 运行结果就不会出错。

6 结 论

在核磁共振条件下, 利用求解单体含时薛定谔方程, 推导出核自旋单量子位转动门, 再利用两量

子位受控相移门,根据尹辛模型,从量子控制非门的定义出发,设计出量子控制非门理想的核磁共振实现脉冲序列 $\bar{Y}_2 I_{12} Y_2$ 。考虑到两个自旋核会受到不同的均匀磁场作用,对脉冲序列进行修正,通过添加附加的单量子位转动门,设计出在逻辑上与量子控制非门的核磁共振实现等价的四种不同脉冲序列。此方法可用于设计其他量子逻辑门及量子算法的核磁共振实现。通过求解两体含时薛定谔方程,得到足够精确的近似解,通过优化脉冲参量的取值,使得性能不同的脉冲序列在给定条件下给出正确结果,只是运算的稳定性不同。对于不同脉冲序列,目前没有一般的理论规则来预先判断脉冲序列的性能优劣,唯一方法是数值求解量子系统的含时薛定谔方程,对脉冲序列执行数值计算,模拟演示脉冲序列的运行过程与运行结果;利用不同脉冲序列执行数值运算时,根据运算过程的稳定性及运算结果的正确性来判断脉冲序列性能的优劣。此方法可用于判断其他量子逻辑门及量子算法核磁共振实现的脉冲序列性能、运算的稳定性及运算结果的正确性。

参 考 文 献

- [1] Chuang I L, Gershenfeld N, Kubinec M. Experimental implementation of fast quantum searching [J]. *Physical Review Letters*, 1998, 80 (15): 3408-3411.
- [2] Zeng P, Zhou Y, Liu Z H. Quantum gate verification and its application in property testing [J]. *Physical Review Research*, 2020, 2(2): 023306.
- [3] Long G L, Xiao L. Experimental realization of a fetching algorithm in a 7-qubit NMR spin Liouville space computer [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2003, 119(16): 8473-8481.
- [4] Wang G Y, Guo Y N. Protection of quantum coherence of qubit based on quantum feedback [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2018, 55(10): 102702.
王国友, 郭有能. 基于量子反馈保护量子比特的相干性[J]. *激光与光电子学进展*, 2018, 55(10): 102702.
- [5] Lu F. Controllable quantum entanglement based on cavity structure [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(4): 042701.
陆繁. 基于腔结构的可控量子纠缠[J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(4): 042701.
- [6] Jie L. Preparing Bell state by using dissipative process in directly coupled cavities [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(24): 242703.
林杰. 直接耦合腔中通过耗散通道制备 Bell 态[J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(24): 242703.
- [7] Carlini A, Hosoya A, Koike T, et al. Time-optimal unitary operations [J]. *Physical Review A*, 2007, 75 (4): 042308.
- [8] Boozer A D. Time-optimal synthesis of SU (2) transformations for a spin-1/2 system [J]. *Physical Review A*, 2012, 85: 012317.
- [9] Barenco A, Bennett C H, Cleve R, et al. Elementary gates for quantum computation [J]. *Physical Review A*, 1995, 52(5): 3457-3467.
- [10] Slichter C P. Principles of magnetic resonance [M]. Heidelberg: Springer, 1990.
- [11] Peng Y G. Application of time-dependent Schrödinger equation to the design of quantum search algorithm [J]. *College Physics*, 2018, 37(9): 17-24.
彭永刚. 含时薛定谔方程求解在量子搜索算法设计中的应用[J]. *大学物理*, 2018, 37(9): 17-24.
- [12] de Raedt H. Product formula algorithms for solving the time dependent Schrödinger equation [J]. *Computer Physics Reports*, 1987, 7(1): 1-72.
- [13] Suzuki M. General decomposition theory of ordered exponentials [J]. *Proceedings of the Japan Academy Ser B: Physical and Biological Sciences*, 1993, 69 (7): 161-166.
- [14] Peng Y G. NMR pulse sequence parameters design of grover quantum algorithm [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2010, 39(10): 1806-1810.
彭永刚. 两量子位 Grover 量子算法 NMR 脉冲序列参量的研究[J]. *光子学报*, 2010, 39(10): 1806-1810.
- [15] Hiroyyuki S, Nobuaki Y. Quantum information theory [M]. Song H S, Song T, Transl. Dalian: Dalian University of Technology Press, 2007: 144-157.
佐川弘幸, 吉田宣章. 量子信息论 [M]. 宋鹤山, 宋天, 译. 大连: 大连理工大学出版社, 2007: 144-157.
- [16] Vandersypen L M K, Chuang I L. NMR techniques for quantum control and computation [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2005, 76(4): 1037-1069.