

## 量子 Toffoli 门的核磁共振物理实现

彭永刚\*

南京邮电大学理学院应用物理系, 江苏 南京 210003

**摘要** 利用三量子位 Toffoli 门等价于两个两量子位控制非门和三个两量子位控制相移门的组合, 将每一个控制非门和控制相移门分别用核磁共振脉冲序列及两核自旋系统随时间自由演化算符的组合构成, 依据控制非门和控制相移门作用于核自旋系统的顺序, 构成量子 Toffoli 门的核磁共振物理实现, 用 Suzuki 公式数值求解了含时薛定谔方程, 验证了量子 Toffoli 门的核磁共振实现的正确性和可行性。

**关键词** 量子光学; 量子 Toffoli 门; Suzuki 乘积公式; 核磁共振; 自由演化算符

中图分类号 O431.2 文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP220821

## Nuclear-Magnetic-Resonance-Based Physical Realization of Quantum Toffoli Gate

Peng Yonggang\*

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

**Abstract** The three-qubit Toffoli gate is equivalent to the combination of two two-qubit controlled NOT gates and three two-qubit controlled phase-shift gates. The controlled NOT and phase-shift gates respectively comprise a combination of nuclear-magnetic-resonance pulse sequences and a free development operator of two nuclear spins with time. According to the order in which the controlled NOT and phase-shift gates act on the nuclear spin system, the nuclear-magnetic-resonance-based physical realization of a quantum Toffoli gate is achieved. The time-dependent Schrödinger equation is numerically solved by the Suzuki formula to confirm the correctness and feasibility of the realization of the quantum Toffoli gate based on nuclear magnetic resonance.

**Key words** quantum optics; quantum Toffoli gate; Suzuki product formula; nuclear-magnetic resonance; free development operator

## 1 引言

与经典计算机类似, 量子计算机也有通用逻辑门组, 即任何幺正变换都可被分解成由这些通用逻辑门所构成的一个序列。历史上对量子计算通用逻辑门组的研究与经典可逆计算有关。由于 Toffoli 门对经典可逆计算是通用的, 1989 年, Deutsch 等<sup>[1-2]</sup>将经典 Toffoli 门推广到量子情况, 得到 Deutsch 门, 但是 Deutsch 门是三量子位门, 需要三个量子位的相互作用, 物理实现比较困难。1995 年, DiVincenzo<sup>[3]</sup>利用李群对易子代数, 证明 Deutsch 门可以用两量子位逻辑门组实现。之后, Barenco 等<sup>[4]</sup>又证明: 量子通用逻辑门组可以仅由单量子位逻辑门和两量子位逻辑门构

成。2007 年, Ralph 等<sup>[5]</sup>提出量子 Toffoli 门可分解为两个单量子位非门、一个相移门和两个控制非门构成, 并用光信息处理方法实现了这种分解的量子 Toffoli 门。2009 年, Kim 等<sup>[6]</sup>提出用离子阱实现量子 Toffoli 门。2013 年, Jones<sup>[7]</sup>提出一种低过热结构的量子 Toffoli 门, 同年郑仕标等<sup>[8]</sup>提出利用单一不对称海森堡 XY 相互作用实现 Toffoli 门。Ghosh 等<sup>[9]</sup>开发了一种量子控制三最近邻耦合超导系统单激发量子 Toffoli 门的构造方法。2021 年, Ru 等<sup>[10]</sup>提出用单光子实现确定性量子 Toffoli 门。2021 年, 王洁琼等<sup>[11]</sup>提出利用奇偶校验门作为关键器件实现量子 Toffoli 门。本文将量子 Toffoli 门分解为两个两量子位的控制非门和三个两量子位控制相移门, 将控制非门和控制相移门分

收稿日期: 2022-02-28; 修回日期: 2022-03-21; 录用日期: 2022-03-29; 网络首发日期: 2022-04-08

通信作者: \*pengyg@njyupt.edu.cn

别化为核磁共振(NMR)脉冲序列及随时间自由演化的算符,再将它们组合,构成量子 Toffoli 门的 NMR 脉冲序列的物理实现,用 Suzuki 乘积公式<sup>[12-15]</sup>数值求解含时薛定谔方程,验证量子 Toffoli 门的 NMR 脉冲序列设计的正确性和可行性。

## 2 量子 Toffoli 门的 NMR 物理实现

### 2.1 三量子位核自旋系统的哈密顿量

一个三氯乙烯( $C_2HCl_3$ )分子中,含有一个氢原子 $^1H$ 和两个碳原子 $^{13}C$ ,其核自旋均为 $1/2$ ,两个碳原子作为第一和第三个量子位,氢原子作为第二个量子位,构成一个三量子位核自旋系统,假设对三核自旋系统是在温度为 $0$ ,且不讨论系统与环境相互作用的条件下,执行量子基本逻辑门操作,在均匀磁场和外加射频正旋磁场中,这个核自旋 $1/2$ 三量子位系统的哈密顿量<sup>[15-16]</sup>表示为

$$H = -J_{123}^z S_1^z S_2^z S_3^z - J_{12}^z S_1^z S_2^z - J_{13}^z S_1^z S_3^z - J_{23}^z S_2^z S_3^z - h_1^z S_1^z - h_2^z S_2^z - h_3^z S_3^z - \sum_{j=1}^3 \sum_{\alpha=x,y} \tilde{h}_j^\alpha \sin(2\pi f_j^\alpha t + \varphi_j^\alpha), \quad (1)$$

式中: $S_j^z$ 表示第 $j$ 核自旋角动量的 $z$ 分量; $J_{ij}^z$ 表示第 $i$ 核自旋和第 $j$ 核自旋之间的自旋耦合强度, $i=1,2,3$ ; $J_{123}^z$ 表示三个核自旋之间的自旋耦合强度; $h_j^z$ 表示作用在核自旋沿 $z$ 轴方向的均匀磁场强度; $\tilde{h}_j^\alpha$ 表示作用在第 $j$ 核自旋沿 $\alpha$ 方向的射频正旋磁场强度, $\alpha=x,y$ ; $f_j^\alpha$ 和 $\varphi_j^\alpha$ 分别表示作用在第 $j$ 核自旋沿 $\alpha$ 方向射频正旋磁场的频率和初相位。

### 2.2 脉冲序列执行时间的确定

一个核自旋角动量沿 $z$ 轴方向的分量 $S_j^z$ 朝上和朝下的基矢量记为

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

在沿 $x$ 轴方向的射频脉冲磁场作用下,核自旋绕 $y$ 轴顺时针转动 $\pi/2$ 的转动算符,在沿 $y$ 轴方向的射频脉冲磁场作用下,核自旋绕 $x$ 轴顺时针转动 $\pi/2$ 的转动算符表示为

$$X = e^{i\pi S_j^y/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}, Y = e^{i\pi S_j^x/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

核自旋角动量绕 $x$ 轴和 $y$ 轴逆时针转动 $\pi/2$ 的转动算符表示为

$$\bar{X} = e^{-i\pi S_j^y/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}, \bar{Y} = e^{-i\pi S_j^x/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

第 $j$ 核自旋受到均匀磁场(沿 $z$ 轴方向)和射频正旋磁场(沿 $x$ 轴方向)的作用下,设射频脉冲磁场的初相位为零,第 $j$ 核自旋态矢量随时间的演化,遵守单体含时薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -[h_j^z S_j^z + \tilde{h}_j^x \sin(\omega t)] |\psi(t)\rangle. \quad (5)$$

当第 $j$ 核自旋与射频磁场发生 NMR 时,核自旋朝向可以自由变化,求解式(5)得到使第 $j$ 核自旋绕 $y$ 轴顺时针转动 $\pi/2$ 的角度,射频脉冲磁场执行时间<sup>[17-19]</sup>为

$$\tau = \frac{\pi}{\tilde{h}_j^x}. \quad (6)$$

### 2.3 量子 Toffoli 门的 NMR 物理实现

图 1 所示的是 Barenco 等<sup>[4]</sup>提出的将 Toffoli 门分解为两个两量子位控制非门和三个两量子位控制相移门的量子线路图,其中:

$$V = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

量子线路图中的量子逻辑门的作用时序是从左到右,第一个量子门是控制相移门,作用在第二和第三量子位上,它表示为

$$V_{23} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\pi/4}/\sqrt{2} & ie^{-i\pi/4}/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & ie^{-i\pi/4}/\sqrt{2} & e^{-i\pi/4}/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \bar{Y}_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/2} \end{pmatrix} Y_3 = e^{-i\pi} \bar{Y}_3 U_{23} Y_3, \quad (8)$$

$$Y_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/2} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

在不加射频磁场时,考虑第二和第三量子位之间的相互作用,则这两个核自旋系统随时间自由演化的算符表示为

$$U_{23} = e^{-i\pi H_{23}} = \begin{pmatrix} e^{i\phi_{00}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\phi_{01}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\phi_{10}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\phi_{11}} \end{pmatrix} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

式中,

$$H_{23} = -J_{23}^z S_2^z S_3^z - h(S_2^z + S_3^z), h_2^z = h_3^z = h. \quad (11)$$

这要求:

$$\phi_{00} = \phi_{01} = \phi_{10} = \alpha, \phi_{11} = \alpha - \frac{\pi}{2}. \quad (12)$$

由此得到:

$$\tau \left( \frac{J_{23}}{4} + h \right) = -\tau \frac{J_{23}}{4} = \alpha, \tau \left( \frac{J_{23}}{4} - h \right) = \alpha - \frac{\pi}{2}. \quad (13)$$

执行控制相移门 $U_{23}$ 要求:

$$h = -\frac{J_{23}}{2}, \tau J_{23} = -\frac{\pi}{2}, \quad (14)$$

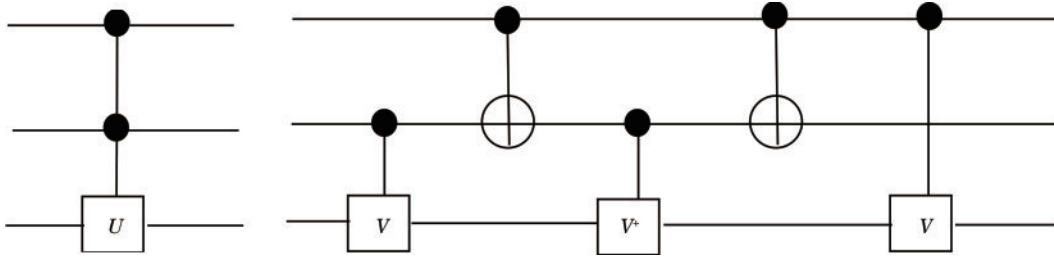


图 1 Toffoli 门分解为控制非门和控制相移门的量子线路图

Fig. 1 Quantum network for Toffoli gates using controlled NOT and phase shift gates

式(14)决定了两量子位控制相移门  $U_{23}$  的执行时间,由式(14)及  $\bar{Y}_3 U_{23} Y_3$  得到控制相移门  $V_{23}$ 。第二个量子门是控制非门,作用在第一和第二量子位上,它表示为

$$C_{\text{NOT}} = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & 2S_2^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & 2\bar{Y}_2 S_2^z Y_2 \end{pmatrix} = \bar{Y}_2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} Y_2 = e^{-i\beta} \bar{Y}_2 I_{12} Y_2, \quad (15)$$

$$I_{12} = e^{-i\tau H_{12}} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi_{00}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_{01}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\varphi_{10}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi_{11}} \end{pmatrix} = e^{i\beta} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

式中:

$$H_{12} = -J_{12}^z S_1^z S_2^z - h(S_1^z + S_2^z), h_1^z = h_2^z = h, \quad (17)$$

这要求:

$$\varphi_{00} = \varphi_{01} = \varphi_{10} = \beta, \varphi_{11} = \beta - \pi. \quad (18)$$

由此得到:

$$\tau\left(\frac{J_{12}}{4} + h\right) = -\tau\frac{J_{12}}{4} = \beta, \tau\left(\frac{J_{12}}{4} - h\right) = \beta - \pi. \quad (19)$$

执行控制非门要求:

$$h = -\frac{J_{12}}{2}, \tau J_{12} = -\pi, \quad (20)$$

式(20)决定了自由演化算符  $I_{12}$  的执行时间,由式(20)及  $\bar{Y}_2 I_{12} Y_2$  得到控制非门  $C_{\text{NOT}}$ 。从左到右依次用 NMR 脉冲序列和随时间自由演化算符  $U_{23}, I_{12}$  等代替三个控制相移门和两个控制非门,得到 Toffoli 门 NMR 物理实现的脉冲序列为

$$\bar{Y}_3 U_{13} Y_3 \bar{Y}_2 I_{12} Y_2 \bar{Y}_3 \bar{U}_{23} Y_3 \bar{Y}_2 I_{12} Y_2 \bar{Y}_3 U_{23} Y_3. \quad (21)$$

## 2.4 量子 Toffoli 门 NMR 参数取值

参考 Chuang 等<sup>[20]</sup>的实验数据,作为 Toffoli 门参数的取值:

$$\begin{aligned} 2\pi h_1^z &= 2\pi h_2^z = 2\pi h_3^z = 500 \text{ MHz}, \\ J_{12}^z &= J_{13}^z = J_{23}^z = -215 \text{ Hz}, \\ 2\pi \tilde{h}_1^y &= 2\pi \tilde{h}_2^y = 2\pi \tilde{h}_3^y = 125 \text{ MHz}, \\ 2\pi f_1^x &= 2\pi f_2^x = 2\pi f_3^x = 500 \text{ MHz}. \end{aligned} \quad (22)$$

将上述数据重新定标为

$$\begin{aligned} \tilde{h}_1^y &= \tilde{h}_2^y = \tilde{h}_3^y = 0.25 \text{ MHz}, h_1^z = h_2^z = h_3^z = 1 \text{ MHz}, \\ f_1^x &= f_2^x = f_3^x = 1 \text{ MHz}, J_{12}^z = J_{13}^z = J_{23}^z = -0.43 \times 10^{-6} \text{ MHz}. \end{aligned} \quad (23)$$

Toffoli 门 NMR 脉冲序列参数取值见表 1。

表 1 Toffoli 门 NMR 脉冲序列参数取值

Table 1 Toffoli gate NMR pulse sequence parameter values

unit: MHz

	$Y_3$	$U_{23}$	$\bar{Y}_3$	$Y_2$	$I_{12}$	$\bar{Y}_2$	$\bar{U}_{23}$	$U_{13}$
$J_{12}^z$	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	0	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	$-0.43 \times 10^{-6}$
$J_{23}^z$	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	0	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	$-0.43 \times 10^{-6}$
$J_{13}^z$	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	0	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	0	$-0.43 \times 10^{-6}$	$-0.43 \times 10^{-6}$
$\tilde{h}_1^y$	0.25	0	-0.25	0.25	0	-0.25	0	0
$\tilde{h}_2^y$	0.25	0	-0.25	0.25	0	-0.25	0	0
$\tilde{h}_3^y$	0.25	0	-0.25	0.25	0	-0.25	0	0
$h_1^z$	1	1	1	1	1	1	-1	1
$h_2^z$	1	1	1	1	1	1	-1	1
$h_3^z$	1	1	1	1	1	1	-1	1
$f_1^x$	1	0	1	1	0	1	0	0
$f_2^x$	1	0	1	1	0	1	0	0
$f_3^x$	1	0	1	1	0	1	0	0

### 3 量子 Toffoli 门 NMR 物理实现的正确性与可行性

#### 3.1 薛定谔方程的数值求解方法

核自旋系统波函数随时间的变化遵守含时薛定谔方程:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = H(t) |\Phi(t)\rangle. \quad (24)$$

采用自然单位, 令  $\hbar = 1$ ,  $|\Phi(t)\rangle$  是核自旋系统在时刻  $t$  的波函数,  $H(t)$  为三量子位核自旋系统的哈密顿量, 由式(1)描写。为了使第  $j$  量子位角动量  $z$  分量的期望值与  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  对应, 定义

$$Q_j = Q_j^z = \frac{1}{2} - \langle \Phi(t) | I_j^z | \Phi(t) \rangle, \quad (25)$$

式中:  $I_j^z = \frac{1}{\hbar} S_j^z$ ;  $Q_j$  表示第  $j$  核自旋角动量  $z$  分量期望值的物理量,  $Q_j = 1$  表示第  $j$  核自旋量子态为  $|1\rangle$ ,  $Q_j = 0$  表示第  $j$  核自旋量子态为  $|0\rangle$ 。量子 Toffoli 门是由一系列幺正变换乘积组成的, 每一个幺正变换将系统的态矢量  $|\Phi(t)\rangle$  改变为态矢量  $|\Phi(t+\tau)\rangle$ ,  $\tau$  为幺正变换作用在系统上的执行时间, 含时薛定谔方程的数值求解由下述幺正变换:

$$U(t+\tau) = \exp_+(-i \int_t^{t+\tau} H(u) du) \quad (26)$$

决定,  $\exp_+$  表示时序指数函数<sup>[12-15]</sup>, 利用半群性质可以得出:

$$U(t+\tau, t) = U[t+m\delta, t+(m-1)\delta], \dots, U(t+\delta, t), \quad (27)$$

式中:  $\tau$  为幺正变换执行时间;  $\delta$  为时间步长;  $m$  为时间步数。

用 Suzuki<sup>[12-15]</sup> 乘积公式取代每个  $U[t+(m+1)\delta, t+m\delta]$ ,

$$U(\delta) = e^{-i\delta H_x/2} e^{-i\delta H_y/2} e^{-i\delta H_x} e^{-i\delta H_y/2} e^{-i\delta H_x/2}, \quad (28)$$

得到:

$$U[t+(m+1)\delta, t+m\delta] = e^{-i\delta H_x[t+(m+1/2)\delta]/2} e^{-i\delta H_y[t+(m+1/2)\delta]/2} e^{-i\delta H_x[t+(m+1/2)\delta]} \cdot e^{-i\delta H_y[t+(m+1/2)\delta]/2} e^{-i\delta H_x[t+(m+1/2)\delta]/2}, \quad (29)$$

在幺正变换执行时间  $t \rightarrow t+\delta$  过程中,  $\delta$  很小, 式中,  $H(t)$  可视为恒定的。显然上述构造的  $U(\delta)$  是幺正的, 上述求解含时薛定谔方程的算法是无条件稳定<sup>[12-15]</sup>的, 这种解法和式(24)的精确解没有区别。

#### 3.2 计算结果与分析

幺正变换  $Y_3$ 、 $U_{23}$ 、 $\bar{Y}_3$ 、 $Y_2$ 、 $I_{12}$ 、 $\bar{U}_{23}$ 、 $\bar{Y}_2$  和  $U_{13}$  的执行时间  $\tau$ 、时间步长  $\delta$ 、时间步数  $m$  见表 2。用上述数值求解含时薛定谔方程的方法, 采用量子光学软件包 Quantum Optics and Computation Toolbox for Matlab 进行计算, 得到三核自旋系统随执行时间演化曲线如图 2~9 所示。用  $|Q_1 Q_2 Q_3\rangle$  表示核自旋系统的态矢量,  $Q_1$ 、 $Q_2$ 、 $Q_3$  随执行时间的演化分别用实线、短划线、点划线表示。量子 Toffoli 门分别作用在量子态  $|000\rangle$ 、 $|001\rangle$ 、 $|010\rangle$ 、 $|011\rangle$ 、 $|100\rangle$ 、 $|101\rangle$ 、 $|110\rangle$ 、 $|111\rangle$  上时,  $Q_1$ 、 $Q_2$ 、 $Q_3$  随执行时间的演化如图 2~9 所示。图 2 和图 3 表示: 初始量子态为  $|000\rangle$  和  $|001\rangle$  时系统随执行时间的演化, 演化结束时的态为  $|000\rangle$  和  $|001\rangle$ , 图 2 和图 3 曲线的变化情况是:  $Q_1$  的量子态保持不变,  $Q_2$  值随时间演化时振荡两次,  $Q_3$  的值随时间演化振荡三次, 这是  $|000\rangle$  和  $|001\rangle$  中的第二和第三个量子位受到两个控制非门和三个相移门作用的表现; 图 4 和图 5 表示: 初始量子态为  $|010\rangle$  和  $|011\rangle$  时系统随执行时间的演化, 演化结束时的态为  $|010\rangle$  和  $|011\rangle$ , 图 4 和图 5 曲线的变化情况是:  $Q_1$  的量子态保持不变,  $Q_2$  的值随时间演化振荡两次, 是第二量子位受到两个控制非门作用的表现,  $Q_3$  的值随时间演化振荡两次, 从  $Q_3$  的值第一次振荡发生的时间步数知道, 第一次振荡是两个控制相移门连续作用产生的; 图 6 和图 7 表示: 初始量子态为  $|100\rangle$  和  $|101\rangle$  时系统随执行时间的演化, 演化结束时的态为  $|010\rangle$  和  $|011\rangle$ , 图 6 和图 7 曲线的变化情况是:  $Q_1$  在没有受到射频脉冲磁场作用时, 随时间由  $|0\rangle$  自由演化到  $|1\rangle$ , 即在系统与外界不发生相互作用时, 系统也会随时间发生演化, 这是量子计算机与经典计算机的区别,  $Q_2$  的值随时间演化振荡一次, 从  $Q_2$  值的一次振荡发生时间步数知道, 这是两个控制非门连续作用的结果,  $Q_3$  的值随时间演化振荡两次, 从  $Q_3$  的值第二次振荡发生时间步数知道, 第二次振荡是这后面两个控制相移门连续作用的结果; 图 8 和图 9 表示: 初始量子态为  $|110\rangle$  和  $|111\rangle$  时系统随执行时间的演化, 演化结束时的态为  $|111\rangle$  和  $|110\rangle$ , 图 8 和图 9 曲线的变化情况是:  $Q_1$  在没有受到射频脉冲磁场作用下, 随时间由  $|0\rangle$  自由演化到  $|1\rangle$ ,  $Q_2$  的值随时间演化振荡一次, 从  $Q_2$  的振荡发生时间步数知道, 这是两个控制非门连续作用的结果,  $Q_3$  的值随时间演化振荡两次, 从  $Q_3$  的值第二次振荡发生时间步数知道, 这是后面两

表 2 幺正变换的执行时间、时间步长和时间步数

Table 2 Execution time, time step, and number of time step of unitary transformation

	$\bar{Y}_3$	$U_{23}$	$\bar{Y}_3$	$Y_2$	$I_{12}$	$\bar{U}_{23}$	$\bar{Y}_2$	$\bar{U}_{13}$
$\tau/s$	$1.58 \times 10^{-7}$	$7.3 \times 10^{-3}$	$1.58 \times 10^{-7}$	$1.58 \times 10^{-7}$	$1.46 \times 10^{-2}$	$7.3 \times 10^{-3}$	$1.58 \times 10^{-7}$	$7.3 \times 10^{-3}$
$\delta/s$	$1.58 \times 10^{-7}$	$7.3 \times 10^{-3}$	$1.58 \times 10^{-7}$	$1.58 \times 10^{-7}$	$1.46 \times 10^{-2}$	$7.3 \times 10^{-3}$	$1.58 \times 10^{-7}$	$7.3 \times 10^{-3}$
$m$	1	1	1	1	1	1	1	1

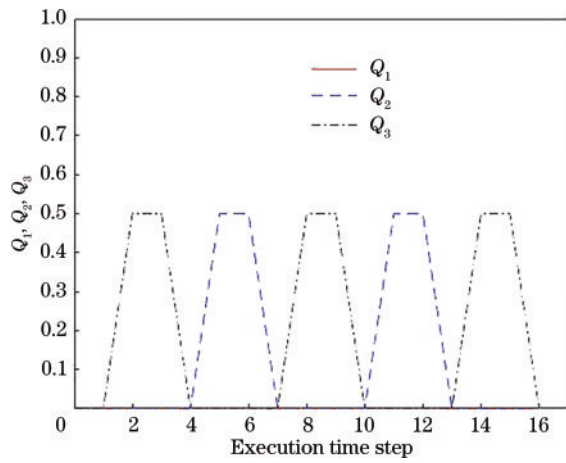


图 2 初始量子态为 $|000\rangle$ 时  $Q_1$ 、 $Q_2$  和  $Q_3$  随执行时间的演化  
Fig. 2 Evolution of  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  with execution time when initial quantum state is  $|000\rangle$

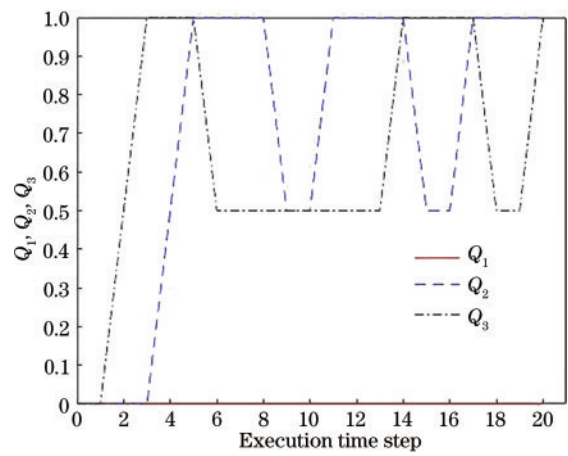


图 5 初始量子态为 $|011\rangle$ 时  $Q_1$ 、 $Q_2$  和  $Q_3$  随执行时间的演化  
Fig. 5 Evolution of  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  with execution time when initial quantum state is  $|011\rangle$

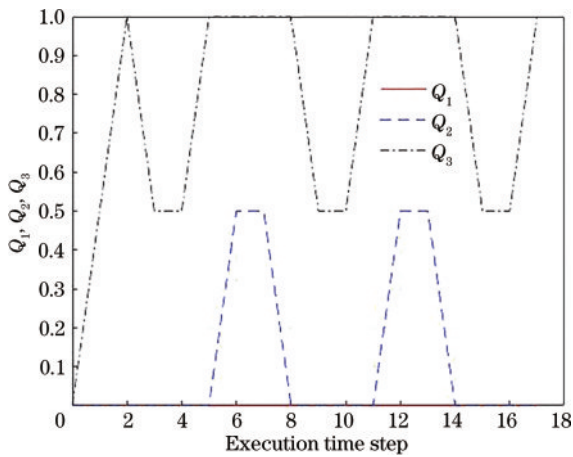


图 3 初始量子态为 $|001\rangle$ 时  $Q_1$ 、 $Q_2$  和  $Q_3$  随执行时间的演化  
Fig. 3 Evolution of  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  with execution time when initial quantum state is  $|001\rangle$

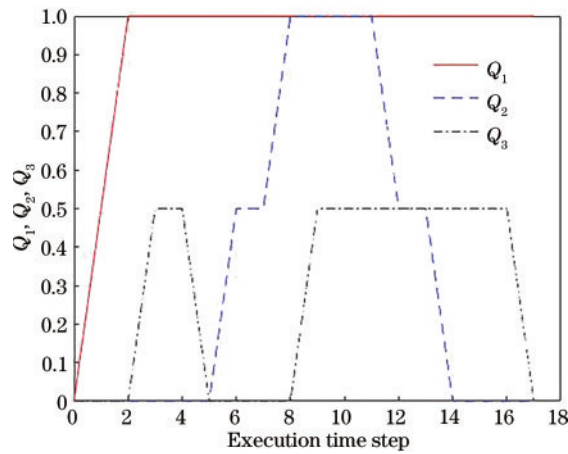


图 6 初始量子态为 $|100\rangle$ 时  $Q_1$ 、 $Q_2$  和  $Q_3$  随执行时间的演化  
Fig. 6 Evolution of  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  with execution time when initial quantum state is  $|100\rangle$

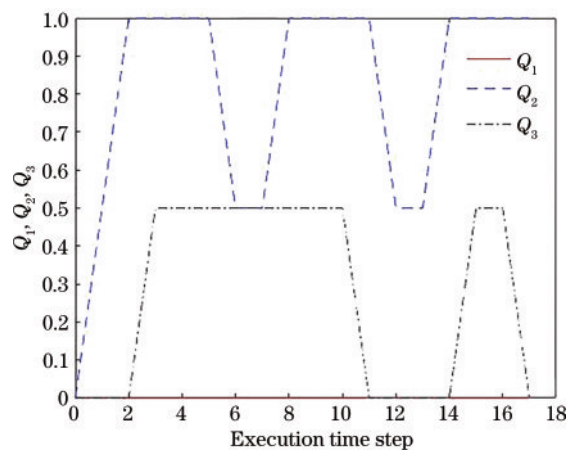


图 4 初始量子态为 $|010\rangle$ 时  $Q_1$ 、 $Q_2$  和  $Q_3$  随执行时间的演化  
Fig. 4 Evolution of  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  with execution time when initial quantum state is  $|010\rangle$

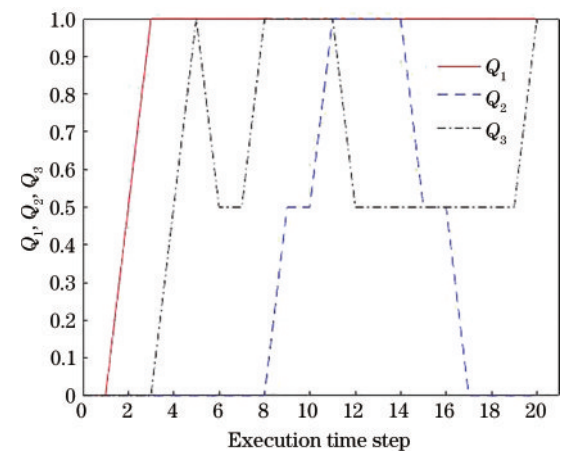


图 7 初始量子态为 $|101\rangle$ 时  $Q_1$ 、 $Q_2$  和  $Q_3$  随执行时间的演化  
Fig. 7 Evolution of  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  with execution time when initial quantum state is  $|101\rangle$

个控制相移门连续作用的结果。以上计算结果与分析表明：在温度为 0，不考虑系统与环境相互作用的

条件下，上述 Toffoli 门的 NMR 物理实现的脉冲序列设计是正确和可行的，自由演化算符作用的执行时

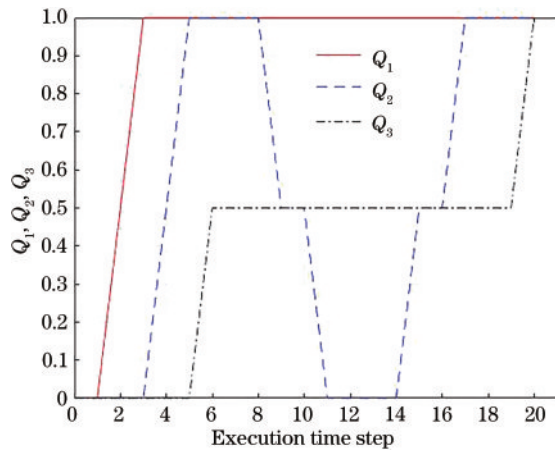


图 8 初始量子态为 $|110\rangle$ 时  $Q_1$ 、 $Q_2$  和  $Q_3$  随执行时间的演化  
Fig. 8 Evolution of  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  with execution time when initial quantum state is  $|110\rangle$

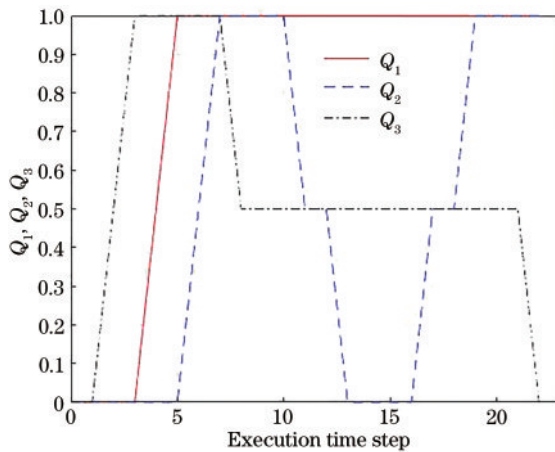


图 9 初始量子态为 $|111\rangle$ 时  $Q_1$ 、 $Q_2$  和  $Q_3$  随执行时间的演化  
Fig. 9 Evolution of  $Q_1$ ,  $Q_2$ , and  $Q_3$  with execution time when initial quantum state is  $|111\rangle$

间和参数取值是合理的,对三量子系统实现么正变换时其量子态随时间的演化是稳定的。

## 4 结 论

利用 Toffoli 门等价于两个两量子位控制非门和三个两量子位控制相移门的组合,将控制非门和控制相移门分别化为 NMR 脉冲序列及两核自旋系统的自由演化算符的组合,按控制非门和控制相移门依次作用于核自旋系统的时间顺序,构成量子 Toffoli 门的 NMR 物理实现,用 Suzuki 公式对含时薛定谔方程进行数值求解,计算结果演示了 Toffoli 门的三个量子位随执行时间的演化过程,表明了核自旋系统随时间的演化每一步都是稳定的,验证了量子 Toffoli 门的 NMR 脉冲序列设计是正确和可行的,此方法对其他复杂量子逻辑门和量子算法的 NMR 物理实现设计与验证具有参考价值。

## 参 考 文 献

- [1] Deutsch D. Quantum computational networks[J]. Proceedings of the Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences, 1989, 425(1868): 73-90.
- [2] Deutsch D, Barenco A, Ekert A. Universality in quantum computation[J]. Proceedings of the Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences, 1995, 449(1937): 669-677.
- [3] DiVincenzo D P. Two-bit gates are universal for quantum computation[J]. Physical Review A, Atomic, Molecular, and Optical Physics, 1995, 51(2): 1015-1022.
- [4] Barenco A, Bennett C H, Cleve R, et al. Elementary gates for quantum computation[J]. Physical Review A, Atomic, Molecular, and Optical Physics, 1995, 52(5): 3457-3467.
- [5] Ralph T C, Resch K J, Gilchrist A. Efficient Toffoli gates using qubits[J]. Physical Review A, 2007, 75(2): 022313.
- [6] Monz T, Kim K, Hänsel W, et al. Realization of the quantum Toffoli gate with trapped ions[J]. Physical Review Letters, 2009, 102(4): 040501.
- [7] Jones C. Low-overhead constructions for the fault tolerant Toffoli gate[J]. Physical Review A, 2013, 87(2): 022328.
- [8] Zheng S B. Implementation of Toffoli gates with a single asymmetric Heisenberg XY interaction[J]. Physical Review A, Atomic, Molecular, and Optical Physics, 2013, 87(4): 042318.
- [9] Zahedinejad E, Ghosh J, Sanders B C. High-fidelity single-shot Toffoli gate via quantum control[J]. Physical Review Letters, 2015, 114(20): 200502.
- [10] Ru S H, Wang Y L, An M, et al. Realization of a deterministic quantum Toffoli gate with a single photon [J]. Physical Review A, 2021, 103(2): 022606.
- [11] 王洁琼, 张勇. 基于奇偶校验门的非破坏性贝尔态测量 [J]. 光学学报, 2021, 41(20): 2027002.  
Wang J Q, Zhang Y. Non-destructive bell state measurement based on parity gates[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41 (20): 2027002.
- [12] de Raedt H. Product formula algorithms for solving the time dependent Schrödinger equation[J]. Computer Physics Reports, 1987, 7(1): 1-72.
- [13] Slichter C P. Principles of magnetic resonance[M]. 3rd ed. Berlin: Springer, 1990.
- [14] Suzuki I M. General decomposition theory of ordered exponentials[J]. Proceedings of the Japan Academy, Series B, 1993, 69(7): 161-166.
- [15] de Raedt H, Hams A H, Michielsen K, et al. Quantum computer emulator[J]. Computer Physics Communications, 2000, 132(1/2): 1-20.
- [16] Tseng C H, Somaroo S, Sharf Y, et al. Quantum simulation of a three-body-interaction Hamiltonian on an NMR quantum computer[J]. Physical Review A, 1999, 61(1): 012302.
- [17] 彭永刚. 量子控制非门核磁共振实现最优脉冲序列 [J]. 激光与光电子学进展, 2021, 58(1): 0127002.  
Peng Y G. Optimal pulse sequence of quantum controlled not-gates via nuclear magnetic resonance realization[J].

- Laser & Optoelectronics Progress, 2021, 58(1): 0127002.
- [18] 彭永刚. 量子算法核磁共振实现脉冲序列设计程序问题研究[J]. 大学物理, 2021, 40(1): 38-47.
- Peng Y G. Research on the program problem of the NMR pulse sequence design in quantum algorithm[J]. College Physics, 2021, 40(1): 38-47.
- [19] 彭永刚. 量子控制非门核磁共振脉冲序列设计与验证 [J]. 计算机工程与应用, 2021, 57(18): 97-102.
- Peng Y G. Design and verification of quantum controlled-not gate NMR pulse sequence[J]. Computer Engineering and Applications, 2021, 57(18): 97-102.
- [20] Chuang I L, Gershenfeld N, Kubinec M. Experimental implementation of fast quantum searching[J]. Physical Review Letters, 1998, 80(15): 3408-3411.