

文章编号:1004-4213(2010)10-1806-5

两量子位 Grover 量子算法 NMR 脉冲序列参量的研究*

彭永刚

(南京邮电大学 理学院应用物理系, 南京 210003)

摘要:从两量子位核磁共振量子计算机物理模型出发,通过解单体含时薛定谔方程和解两体含时薛定谔方程,提出了 Grover 量子算法核磁共振脉冲序列参量设定的两种规则,给出了具体参量取值,并进行了数值仿真,仿真结果表明:解两体薛定谔方程给出的参量设定规则,能使两量子位量子搜索的目标态是纯基态,目标态的 z 分量期望值精确度达到在小数点后三位与理论值完全相同,验证了我们提出的参量设定规则的正确性.

关键词:参量设定;核磁共振脉冲序列;含时薛定谔方程;Grover 量子算法数值仿真

中图分类号:O431.2

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20103910.1806

0 引言

1996 年, Grover 在第 28 届美国计算机学会举办的计算理论国际会议上提出开创性的著名论文“ A fast quantum mechanical algorithm for database search”^[1]以来,已有许多学者开展了有关 Grover 量子算法的理论与实验研究^[2-8]. 1998 年, Chuang 等人^[2]在物理评论快报发表了“ Experimental implementation of fast quantum searching”以核磁共振实验技术实现两量子位 Grover 量子算法的论文. 2002 年, 杨晓冬和缪希茄^[3]提出利用多量子代数理论来指导设计任意量子位的 Grover 算法的核磁共振脉冲序列,并用实验验证两量子位的 Grover 算法核磁共振脉冲序列. 利用核磁共振实验技术实现量子算法,必须把实现量子算法的量子逻辑操作编译成在核磁共振谱仪上能够执行的核磁共振射频脉冲序列和自旋与自旋之间耦合相互作用哈密顿量随时间演化的执行时间,然而设计核磁共振脉冲序列参量和耦合哈密顿量随时间演化的执行时间去实现量子逻辑操作,实现量子计算是很困难的.

本文从单量子位核自旋绕 x 轴和 y 轴转动 $\pi/2$ 的量子逻辑门和两量子位之间自由演化门出发,给出实现两量子位 Grover 量子算法的核磁共振脉冲序列,并从两量子位核磁共振量子计算机物理模型出发,通过解单体和两体含时薛定谔方程,根据两量子位 Grover 量子算法要求,提出了核磁共振脉冲序

列参量设定的规则,给出参量具体取值,通过量子计算硬件仿真程序^[4]进行数值仿真,比较了两种参量设定方法的可行性.

1 两量子位 Grover 量子算法核磁共振脉冲序列参量设定与数值仿真

1.1 实现两量子位 Grover 量子算法核磁共振脉冲序列

1998 年, Chuang 等人^[2]在物理评论快报发表“ Experimental realization of a quantum algorithm”的实验中,用碳 13 标记的三氯甲烷分子中的 ^1H 和 ^{13}C 两个原子作为两量子位量子计算机,不考虑与其他自由度的相互作用,在均匀磁场和外加射频磁场中,这个自旋为 $-1/2$ 两量子位系统的哈密顿量^[2,4]表示为

$$H = J_{1,2,z} S_1^z S_2^z - h_{1,z,0} S_1^z - h_{2,z,0} S_2^z - \sum_{j=1}^2 \sum_{\alpha=x,y} h_{j,\alpha,1} \sin(2\pi f_{j,\alpha} t + \varphi_{j,\alpha}) S_j^\alpha \quad (1)$$

在核磁共振量子计算机中,利用射频电磁脉冲来转动核自旋,方法是调节射频电磁场的频率与某一特定核自旋进动频率相同(即 $2\pi f_{j,\alpha} = h_{j,\alpha,0}$; $\alpha = x, y$),通过选择适当的射频脉冲,可以实现任意的单自旋比特转动,自旋绕 x, y 轴旋转 $\pi/2$ 的单量子逻辑门^[4]定义为

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

核自旋之间的相互作用是通过耦合哈密顿量随时间演化来实现,在作用持续时间为 t , 两量子位之间耦合哈密顿量 $H_j = \hbar 2\pi J_{12} I_1^z I_2^z$ 时,两量子位之间自由

* 国家自然科学基金(10904074)资助

Tel: 025-83492091

Email: pengyg@njupt.edu.cn

收稿日期: 2010-02-25

修回日期: 2010-05-29

演化门^[5]定义为

$$G_j(t) = \exp(-i2\pi J I_j^z I_j^z t) = \begin{bmatrix} e^{-i\pi J t/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi J t/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi J t/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi J t/2} \end{bmatrix} \quad (3)$$

式中, $2I^z = \sigma_z = \frac{2}{\hbar} S_z$, 在文献[6]已证明两量子位控制非门操作和单量子位转动操作构成量子计算的一个通用逻辑门组, 由于两量子位之间自由演化门可以构成两量子位控制非门, 所以 X 、 Y 和 $G_j(t)$ 这三个门组成执行通用门的最小集合, 实现量子计算。

利用 X 、 Y 和 $G_j(t)$ 可设计出搜索标记为 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 、 $|11\rangle$ 两量子位 Grover 量子算法核磁共振脉冲序列^[2,4]量子逻辑门表示如下

$$U_0 = X_1 \bar{Y}_1 X_2 \bar{Y}_2 G X_1 \bar{Y}_1 X_2 \bar{Y}_2 G \bar{X}_2 \bar{X}_2 \bar{Y}_2 \cdot \bar{X}_1 \bar{X}_1 \bar{Y}_1 \quad (4)$$

$$U_1 = X_1 \bar{Y}_1 X_2 \bar{Y}_2 G \bar{X}_1 \bar{Y}_1 X_2 \bar{Y}_2 G \bar{X}_2 \bar{X}_2 \bar{Y}_2 \cdot \bar{X}_1 \bar{X}_1 \bar{Y}_1 \quad (5)$$

$$U_2 = X_1 \bar{Y}_1 X_2 \bar{Y}_2 G X_1 \bar{Y}_1 \bar{X}_2 \bar{Y}_2 G \bar{X}_2 \bar{X}_2 \bar{Y}_2 \cdot \bar{X}_1 \bar{X}_1 \bar{Y}_1 \quad (6)$$

$$U_3 = X_1 \bar{Y}_1 X_2 \bar{Y}_2 G X_1 \bar{Y}_1 \bar{X}_2 \bar{Y}_2 G \bar{X}_2 \bar{X}_2 \bar{Y}_2 \cdot \bar{X}_1 \bar{X}_1 \bar{Y}_1 \quad (7)$$

式中

$$G = \begin{bmatrix} e^{-i\pi/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/4} \end{bmatrix} \quad (8)$$

\bar{X} 和 \bar{Y} 表示自旋绕 x 、 y 轴旋转 $-\frac{\pi}{2}$ 的单量子逻辑门. 这个量子算法的量子逻辑门表示不是唯一的, 通过利用算符 X 和 Y 的代数性质, 可以写出 U_j 的其他表示.

1.2 核磁共振脉冲序列参量的设定

设计出核磁共振脉冲序列后, 实现量子算法的关键在于核磁共振脉冲序列操作时间 τ 以及 J 、 h 等参量的设定, 在下面讨论中, 参量 $h_{1,z,0}$ 、 $h_{2,z,0}$ 和 $J_{1,2,z}$ 采用文献[2]中取值

$$\begin{aligned} h_{1,z,0}/2\pi &\approx 500 \text{ MHz}, h_{2,z,0}/2\pi \approx 125 \text{ MHz}, \\ J_{1,2,z}/2\pi &\approx -215 \text{ Hz} \end{aligned} \quad (9)$$

为了方便, 将 $h_{1,z,0}$ 、 $h_{2,z,0}$ 和 $J_{1,2,z}$ 参量重新标度为

$$\begin{aligned} J_{1,2,z} &= -0.43 \times 10^{-6}, h_{1,z,0} = 1, h_{2,z,0} = 1/4, \\ \gamma &= h_{2,z,0}/h_{1,z,0} = 1/4 \end{aligned} \quad (10)$$

核磁共振脉冲序列操作时间 τ 参量的设定, 分为单量子位转动门和两量子位之间自由演化门 τ 参量设定两种情况. 单量子位转动门 τ 参量设定的规则, 要根据两量子位核磁共振量子计算机物理模型式(1), 通过解含时薛定谔方程来确定, 求解式(1)的含时薛定谔方程是一个量子多体问题, 精确求解十分困难, 在式(9)和式(10)中, $J_{1,2,z}$ 相对 $h_{1,z,0}$ 和 $h_{2,z,0}$ 很小, 式(1)中的第一项可忽略不计, 如果只考虑一个单核自旋的转动态, 另一个核自旋项也忽略不计, 则核自旋 1(或核自旋 2)在一个沿 z 轴均匀磁场和沿 x 轴射频磁场中随时间演化的含时薛定谔方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = -[h_{j,z,0} S_j^z + h_{j,x,1} S_j^x \sin 2\pi f_{j,x} t] \cdot |\Phi(t)\rangle \quad (11)$$

为了方便, 令式(1)中的 $\varphi_{j,x}$ 等于零, 将

$|\Phi(t)\rangle = e^{i\omega_0 S_j^z} |\Psi(t)\rangle$ 代入上式, 得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = -[(h_{j,z,0} - \omega_0) S_j^z + h_{j,x,1} S_j^x \cdot \sin 2\pi f_{j,x} t \cos \omega_0 t + h_{j,x,1} S_j^y \sin 2\pi f_{j,x} t \cdot \sin \omega_0 t] |\Psi(t)\rangle \quad (12)$$

令 $\omega_0 = h_{j,z,0}$, 发生共振时, 又有 $2\pi f_{j,x} = h_{j,z,0}$, 则式(12)的解为

$$|\Psi(t)\rangle \approx e^{i h_{j,x,1} S_j^y} |\Psi(0)\rangle \quad (13)$$

考虑持续时间为 τ 的射频脉冲作用在 $|\Phi(t)\rangle$ 态上, 则

$$|\Phi(t+\tau)\rangle \approx e^{i h_{j,z,0} S_j^z / \hbar} e^{i h_{j,x,1} / 2\hbar} \quad (14)$$

由式(14)可知, 要使单个核自旋绕 y 轴转动 $\pi/2$, 须满足

$$h_{j,x,1} \tau = \pi \quad (15)$$

式(15)就是 Y_j 、 \bar{Y}_j 持续时间 τ 参量的设定规则, 而 X_j 、 \bar{X}_j 的 τ 参量设定规则为

$$h_{j,y,1} \tau = \pi \quad (16)$$

根据式(8), 两量子位之间自由演化门的 τ 取值规则是

$$J_{1,2,z} \tau = \pi/2 \quad (17)$$

根据式(15)、式(16)和式(17), 核磁共振脉冲序列具体参量 $\tau/2\pi$ 设定见表 1, J 和 h 参量的设定见表 2, 利用表 1 和表 2 的参量, 用量子计算硬件仿真程序^[4]进行数值仿真, 在量子计算硬件仿真程序中搜索标记为 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 、 $|11\rangle$ 数值仿真结果见表 3, 在表 3 中, $Q_j = \frac{1}{2} - \langle \Phi(t) | S_j^z | \Phi(t) \rangle$, Q_1 和 Q_2

分别表示自旋 1 和自旋 2 的 z 分量期望值的理论值, $\langle Q_1 \rangle$ 和 $\langle Q_2 \rangle$ 分别表示数值仿真中自旋 1 和自旋 2 的 z 分量期望值的仿真实验值. 表 3 中的数值仿

表 1 核磁共振脉冲序列参量 τ 取值表

Table 1 Specification of the NMR pulse sequence parameter τ

	X_1	X_2	\bar{X}_1	\bar{X}_2	Y_1	Y_2	\bar{Y}_1	\bar{Y}_2	G
$\tau/2\pi$	1.0000e+1	4.0000e+1	1.0000e+1	4.0000e+1	1.0000e+1	4.0000e+1	1.0000e+1	4.0000e+1	2.5000e+5

表 2 核磁共振脉冲序列参量 J 和 h 取值表

Table 2 Specification of the NMR pulse sequence parameters J and h

	X_1	X_2	\bar{X}_1	\bar{X}_2	Y_1	Y_2	\bar{Y}_1	\bar{Y}_2	G
$J_{1,2,z}$	-1.0000e-6	-1.0000e-6	-1.0000e-6	-1.0000e-6	-1.0000e-6	-1.0000e-6	-1.0000e-6	-1.0000e-6	-1.0000e-6
$h_{1,z,0}$	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.000e+0
$h_{2,z,0}$	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1
$h_{1,x,1}$	0	0	0	0	5.0000e-2	5.0000e-2	-5.0000e-2	-5.0000e-2	0
$h_{2,x,1}$	0	0	0	0	1.2500e-2	1.2500e-2	-1.2500e-2	-1.2500e-2	0
$f_{1,x}$	0	0	0	0	1.0000e+0	2.5000e-1	1.0000e+0	2.5000e-1	0
$f_{2,x}$	0	0	0	0	1.0000e+0	2.5000e-1	1.0000e+0	2.5000e-1	0
$h_{1,y,1}$	-5.0000e-2	-5.0000e-2	5.0000e-2	5.0000e-2	0	0	0	0	0
$h_{2,y,1}$	-1.2500e-2	-1.2500e-2	1.2500e-2	1.2500e-2	0	0	0	0	0
$f_{1,y}$	1.0000e+0	2.5000e-2	1.0000e+0	2.5000e-2	0	0	0	0	0
$f_{2,y}$	1.0000e+0	2.5000e-2	1.0000e+0	2.5000e-2	0	0	0	0	0

表 3 数值仿真结果自旋 z 分量的期望值

Table 3 The expectation value of the z component of the spin in our numerical experiment results

	$ 00\rangle$	$ 01\rangle$	$ 10\rangle$	$ 11\rangle$
Q_1	0.000	0.000	1.000	1.000
Q_2	0.000	1.000	0.000	1.000
$\langle Q_1 \rangle$	0.028	0.037	0.966	0.955
$\langle Q_2 \rangle$	0.163	0.836	0.171	0.830

真结果表明,搜索到的标记分别为 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 和 $|11\rangle$ 的最终态不是纯基态 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 和 $|11\rangle$,而是基态 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 和 $|11\rangle$ 的叠加态,原因是引起自旋 1 发生共振射频磁场不仅会改变自旋 1 的状态,而且也会影响自旋 2 的状态,即两量子位核磁共振量子计算机物理模型式(1)是量子两体问题,用解单体含时薛定谔方程的方法,设定核磁共振脉冲序列参量,这只是一种近似方法,要得到搜索的目标态为纯基态,必须求解两自旋体系的含时薛定谔方程,定量求解两自旋体系的薛定谔方程相当困难,但在我们的参量设定中采用文献[2]中模型的参量式(9),射频脉冲作用时间远小于 $1/J$,自旋之间相互作用对自旋在射频脉冲作用下随着时间演化的影响可以忽略,即如果只考虑单量子比特运算,则可以忽略两个自旋之间的相互作用,这时体系的含时薛定谔方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = -[h_{1,z,0}S_1^z + h_{2,z,0}S_2^z + h_{1,x,1}(S_1^x \sin \omega_{1,x}t + S_1^y \cos \omega_{1,x}t) + h_{2,x,1}(S_2^x \sin \omega_{1,x}t + S_2^y \cos \omega_{1,x}t)] |\Phi(t)\rangle \quad (18)$$

在转动参考系中,令 $|\Phi(t)\rangle = e^{i\omega(S_1^z + S_2^z)} |\Psi(t)\rangle$,得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = -[(h_{1,z,0} - \omega_{1,x})S_1^z + (h_{2,z,0} -$$

$$\omega_{1,x})S_2^z + h_{1,x,1}S_1^y + h_{2,x,1}S_2^y] |\Psi(t)\rangle \quad (19)$$

射频磁场与自旋 1 发生共振,即

$$\omega_{1,x} = h_{1,z,0} \quad (20)$$

那么,式(19)的解为

$$|\Phi(t)\rangle = e^{i\hbar_{1,z,0}(S_1^z + S_2^z)} e^{i\hbar_{1,x,1}S_1^y} e^{iS_2 \cdot \mathbf{V}_{12}} |\Phi(0)\rangle \quad (21)$$

式中 $\mathbf{V}_{12} \equiv (0, h_{2,x,1}, h_{2,z,0} - h_{1,z,0})$,式(21)中 $e^{iS_2 \cdot \mathbf{V}_{12}}$ 会使自旋 2 绕矢量 \mathbf{V}_{12} 转动,式(21)中 $e^{i\hbar_{1,z,0}(S_1^z + S_2^z)}$ 会引起相移,要使自旋 1 绕 y 轴转动 $\pi/2$,但又不会影响自旋 2 的状态,要求

射频脉冲作用时间 t_1 满足

$$t_1 |\mathbf{V}_{12}| = t_1 \sqrt{(h_{1,z,0} - h_{2,z,0})^2 + h_{2,x,1}^2} = 4n_1 \pi \quad (22)$$

$$t_1 h_{1,x,1} = \frac{\pi}{2} \quad (23)$$

$$t_1 h_{1,z,0} = 4k_1 \pi \quad (24)$$

k_1, n_1 是正整数,考虑到脉冲参量关系式

$$h_{2,z,0} = h_{1,z,0} \gamma, h_{2,x,1} = h_{1,x,1} \gamma \quad (25)$$

不失一般性,假设 $0 < \gamma < 1$,联立条件式(20)~(25),可得

$$(1 - \gamma)^2 k_1^2 + \frac{\gamma^2}{4^3} = n_1^2 \quad (26)$$

同理可求使自旋 2 绕 y 轴转动 $\pi/2$,而不影响自旋 1 的状态的条件是

$$\left(1 - \frac{1}{\gamma}\right)^2 k_2^2 + \frac{1}{4^3 \gamma^2} = n_2^2 \quad (27)$$

式中 k_2, n_2 是正整数,式(26)和式(27)无精确解,但在 k_1, k_2 很大和 γ 是有理数时,如果令 $\gamma = N/M$,其中 $0 < N < M$,且选择适当的整数 k ,使其满足 $2kN(M - N) \gg 1$,则式(26)和式(27)有足够准确的近似解,用 k, M 和 N 表示相关参量的近似解为

$$\frac{t_1 h_{1,z,0}}{2\pi} = 2kMN^2, \frac{h_{1,x,1}}{h_{1,z,0}} = \frac{1}{8kMN^2},$$

$$\frac{t_2 h_{1,z,0}}{2\pi} = 2kM^3, \frac{h_{2,x,1}}{h_{1,z,0}} = \frac{1}{8kM^3} \quad (28)$$

对自旋 1 和自旋 2 绕 x 轴转动 $\pi/2$ 分析同上. 在参量设定规则式(28)中,取 $k=1, M=8, N=2$, 计算参量,具体参量见表 4 和表 5,用量子计算硬件仿真程序进行数值仿真,数值仿真结果自旋 z 分量的期望值见表 6. 表 6 中的数值仿真结果表明,自旋 z 分量

表 4 核磁共振脉冲序列参量 τ 取值表Table 4 Specification of the NMR pulse sequence parameter τ

	X_1	X_2	\bar{X}_1	\bar{X}_2	Y_1	Y_2	\bar{Y}_1	\bar{Y}_2	G
$\tau/2\pi$	6.4000e+1	1.0240e+3	6.4000e+1	1.0240e+3	6.4000e+1	1.0240e+3	6.4000e+1	1.0240e+3	5.0000e+5

表 5 核磁共振脉冲序列参量 J 和 h 取值表Table 5 Specification of the NMR pulse sequence parameters J and h

	X_1	X_2	\bar{X}_1	\bar{X}_2	Y_1	Y_2	\bar{Y}_1	\bar{Y}_2	G
$J_{1,2,z}$	-4.3000e-7	-4.3000e-7	-4.3000e-7	-4.3000e-7	-4.3000e-7	-4.3000e-7	-4.3000e-7	-4.3000e-7	-1.0000e-6
$h_{1,z,0}$	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.0000e+0	1.000e+0
$h_{2,z,0}$	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1	2.5000e-1
$h_{1,x,1}$	0	0	0	0	7.8125e-3	1.9531e-3	-7.8125e-3	-1.9531e-3	0
$h_{2,x,1}$	0	0	0	0	1.9531e-3	4.8828e-4	-1.9531e-3	-4.8828e-4	0
$f_{1,x}$	0	0	0	0	1.0000e+0	2.5000e-1	1.0000e+0	2.5000e-1	0
$f_{2,x}$	0	0	0	0	1.0000e+0	2.5000e-1	1.0000e+0	2.5000e-1	0
$h_{1,y,1}$	-7.8125e-3	-1.9531e-3	7.8125e-3	1.9531e-3	0	0	0	0	0
$h_{2,y,1}$	1.9531e-3	4.8828e-4	-1.9531e-3	-4.8828e-4	0	0	0	0	0
$f_{1,y}$	1.0000e+0	2.5000e-2	1.0000e+0	2.5000e-2	0	0	0	0	0
$f_{2,y}$	1.0000e+0	2.5000e-2	1.0000e+0	2.5000e-2	0	0	0	0	0

表 6 数值仿真结果自旋 z 分量的期望值Table 6 The expectation value of the z component of the spin in our numerical experiment results

	$ 00\rangle$	$ 01\rangle$	$ 10\rangle$	$ 11\rangle$
Q_1	0.000	0.000	1.000	1.000
Q_2	0.000	1.000	0.000	1.000
$\langle Q_1 \rangle$	0.000	0.000	1.000	1.000
$\langle Q_2 \rangle$	0.000	1.000	0.000	1.000

2 结论

在设定两量子位 Grover 量子算法核磁共振脉冲序列参量时,必须求解两体含时薛定谔方程,这样保证引起自旋 1(自旋 2)共振的射频磁场在改变自旋 1(自旋 2)状态时,不会影响自旋 2(自旋 1)的状态,使量子搜索结果得到纯基态.但在多量子位($n > 2$) Grover 量子算法核磁共振脉冲序列参量设定规则时,由于求解多体($n > 2$)含时薛定谔方程相当困难,采用解单体含时薛定谔方程来确定 Grover 量子算法核磁共振脉冲序列参量设定,再采用适当的纠错方案消除相移,这也是一种实用的和可行的办法.

参考文献

[1] GROVER L K. A fast quantum mechanical algorithm for

的期望值在小数点后三位是精确的,这就是说射频脉冲作用时间远小于 $1/J$ 时,采用式(18)表示核磁共振基本模型求解含时薛定谔方程,得出核磁共振脉冲参量设定规则式(28)是正确的,用式(28)表示的核磁共振脉冲参量设定规则选择参量,就能保证在两量子位核磁共振量子计算机,用 Grover 量子算法,在足够高的精确度内得到搜索结果为纯基态.

database search [C]// Proc. of the 28th annual ACM Symp. On Theory of Computing. New York, USA: ACM Press, 1996, 6: 212-219.

- [2] CHUANG I L, GERSHENFELD N, KUBINEC M. Experimental implementation of fast quantum searching [J]. *Phys Rev Lett*, 1998, **80**(15): 3408-3411.
- [3] YANG Xiao-Dong, MIAO Xi-jia. The theoretic design of NMR pulses program of arbitrary N-qubit Grover algorithm and the NMR experiment proof [J]. *Sci China Ser A*, 2002, **32**(10): 912-920.
- 杨晓冬, 缪希茄. 任意量子位 Grover 量子搜索算法的 NMR 脉冲序列的理论设计及实验验证 [J]. *中国科学(A 辑)*, 2002, **32**(10): 912-920.
- [4] RAEDT H D, HAMS A H, MICHIENSEN K, *et al.* Quantum computer emulator [J]. *Comp Phys Comm*, 2000, **132**(11): 1-20.
- [5] VANDERSPEN L M K, CHUANG I L. NMR techniques for quantum control and computation [J]. *Rev Mod Phys*, 2005, **76**(4): 1037-1069.
- [6] DIVINCENZO D P. Two-bit gates are universal for quantum computation [J]. *Phy Rev A*, 1995, **51**(2): 1015-1022.
- [7] ZHA Xin-wei, ZHANG Wei. Perfect teleportation an arbitrary three-particle state [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2009, **38**(4): 979-982.
- 查新未, 张炜. 三粒子任意态的量子隐形完全传送 [J]. *光子学报*, 2009, **38**(4): 979-982.
- [8] LI Zong-guo, ZHAO Ming-jing, LIU Wu-ming, *et al.* Evolution equation for entanglement of assistance [J]. *Phy Rev A*, 2010, **81**(4): 042312-1-042312-5.

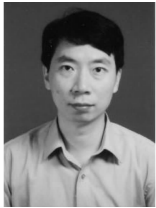
NMR Pulse Sequence Parameters Design of Grover Quantum Algorithm

PENG Yong-gang

(*Department of Applied Physics, Nanjing University of Posts & Technology, Nanjing 210003, China*)

Abstract: Based on physical model of two-qubit quantum computer, two kinds of rules were proposed by solving single-body and two-body the time-dependent Schrödinger equation for designing nuclear magnetic resonance pulse sequence parameter of Grover quantum algorithm. Specified parameters were given through two kinds of designing rules and numerical simulations were carried out as specifying parameters. Results from the simulations show that target state is a pure basis state after running specified parameters by solving two-body the time-dependent Schrödinger equation and the expectation value of z -component of target state agrees with the theoretical values with a precision about 10^{-3} . It is confirmed that rules of designing parameter is correct.

Key words: Parameters design; NMR pulse sequence; The time-dependent Schrödinger equation; Simulation of Grover quantum algorithm



PENG Yong-gang was born in 1964. He received the B. S. degree from Department of Physics, East China Normal University in 1986. Since then he has been working at Department of Applied Physics, Nanjing University of Posts & Technology. Now his research interests focus on quantum informatics.