
**Физический факультет МГУ,
Кафедра физики низких температур и сверхпроводимости,
Институт физических проблем им. П.Л.Капицы РАН.**

**Квантовые биты
на левитирующих электронах**

**Дипломная работа
студента шестого курса 620 группы
Богомолова Сергея Генриховича**

**Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук
Завьялов В.В.**

Москва, 2003



Содержание

Введение.....	3
1 Квантовые вычисления.....	4
1.1 Квантовый бит.....	4
1.2 Квантовый параллелизм.....	5
1.3 Квантовые вентили и квантовые алгоритмы.....	6
1.4 Когерентность и коррекция ошибок.....	8
2 Квантовый компьютер.....	10
2.1 Требования к реализации квантового компьютера.....	11
2.2 Регистр кубитов.....	12
2.3 Управление состоянием кубита.....	12
2.4 Считывание конечного результата.....	13
2.5 Декогерентизация в реальном кубите.....	14
3. Проекты по реализации квантовых компьютеров.....	15
3.1 Ионные ловушки и нейтральные атомы.....	15
3.2 Квантовые точки.....	16
3.3 Сверхпроводящие кубиты.....	17
3.4 Твердотельные ЯМР-компьютеры.....	18
3.5 Примеси в полупроводниках.....	20
3.6 Жидкостные ЯМР-компьютеры.....	21
4. Электронная система над поверхностью криодиэлектрика.....	23
4.1 Энергетический спектр электрона.....	23
4.2 Возбуждение электрона.....	25
4.3 Создание кубитов.....	26
4.4 Время когерентности. Электрон-риплонное рассеяние.....	27
4.5 Двухкубитовые операции и взаимодействие электронов.....	30
4.6 Считывание информации.....	31
4.7 Особенности твердых криодиэлектриков.....	34
5. Квантовый бит на основе электронов, левитирующих над поверхностью твердого криодиэлектрика.....	36
5.1. Схема экспериментальной установки.....	36
5.2 Постановка модельной задачи.....	38
5.3 Методы решения.....	43
5.4 Спектр электрона в ячейке.....	49
5.5 Основные результаты и выводы.....	56
Литература.....	57

Введение

Создание квантового компьютера является во многих отношениях одной из наиболее интересных проблем современной физики. На сегодняшний день в этой области получены значительные теоретические результаты; изготовлены первые прототипы вычислительных устройств, на которых проверены некоторые квантовые алгоритмы.

Квантовые вычисления привлекательны прежде всего тем, что позволяют, задавая в качестве начальных данных классическое выражение, получать также классический результат, несмотря на то, что сам процесс вычислений производится с использованием квантовой природы вещества. Поэтому квантовый компьютер может быть сравнительно легко агрегирован как с классическими компьютерами, так и с другими устройствами.

Современная вычислительная техника, основанная на классической булевой логике, пока справляется с возложенными на нее задачами, но у традиционного подхода существует несколько глобальных проблем. Одна из них связана с приближением существующих методов производства микроэлектроники к технологическим пределам, не позволяющим дальше увеличивать рабочую частоту и уменьшать размеры элементов схемы. Разработчики пытаются решать эту проблему при помощи новых архитектурных решений, таких как конвейеризация и предсказание переходов при исполнении команд процессора.

Другая проблема состоит в постоянном увеличении количества информации и усложнении расчетных задач. Для моделирования сложных систем, например, описания поведения самомодифицирующихся вирусов, требуются гигантские вычислительные мощности. Наиболее ресурсоемким процессом, не связанным с научной деятельностью, является обслуживание баз данных, объемы которых экспоненциально возрастают с каждым годом.

Наконец, существует особый класс задач, время решения которых на классическом компьютере экспоненциальным образом зависит от размеров задачи. К ним, в частности, относится сама задача моделирования полномасштабного квантового компьютера, состоящего из большого числа вычислительных элементов. Эффективное решение таких задач сейчас представляется затруднительным, поскольку за разумное время может быть произведен расчет лишь сильно упрощенных вариантов.

Со всеми этими и другими сопутствующими проблемами призваны справиться квантовые компьютеры. Благодаря своим специфическим свойствам, квантовый компьютер, даже работающий на той же частоте, что и современные ЭВМ, способен выполнять несравненно больший объем работы за меньшее время. Разработанные

теоретиками квантовые алгоритмы позволяют значительно облегчить такие операции, как поиск нужной записи в базе данных или разложение чисел на простые множители.

Но с физической точки зрения, задача реализации квантового компьютера интересна прежде всего возможностью лучше изучить процессы, происходящие в квантовых системах. Создавая новую систему, предлагаемую в качестве основы для квантового компьютера, ученые сталкиваются с трудностями, объяснение и преодоление которых зачастую возможно лишь при помощи последних достижений научной и технической мысли. Более того, уже сейчас для дальнейшего продвижения в некоторых областях исследований требуется создание новых или серьезное улучшение уже существующих технологий. Таким образом, данная проблема дает толчок к развитию многих разделов физического знания.

Первые две части данной работы посвящены краткому изложению принципов работы квантового компьютера. В третьей части рассматриваются наиболее перспективные на сегодняшний день проекты реализации. Затем излагается идея относительно нового способа создания квантового компьютера, в разработке которой принимает участие коллектив нашей лаборатории, преимущества этого способа и трудности его реализации. Последняя часть диплома представляет собой расчет энергетической конфигурации системы электронов, левитирующих над поверхностью криоэлектрика в присутствии электрического поля сложной геометрии. Эта система предлагается в качестве вычислительного регистра.

1. Квантовые вычисления

1.1. Квантовый бит

Вся информация, хранящаяся и обрабатываемая в современных компьютерах, представляется в виде набора битов, каждый из которых может иметь значение 0 или 1 (true или false), и все операции проводятся на основе классической булевой логики. В теории квантовых вычислений возникает новое понятие – квантовый бит, или кубит.

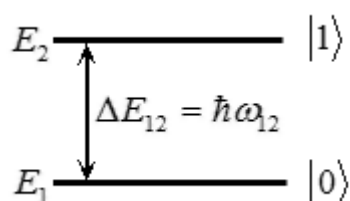


Рис.1. Двухуровневая квантовая система – кубит.

Кубит представляет собой двухуровневую квантовую систему (рис 1.) состоящую из основного уровня $|0\rangle$ и возбужденного $|1\rangle$. В отличие от классического бита, эта система, помимо указанных состояний, может находиться в состоянии, представляющем собой их суперпозицию:

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle, \quad |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1. \quad (1)$$

Для создания полномасштабного квантового компьютера, конечно, требуется не один, а много кубитов. Состояние системы из двух кубитов, которым соответствуют функции $|\psi_1\rangle = a_1|0\rangle + b_1|1\rangle$ и $|\psi_2\rangle = a_2|0\rangle + b_2|1\rangle$, описывается функцией $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$. Эту функцию можно для наглядности записать в следующем виде (символ кронекеровского произведения \otimes подразумевается, $|10\rangle \equiv |1\rangle \otimes |0\rangle$):

$$|\psi\rangle = a_1a_2|00\rangle + a_1b_2|01\rangle + b_1a_2|10\rangle + b_1b_2|11\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + c_3|3\rangle. \quad (2)$$

Вообще, система из N кубитов может быть описана функцией

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{2^N-1} c_k |k\rangle, \quad \sum_k c_k^2 = 1. \quad (3)$$

Здесь необходимо отметить, что из выражения (3) вытекает следующее удивительное свойство: квантовая система из N кубитов имеет $2^N - 1$ степени свободы (это число независимых вещественных параметров, описывающих систему), в то время как число степеней свободы любой классической системы линейно зависит от N. Из этого следует, что в квантовой системе неизбежно должны существовать состояния, не имеющие классических аналогов! Применительно к кубитам, это означает, что такие состояния не могут быть представлены в виде произведения некоторых однокубитовых состояний; они называются запутанными состояниями, и их наличие играет существенную роль в квантовых вычислениях. Более подробное рассмотрение специфических свойств квантовых вычислений выходит за рамки данной дипломной работы.

1.2. Квантовый параллелизм

Функция $|\psi\rangle$ одного кубита может рассматриваться как вектор состояния в двумерном гильбертовом пространстве, базисными векторами в котором являются $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Соответственно, система из N кубитов может находиться в произвольной когерентной суперпозиции из 2^N булевых состояний, т.е. характеризуется вектором состояния в 2^N -мерном гильбертовом пространстве.

Для описания такой квантовой суперпозиции в классическом вычислительном устройстве потребуется задать 2^N комплексных чисел, то есть около 10^{30} для системы из 100 элементов. Это также означает, что эффективное моделирование квантовых систем затруднительно для классических компьютеров, но может осуществляться с помощью унитарных операций в гильбертовом пространстве, связанном с квантовым компьютером. Элементарная квантовая операция в таком случае – поворот вектора состояния. Для этого обычному компьютеру потребуется 2^N операций по вычислению всех коэффициентов суперпозиции.

Главным преимуществом квантовых компьютеров над классическими является так называемый «квантовый параллелизм», основанный на использовании в процессе вычислений состояний, являющихся суперпозицией состояний отдельных кубитов. Суть этого понятия заключается в следующем.

Представим себе классическое вычислительное устройство, которое, получая в качестве входных данных бит x , применяет к нему функцию f и выдает на выход бит $y = f(x)$. Тогда на выходе, в зависимости от значения бита x , мы можем получить либо $f(0)$, либо $f(1)$. Теперь рассмотрим некоторую систему кубитов, на вход которой подается значение одного кубита, а воздействие системы, по аналогии с классическим случаем, описывается как $|x\rangle \rightarrow |f(x)\rangle$. Тогда, подавая на вход этого устройства значение кубита, находящегося в состоянии суперпозиции, мы получим следующий результат:

$$c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \xrightarrow{f} c_0|f(0)\rangle + c_1|f(1)\rangle.$$

В некотором смысле получается, что за одно вычисление были вычислены два значения функции f ! Нетрудно заметить, что, подавая на вход два кубита, мы получим четыре значения функции (см. (2)), а система, оперирующая с восьмью кубитами, одновременно вычисляет 256 значений (32-разрядный аналог современного процессора, соответственно, сможет вычислять около пяти миллиардов значений).

Это свойство экспоненциально увеличивает мощность квантовых компьютеров по сравнению с классическими аналогами. Пока до конца не ясно, как использовать это свойство на практике в реальных полномасштабных вычислениях, и фактический выигрыш в производительности может оказаться меньше расчетного.

1.3. Квантовые вентили и квантовые алгоритмы

Любой алгоритм квантовых вычислений состоит из набора шагов; каждый шаг алгоритма – это определенное унитарное преобразование в пространстве состояний кубитов вычислительного регистра. Любая вычислительная операция, выполняемая

квантовым компьютером, разбивается на отдельные логические части, каждая из которых выполняется на определенном логическом элементе, называемом квантовым вентиляем¹.

Простейшие квантовые вентиля – однокубитовые, иными словами, выполняющие некоторые операции над одним кубитом. Простейшим примером такого вентиля служит элемент NOT (NOT gate).

Для дальнейшего изложения удобно представить состояние кубита $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ в виде матрицы:

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Тогда оператор, осуществляющий преобразование $|\psi\rangle_f = U_{NOT}|\psi\rangle_i$, будет выглядеть как

$$U_{NOT} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Нетрудно видеть, что этот оператор переводит друг в друга состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$, осуществляя «инверсию» состояния кубита. Существуют также специфические однокубитовые вентиля, способные «приготовить» особую суперпозицию основного и возбужденного состояния, необходимую для того или иного квантового алгоритма.

Двухкубитовые квантовые вентиля в некотором смысле аналогичны обычным логическим элементам, таким, как «И» и «ИЛИ» (если забыть про состояния с суперпозицией). Обычно один из кубитов является рабочим, а другой – управляющим, как в случае оператора $CNOT_{ij}$ (controlled NOT), осуществляющего инверсию состояния кубита j только в том случае, если кубит i находился в состоянии $|1\rangle$ (табл. 1).

In		Out	
i	j	i	j
00		00	
01		01	
10		11	
11		10	

Табл.1 Таблица истинности оператора $CNOT_{ij}$.

Следует отметить, что, в отличие от обычных логических элементов, количество кубитов на выходе равно количеству элементов на входе. Единица на выходе элемента «ИЛИ» может означать 01 или 10 на входе, тогда как в рассмотренном квантовом элементе есть взаимно-однозначное соответствие. Это означает, что операции, производимые при помощи квантовых вентиляей, могут обладать свойством обратимости.

¹ Английский термин “logic gate” переводится как «логический элемент». Термин “quantum gate” для сокращения записей обычно переводят не как «квантовый логический элемент», а как «квантовый вентиль».

Среди двухкубитовых вентилях можно особо выделить оператор *SWAP*, с помощью которого производится «обмен состояниями» двух кубитов:

$$U_{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Существуют также квантовые вентили, состоящие из трех и более кубитов.

Разработанные теоретиками квантовые алгоритмы используют свойство квантового параллелизма; это позволяет получать конечный результат за гораздо меньшее число шагов по сравнению с аналогичными классическими алгоритмами. Вообще, алгоритм считается эффективным применительно к конкретной задаче, если с увеличением размера задачи размер требуемых для ее решения ресурсов растет полиномиальным образом. Например, для разложения n -разрядного числа на простые множители лучшие из традиционных алгоритмов требуют экспоненциально больших ресурсов, $\sim \exp(n^{1/3})$, то есть для больших n они малоэффективны (это обстоятельство используется, например, в криптографии – разложить 400-значный ключ алгоритма шифрования на простые множители не сможет ни один современный суперкомпьютер). Но в 1994 году Петер Шор (P. Shor) предложил квантовый алгоритм разложения на простые множители, позволяющий разложить n -значное число за $n^3 (\log n)^k$ шагов ($k = const$). В основе этого алгоритма лежит так называемое квантовое фурье-преобразование, приводящее к тому же результату, что и классическое быстрое фурье-преобразование², но за N^2 операций вместо $2^N N$. Другим примером может служить алгоритм Гровера (1996) для поиска записей в базе данных. Обычный алгоритм находит нужную запись среди N штук за N шагов, квантовый – за \sqrt{N} .

Именно квантовые алгоритмы реально показывают, как использовать преимущества квантового компьютера перед обычным. Поэтому, создавая систему, предлагаемую в качестве вычислительного устройства, необходимо реализовать универсальный набор квантовых вентилях, способных выполнить любую логическую операцию, входящую в состав алгоритма.

1.4. Когерентность и коррекция ошибок

Понятие когерентности является одним из наиболее важных в области квантовых вычислений. Как было сказано, преимущества квантовых алгоритмов перед

² Быстрое фурье-преобразование Кули-Тьюки использует для расчетов специальные алгоритмы, позволяющие сократить количество операций умножения.

классическими основываются на использовании состояний с суперпозицией. В реальной квантовой системе такие состояния обладают ограниченным временем существования из-за взаимодействия системы с внешним окружением. Время сохранения определенного состояния квантовой системы называют временем когерентности.

Даже сравнительно небольшое взаимодействие с внешней средой приведет к тому, что состояние $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ быстро перейдет в одно из стабильных состояний $|0\rangle$ или $|1\rangle$. Такой переход является наиболее простым случаем потери когерентности – декогерентизации (раньше еще применялись термины «редукция» или «коллапс» волновой функции).

Процесс декогерентизации приводит к необратимой потере коэффициентов суперпозиции, и, следовательно, информации, хранимой кубитом. Таким образом, этот процесс является источником произвольных случайных ошибок. Из этого обстоятельства следуют два вывода: во-первых, время выполнения операции над кубитом должно быть существенно меньше его времени когерентности. Желательно, чтобы весь квантовый алгоритм успел отработать, пока не нарушилось состояние всего регистра кубитов. Но поскольку для работы квантового компьютера, скорее всего, потребуется длительное хранение некоторого объема информации на регистре кубитов, то простого увеличения рабочей частоты для решения проблем декогерентизации недостаточно. В этом случае предлагается использовать алгоритмы квантовой коррекции ошибок.

Помимо процессов декогерентизации, влияние внешней среды приводит к тому, что любая унитарная операция над кубитом может быть произведена лишь с некоторой точностью δ . Без исправления ошибок они будут накапливаться, и через порядка δ^{-1} шагов общая ошибка вычислений станет порядка единицы. Существует утверждение, что коррекция ошибок возможна лишь в том случае, если обеспечивается точность вычислений не хуже определенного предела δ_0 (т.е. при ошибке одного шага $\delta < \delta_0$). В противном случае ошибки накапливаются быстрее, чем их удается исправлять. По разным оценкам, δ_0 лежит в интервале от 10^{-2} до 10^{-6} (эта величина, разумеется, зависит и от используемой системы).

Коррекция квантовых ошибок гораздо сложнее, чем классических. В отличие от бита информации, ошибкой в котором является замена 0 на 1 (или наоборот), ошибочный кубит может находиться в произвольной (в том числе, неизвестной!) суперпозиции двух

состояний. Более того, любое измерение состояния кубита неизбежно приведет к его изменению, а создание запасной копии этого кубита запрещено³.

В основе алгоритмов коррекции лежит кодирование информации с использованием дополнительных кубитов. Например, 0 кодируется как 000, 1 – как 111. Тогда получаемые при последующем измерении значения 000, 001, 100 и 010 трактуются как 0, оставшиеся – как 1. При этом вероятность ошибки снижается. Реальные алгоритмы используют более сложное кодирование, использующее состояния с суперпозицией, а также производят над закодированными последовательностями специальные операции, дополнительно снижающие вероятность появления ошибок.

Декогерентизация играет двоякую роль в квантовых вычислениях. С одной стороны, это крайне нежелательный эффект, приводящий к неверному результату вычислений. По этой причине система кубитов должна быть максимально изолирована от внешней среды. Однако после окончания вычислений необходимо извлечь их результат и представить в классической форме. Для измерения конечного состояния компьютера его приводят во взаимодействие с некоторым устройством. Это устройство измеряет параметры состояния компьютера, вызывая, тем самым, декогерентизацию его состояния. Получается, что процесс потери когерентности для квантового компьютера необходим как финальный процесс всех вычислений.

2. Квантовый компьютер

Опираясь на все вышесказанное, можно составить гипотетическую модель квантового компьютера. Это должно быть устройство, состоящее из набора (регистра) кубитов, на которые можно воздействовать в отдельности, приготовляя нужное начальное состояние всей системы. После инициализации над системой совершаются преобразования, реализующие тот или иной алгоритм, а затем конечное состояние считывается отдельным устройством. Согласно требованиям сохранения когерентности, преобразования должны совершаться достаточно быстро, поэтому их следует доверить классическому компьютеру. Он будет управлять последовательностью электромагнитных импульсов, при помощи которых совершаются все необходимые преобразования, на нем можно будет вводить начальное значение и просматривать ответ.

Итак, положим, общая схема компьютера готова. Исследователям остается выбрать квантовую систему, на основе которой будет создаваться компьютер, и найти ответы на ряд принципиальных вопросов, в том числе:

³ Так называемая «теорема запрета клонирования» (no-cloning theorem), сформулированная в 1982 году, запрещает копирование кубита, находящегося в неопределенном состоянии.

- Какие из квантовых состояний системы выбрать в качестве кубита?
- Как воздействовать на кубит, заставляя его изменять свое состояние; как сохранить это состояние и обеспечить изоляцию от внешней среды?
- Как обеспечить взаимодействие кубитов и считывание результата?

Для систематизации подхода к реализации квантового компьютера используется ряд требований, называемых критериями Ди Винченцо.

2.1. Требования к реализации квантового компьютера

В 1996 году Давидом Ди Винченцо были сформулированы пять минимальных требований, которым должна удовлетворять система, чтобы на ее основе можно было создать квантовый компьютер. Ввиду простоты и логичности, эти требования часто используются теоретиками и экспериментаторами для оценки правильности и перспективности своих исследований.

I. Для проведения вычислительных операций и хранения данных необходимо наличие точного набора квантовых состояний, формирующих кубит; также система должна быть легко масштабируема.

II. Должна существовать возможность поместить как отдельный кубит, так и весь регистр в определенное начальное состояние.

III. Параметры системы должны позволять реализацию универсального набора двухкубитовых квантовых вентилей (gates).

IV. Кубиты должны быть достаточно изолированы от внешней среды и иметь сравнительно большие времена когерентности (значительно превышающие время выполнения отдельной квантовой операции).

V. Необходимо иметь возможность считывания полученной после вычислений информации.

VI. (*). Для реализации квантового компьютера также следует разработать для системы алгоритм квантовой коррекции ошибок. Вполне возможно, что свойства системы позволяют упростить стандартные алгоритмы или сделать их более эффективными. (Это требование изначально не входило в набор критериев Ди Винченцо).

Эти критерии, сформулированные достаточно строго, требуют некоторых пояснений.

2.2. Регистр кубитов

Создание одного кубита и целого регистра – технически совершенно разные задачи. В последнем случае, кроме контроля за состоянием нескольких кубитов (скажем, электронов со спином \downarrow или \uparrow), необходимо еще следить за их взаимодействием. Это, например, порождает проблему пространственной организации системы и межкубитных связей: подобно локальным вычислительным сетям, объединяющим персональные компьютеры, кубиты могут быть объединены по схеме «каждый с каждым», «только с ближайшим соседом», «звездочкой» или кольцом. Наконец, в некоторых схемах предлагается осуществлять взаимодействие через посредника, например, спин третьего электрона.

Что касается размера регистра, то утверждается [11], что компьютер, состоящий из сотни кубитов, способен рассчитать электронные орбитали небольшого атома с большей точностью, нежели любая современная программа на классическом компьютере. Но ранее упомянутая задача о разложении 400-значного числа на простые множители потребует регистр в несколько тысяч кубитов, что сделает систему невероятно сложной.

Наконец, свой вклад в размер регистра вносят требования алгоритмов коррекции ошибок. Существующие алгоритмы требуют для обеспечения безошибочной работы одного кубита свыше девяти (!) дополнительных кубитов поддержки. При восстановлении значения основного кубита состояния девяти вспомогательных оказываются безнадежно испорченными и требуют переинициализации. Реализация таких алгоритмов может потребовать увеличения размеров системы на порядок и более. Как контролировать такие огромные квантовые системы, непонятно, но пока этот вопрос не слишком актуален – еще не реализованы даже системы из десяти кубитов. Можно предположить, что гигантские квантовые компьютеры в будущем будут управляться небольшими, но тоже квантовыми устройствами.

2.3. Управление состоянием кубита

Первое, что необходимо сделать до начала вычислений – провести инициализацию, приготовить начальное состояние системы. Если придерживаться идеи инкапсуляции квантовых вычислений, то есть когда начальное значение и ответ представляются в классической форме, а смешанные состояния используются только в процессе счета, то это означает, что при инициализации часть кубитов надо оставить в основном состоянии, а часть перевести в возбужденное. Наиболее логичный способ это сделать состоит в следующем: вначале все кубиты регистра помещают в основное состояние, а затем некоторые кубиты переводятся в возбужденное состояние при помощи селективного воздействия.

Если реализация системы кубитов такова, что состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ обладают различной энергией, то обеспечить основное состояние можно, понизив температуру системы, так, чтобы выполнялось соотношение

$$k_B T \ll \Delta E_{12}. \quad (5)$$

Если не выполнить это условие, кубиты будут находиться в смешанных состояниях. Таким образом, для многих предлагаемых схем реализаций необходимо наличие низких температур; обычно это температуры порядка $10-100\text{ мК}$.

Способ избирательного доступа к определенному кубиту зависит от системы. Предположим, что ее конструкция такова, что можно управлять состоянием одного кубита, не меняя состояния соседних. Тогда, чтобы изменить основное состояние выбранного кубита, необходимо приложить к нему внешнее воздействие, частота которого совпадала бы с резонансной частотой перехода f_{12} (это может быть, например, микроволновое излучение). В этом случае заселенности уровней кубита начнут осциллировать с некоторой частотой (называемой частотой Раби), и, меняя длительность импульса⁴, можно поместить кубит в желаемое состояние.

2.4. Считывание конечного результата

После окончания процесса вычислений регистр кубитов находится, в общем случае, в некотором состоянии, являющимся интерференцией суперпозиций состояний отдельных кубитов. На следующем шаге мы должны измерить это состояние и представить его в классической форме – в двоичном виде. Возьмем для простоты один кубит. Если он находился на момент окончания измерений в состоянии $|1\rangle$, то это состояние можно будет наблюдать, скажем, по флюоресценции. Если он был в состоянии $|0\rangle$, то флюоресценции не будет. Наконец, если он находился в состоянии суперпозиции $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, то процесс измерения приведет к коллапсу волновой функции в одно из двух состояний, и мы увидим или не увидим сигнал на регистрирующем приборе с вероятностями $|c_1|^2$ и $|c_0|^2$ соответственно.

Поскольку считывающее устройство непосредственно взаимодействует с кубитами, состояния измеряемой системы и измерителя неизбежно «запутываются» – состояние совокупности этих двух систем становится запутанным (entangled) в квантовомеханическом смысле (см. конец пункта 1.1). Такое поведение квантовых систем сильно усложняет разработку измерительных схем для больших регистров; вопросы

⁴ Более подробно об управляющих импульсах рассказывается в разделе 4.3.

квантовых измерений рассматриваются в рамках специальных теорий [14]. Мы лишь отметим существование двух принципиальных способов измерений – так называемые «сильное» и «слабое» измерения. В первом случае измерительный прибор сильно взаимодействует с системой, поэтому должна существовать возможность отключить его на время вычислений. Если же измеритель слабо взаимодействует с кубитами, в таком отключении нет необходимости, но в этом случае для получения точного результата может потребоваться усреднение (по ансамблю одинаковых кубитов или по нескольким вычислениям).

2.5. Декогерентизация в реальном кубите

Как было ранее отмечено, для избежания ошибок в вычислениях темп вычислительного процесса должен на несколько порядков превышать скорость потери когерентности квантовой системы. Теоретики утверждают, что это соотношение должно быть следующим:

$$\tau \Omega_{12} > 10^4, \quad (6)$$

τ – время когерентности, Ω_{12} – рабочая частота компьютера. Так как в системе обычно присутствуют несколько механизмов декогерентизации, каждый со своим характерным временем, а частоты выполнения унитарных операций различны для разных вентилях, то для оценки «жизнеспособности» системы в формулу (6) следует подставлять τ , соответствующую самому сильному механизму декогерентизации, а частоту – самой медленной логической операции.

Процессы декогерентизации удобнее классифицировать не по причине, вызывающей потерю когерентности, а по тому, как эта потеря проявляется. С этой точки зрения выделяют процессы, ведущие к диссипации энергии и потере фазы волновой функции.

К диссипации энергии в кубите приводит обмен энергией между системой и внешней средой. В результате кубит, основное состояние которого обычно более энергетически выгодно, рано или поздно в него переходит, отдавая часть энергии окружению (например, испуская фотон). Также к распаду возбужденного состояния может привести межкубитовое взаимодействие. Несмотря на то, что этот процесс оказывает разрушительное влияние на систему на этапе вычислений, он может быть полезным для первоначальной инициализации – подождя определенное время, можно с уверенностью утверждать, что регистр кубитов перешел в состояние $|00\dots 0\rangle$. Сохранение этого состояния обеспечивается условием (5). Обычно время процесса диссипации (время жизни возбужденного состояния) обозначают при обсуждении декогерентизации как T_1 .

Второй тип декогерентизации – сбой фазы волновой функции кубита. Сдвиг фазы на произвольный угол θ изменяет волновую функцию чистого состояния кубита $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ на функцию

$$|\psi_{shifted}\rangle = c_0 e^{-i\theta/2} |0\rangle + c_1 e^{i\theta/2} |1\rangle. \quad (7)$$

Для кубитового регистра этот эффект еще больше заметен. Если скачкам фазы подвержены n кубитов, то в показателях экспонент формулы (7) появится множитель n , и во столько же раз, соответственно, возрастет темп декогерентизации.

Если записать матрицу плотности, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, то мы увидим, что фазовый сдвиг будет входить лишь в ее недиагональные элементы. Это означает, что сбой фазы не сопровождается изменением энергии. Во многих системах сбой фазы является доминирующим процессом декогерентности. Его характеризуют временем T_2 .

В следующем разделе обсуждаются наиболее развитые направления исследований по созданию квантовых компьютеров. Рассмотрение проводится с точки зрения удовлетворения предлагаемой системой критериям Ди Винченцо. В конце каждого пункта кратко рассказывается о достигнутых в каждой области результатах и сложностях на пути дальнейших исследований.

3. Проекты по реализации квантовых компьютеров

3.1. Ионные ловушки и нейтральные атомы

Одной из реалистичных физических систем, являющихся основой для квантовых компьютеров, может быть набор охлажденных ионов, взаимодействующих с лазерным излучением и находящихся в линейной ловушке [22]. В качестве состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ можно использовать электронные уровни, уровни сверхтонкой структуры или зеемановские уровни, в зависимости от используемого иона. Все эти внутренние состояния могут иметь время когерентности порядка нескольких секунд [11].

Регистр из n квантовых битов получается путем помещения n ионов в радиочастотную ловушку. Обычно потенциал ловушки выбирается так, чтобы ионы образовывали линейную цепочку с промежутками в несколько микрон, возникающими из-за кулоновского отталкивания. Ионы охлаждаются до основного состояния пространственного движения (motional ground state) доплеровским охлаждением (затем

обычно применяются другие особые методы лазерного охлаждения, позволяющие достичь более низких температур⁵).

Однокубитовые операции выполняются с помощью лазерных импульсов, воздействующих на выделенный ион. Также была предложена схема, в которой, вместо множества лазерных пучков, сфокусированных на отдельных ионах, используется один широкий пучок, освещающий всю цепочку. Двухкубитовые операции выполняются с использованием коллективного квантованного движения цепочки (канала, “bus”) ионов. Излучением последовательно воздействуют на определенные ионы в цепочке, затем считывают информацию. Считывание производится при помощи вспомогательного уровня, лежащего выше $|1\rangle$, который обладает сильным спонтанным распадом. Если наблюдается флюоресценция при возбуждении этого уровня, значит, ион был в состоянии $|1\rangle$, не наблюдается – в $|0\rangle$.

Целому ряду научных групп удалось охладить отдельные ионы, некоторым – более одного иона. Остается неясным, сколько ионов должно быть в одной ловушке, и как осуществить взаимодействие ионов из разных ловушек. Необходимо разработать способы построения квантовых вентилях, которые позволят реализовать простые квантовые алгоритмы.

Нейтральные атомы, помещенные в оптическую решетку, также были предложены в качестве кубитов [23]. Решетка образуется тремя стоячими волнами, генерируемыми лазерами под прямыми углами друг к другу. В нее может быть помещено большое количество нейтральных атомов, которые расположатся в «ямах» стоячих волн. Подобные решетки были созданы в нескольких лабораториях, в частности, порядка 10^6 атомов цезия были помещены в двумерную оптическую решетку. Но до сих пор непонятно, как контролировать отдельные атомы в решетке или резонаторе, поскольку потенциалы взаимодействия нейтральных атомов с ловушкой гораздо слабее по сравнению с ионами.

3.2. Квантовые точки

В 1998 году было предложено использовать в качестве кубитов искусственные «атомы» - квантовые точки, созданные на основе полупроводниковых структур. В случае квантовых точек кубитом служит избыточный электрон на одноэлектронной квантовой точке, помещенной в постоянное магнитное поле. Изоляция электрона на точке должна быть достаточно сильной, чтобы возбужденные экситонные и электронные состояния имели гораздо бóльшие энергии, чем зеemanовские спиновые уровни.

⁵ Метод, названный «сизифовым» охлаждением, позволяет получить температуру в несколько десятков микрокельвинов.

Изменять состояние кубита возможно несколькими способами: так, можно воздействовать на спин электрона или сдвигать его ларморовскую частоту при помощи системы электродов, а затем, воздействуя на электрон узкополосным поперечным микроволновым магнитным полем, переворачивать его спин.

Двухкубитовые регистры можно построить, используя взаимодействие электронов на соседних квантовых точках, проистекающее из возможности туннелирования через разделяющий точки барьер. Контролировать это взаимодействие можно также с помощью системы электродов.

Измерение состояния кубита можно произвести при помощи второй квантовой точки, отделенной от основной спино-зависимым («spin-valve») барьером. Электрон протуннелирует через этот барьер, обладая только определенным спином (скажем, $|\uparrow\rangle$), а затем его наличие или отсутствие на вспомогательной квантовой точке можно проконтролировать с помощью одноэлектронного транзистора.

Наконец, рассматриваются варианты использования других степеней свободы электрона на квантовой точке – пространственные координаты (например, наличие электрона на точке 1 соответствует состоянию $|1\rangle$, а электрон на точке 2 соответствует $|0\rangle$), экситонные или электронные уровни – но, возможно, в этих случаях не удастся получить больших времен когерентности.

В настоящее время разработано много способов получения квантовых точек. В нескольких лабораториях удалось создать квантовые точки с контролируемым числом (0-20) свободных электронов [8], а также спаренные квантовые точки. Измеренное для них время когерентности спина электрона составляет порядка $1 \mu s$. Для реализации квантового компьютера на основе квантовых точек необходимо дальнейшее совершенствование полупроводниковых нанотехнологий и высокочастотных методов измерений. Тем не менее, присущая подобным структурам масштабируемость делает их перспективными кандидатами для создания квантового компьютера.

3.3. Сверхпроводящие кубиты

В отличие от рассмотренных ранее возможностей создания квантовых битов, концепция сверхпроводящих кубитов предполагает использование квантовых состояний, являющихся коллективными состояниями макроскопического числа частиц. Одна из таких возможностей – так называемые «поточковые кубиты», получаемые при помощи двух энергетических уровней квантованного потока через сверхпроводящее кольцо с одним или несколькими джозефсоновскими контактами. Для колец микронных размеров,

каждое потоковое состояние получается коллективным движением до 10^9 куперовских пар, создающих ток порядка $1\mu A$.

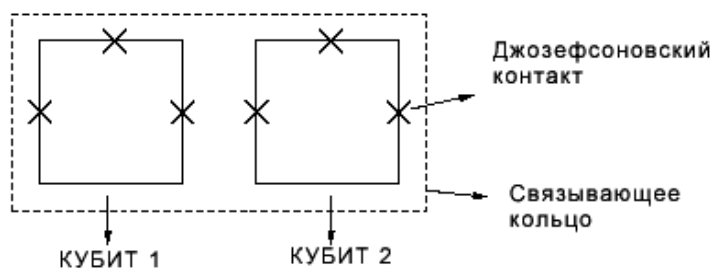


Рис. 2. Схема двухкубитового регистра, основанного на потоковых кубитах.

Однокубитовые операции предполагается производить, прикладывая локальные магнитные поля, изменяющие внешние условия для отдельного кубита, или менять параметры джозефсоновского контакта. Взаимодействие между кубитами может осуществляться посредством индуктивной связи между соседними кольцами. Эту связь можно усилить с помощью дополнительного кольца (см. рис.2). Измерения потокового состояния кубита можно производить с помощью СКВИДа, но связь между измеряющим и измеряемыми кольцами должна быть достаточно слабой для предотвращения возникновения избыточной декогерентности. По этой причине может потребоваться длительное усреднение сигнала (теоретические оценки степени влияния внешних факторов на потоковый кубит можно найти в [9]).

Устройства, основанные на джозефсоновских контактах, должны работать при низких температурах (десятки mK), чтобы основное состояние было занято с вероятностью около 1. Макроскопическая суперпозиция потоковых состояний в двух сверхпроводящих кольцах наблюдалась экспериментально.

Вывод о появлении состояний с суперпозицией делался из расщепления уровней энергии. К настоящему времени по рассмотренной схеме был сделан кубит, измеренное время когерентности для которого составляет несколько микросекунд, при этом частота перехода $f_{1 \rightarrow 2} \approx 16GHz$ [13].

3.4. Твердотельные ЯМР-компьютеры

В рамках этого подхода в качестве квантовых битов предлагается использовать ядерные спины атомов в кристаллической решетке. Согласно предложению, выдвинутому несколькими рабочими группами, квантовый регистр представляет собой одномерную цепочку полужелых спинов, расположенных вдоль оси Z . Расстояние между спинами составляет несколько ангстрем. Вдоль оси Z прикладывается магнитное поле с большим

градиентом (порядка $1 T / \mu m$), из-за чего по-разному сдвигаются ларморовские частоты различных спинов; это дает возможность обращаться к отдельным кубитам.

Если поле в плоскости, перпендикулярной рассмотренному направлению, будет однородным, то весь кристалл будет фактически состоять из набора одинаковых цепочек спинов, каждая из которых является отдельным квантовым компьютером (если только исключить взаимодействие между цепочками).

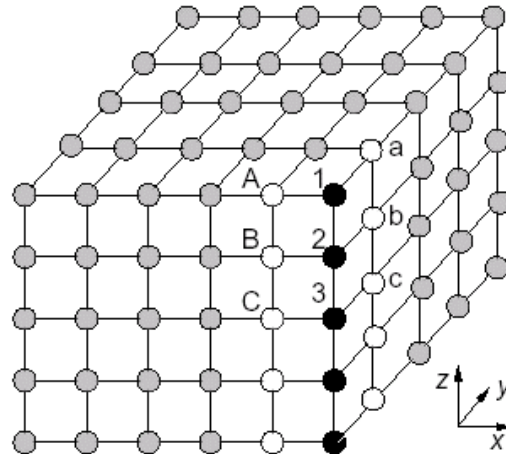


Рис. 3. Модель твердотельного ЯМР-компьютера (для простоты показана кубическая решетка). Каждая из цепочек 1,2,3..., A,B,C..., a,b,c... - отдельное вычислительное звено.

Двухкубитовые операции в этом случае основываются на магнитном диполь-дипольном взаимодействии соседних спинов в цепочке. Гамильтониан взаимодействия имеет вид

$$H_{i,j} \propto \frac{I_z^i I_z^j}{(|j-i|a)^3},$$

где a – расстояние между соседними ядрами.

Взаимодействие спинов в соседних цепочках (т.е. с одинаковыми ларморовскими частотами) имеет несколько другой вид, и его можно в значительной степени ослабить при помощи определенных импульсов, хорошо известных в рамках техники ЯМР.

Существует также спаривание спинов, расположенных по диагонали, но этот эффект можно подавить, используя специальные кристаллы, например, флюорапатит,

$Ca_5F(PO_4)_3$, где в качестве кубитов выступают спины ядер ^{19}F [21].

Начальное состояние готовят, охлаждая образец до температуры порядка mK . Такие температуры, возможно, трудно будет поддерживать из-за присутствия в системе множества внешних радиочастотных импульсов. Считывать информацию помогает то обстоятельство, что в системе присутствует огромное число одинаковых вычислительных цепочек (свыше 10^7 даже для небольших кристаллов).

Главный источник декогерентизации в такой системе – остаточное дипольное взаимодействие между спинами различных ядер.

На данный момент хорошо развита техника выращивания качественных кристаллов, а также методика проведения измерения состояний в них, но реальных кубитовых структур пока не получено. Одной из главных технологических сложностей является изготовление микромагнитов, которые давали бы большое по величине однородное поле в плоскости и сильный градиент по третьей оси.

3.5. Примеси в полупроводниках

Этот способ реализации был предложен в 1998 году Б.Кейном. В схеме Кейна в качестве кубитов выступают ядерные спины донорных атомов ^{31}P , расположенных в виде матрицы внутри кремниевой подложки, которая находится в постоянном магнитном поле, перпендикулярном ее поверхности.

Атом фосфора внутри кремния является донором при комнатной температуре, а при низких температурах (0.1 К) его электрон слабо связан с атомом. С помощью электрода А, расположенного сверху на расстоянии $\sim 200 \text{ \AA}$, можно отодвинуть электрон от ядра, ослабив спиновое взаимодействие. В результате изменяется разница в энергии между состояниями $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ спина ядра, и дальше можно контролировать направление спина при помощи радиочастотных импульсов.

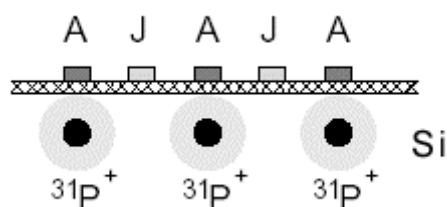


Рис. 4. Квантовый компьютер по схеме Кейна (в разрезе).

Двухкубитовые регистры из двух соседних атомов базируются на непрямом механизме спаривания ядер через электроны. Отрицательное напряжение, приложенное на затворе J, отталкивает электроны и уменьшает перекрытие их волновых функций. Таким образом можно контролировать взаимодействие между кубитами.

Для измерения состояния кубита был предложен оригинальный двухступенчатый процесс. Для определения состояния одного ядерного спина (i) используется также и соседний (j). Вначале напряжения на затворах изменяются таким образом, чтобы нижним энергетическим состоянием двух электронных спинов стало синглетное состояние $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$, а не $|\downarrow\downarrow\rangle$, как было во время проведения вычислений. Если

ядерный спин i находится в состоянии $|0\rangle$, то электронная система эволюционирует в синглетное состояние, иначе они останутся в метастабильном состоянии $|\downarrow\downarrow\rangle$. Затем, сдвигая напряжение на электроде А, можно прикрепить оба электрона к одному атому фосфора, но только в том случае, если они находились в синглетном состоянии, а ядерный спин i , соответственно, в состоянии $|0\rangle$. Перемещение заряда контролируется с помощью одноэлектронного транзистора.

Безусловно, наличие в системе затворов А и J, а тем более, одноэлектронного транзистора, должно делать определенный вклад в процесс декогерентизации в системе из-за флуктуаций напряжения на электродах.

На сегодняшний день изготовление вычислительной матрицы по схеме Кейна невозможно по ряду технологических причин; в частности, требуется высокая точность изготовления системы электродов и чистота кремниевой подложки. Но хорошая масштабируемость и общая «элегантность» схемы Кейна подогревают интерес к дальнейшим разработкам, как технологического, так и теоретического характера (см., например, [10]).

3.6. Жидкостные ЯМР-компьютеры

При работе с ядерными спинами наибольший интерес применительно к проблеме квантовых компьютеров представляют ядра, обладающие полным спином $1/2$, так как они имеют два дискретных собственных состояния. К ним относятся, в частности, ядра ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . Ядра с нулевым спином не обнаруживаются с помощью ЯМР, а ядра с бóльшим спином обладают малым временем когерентности.

В качестве n -кубитового регистра было предложено использовать молекулу, находящуюся в растворе, n ядер атомов можно отличить друг от друга благодаря разным ларморовским частотам. Даже одинаковые атомы, находящиеся в одной молекуле, могут иметь разную ларморовскую частоту из-за химического сдвига, обусловленного различиями во внутримолекулярных связях (в магнитном поле величиной 10Тл , при ларморовской частоте порядка 100MHz химический сдвиг может составлять $1-10\text{KHz}$). Взаимодействие между ядерными спинами, как и в случае твердотельных ЯМР-компьютеров, магнитное диполь-дипольное. Однокубитовые операции выполняются при помощи воздействия переменным магнитным полем, в двухкубитовых дополнительно используется межспиновое взаимодействие.

В предложенной схеме существует много различных механизмов декогерентизации и релаксации спинов. Влияние некоторых из них можно ослабить, например, избегая

включения в молекулу ядер со спином $> 1/2$, можно избавиться от воздействия на кубиты ее квадрупольного момента.

На сегодняшний день в данной области исследователям удалось добиться наибольших результатов. Первые прототипы жидкостных ЯМР-компьютеров были созданы в 1997 году. В них использовались ядерные спины двух атомов водорода – в молекуле 2,3-дибромотиофена, а также три спина – одним в атоме водорода и двух в изотопах углерода ^{13}C в молекуле трихлорэтилена [12]. В последние годы квантовые операции были проведены в жидкостях с числом спинов-кубитов $n=3,5,6$ или 7, а также над системой из двух кубитов в жидком кристалле [11]. В числе других операций экспериментально осуществлены алгоритм Гровера поиска данных, квантовое фурье-преобразование и квантовая коррекция ошибок.

Одним из преимуществ такого компьютера является то, что все операции проводятся не над одним спином, а над идентичными спинами всех молекул жидкости. Затем считывание конечного результата также производится со всего ансамбля молекул (сигнал одного ядерного спина слишком слаб, чтобы его можно было измерить). Такой компьютер получил название ансамблевого (bulk-ensemble QC). Время декогерентизации жидкостного ЯМР-компьютера может составлять несколько секунд, что превосходит время выполнения логической операции при помощи техники ЯМР. При этом, рабочие температуры фактически комнатные.

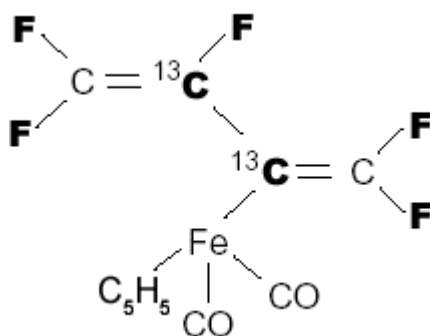


Рис. 5. Сложная органическая молекула, использованная в качестве семикубитового регистра [11].

Из недостатков подобных реализаций можно отметить сложность создания полномасштабного кубитового регистра. ЯМР-компьютеры на молекулах органической жидкости не могут иметь больше двух-трех десятков кубитов, в частности, из-за ограниченной чувствительности ЯМР-спектрометра. Кроме того число кубитов с хорошо различающимися резонансными частотами в одной молекуле ограничено из-за быстрого усложнения энергетического спектра и конечной ширины отдельных уровней.

4. Электронная система над поверхностью криодиэлектрика

Так или иначе, для всех рассмотренных выше вариантов реализации квантового компьютера существуют теоретические и практические барьеры разного характера, которые необходимо преодолеть, прежде чем будет создано реальное полномасштабное устройство. Некоторые аспекты рассмотренных схем требуют создания новых, либо существенного улучшения уже существующих технологий. Между тем, в последние годы был предложен еще один способ создания квантового компьютера. Он основывается на использовании в качестве кубита двух нижних энергетических состояний электрона, находящегося над поверхностью криодиэлектрика. Такие электроны были названы «левитирующими» [2].

Поведение электронов над поверхностью пленки жидкого гелия, а также над кристаллами H_2 , D_2 и Ne , изучалось уже достаточно давно [1,2,3,7], но при этом исследовалась вся совокупность большого числа свободных зарядов. Такая двумерная система обладает, в частности, большой подвижностью ($\mu \sim 10^5 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$). Для создания же квантового регистра необходимо ограничить в некоторой своей области каждый отдельный электрон.

Согласно теоретическим оценкам [4], система электронов, «левитирующих» над поверхностью диэлектрика с $(\epsilon - 1) \ll 1$, может рассматриваться как набор кубитов, над которыми достаточно просто могут осуществляться необходимые операции.

Предполагаемое время когерентности составляет порядка $10^{-5} - 10^{-7}$ с.

4.1. Энергетический спектр электрона

Электрон, находящийся вблизи поверхности диэлектрика, притягивается к ней силами электростатического изображения. Однако внутрь он проникнуть не может из-за потенциального барьера на границе диэлектрика, который составляет для разных веществ от нескольких десятых до нескольких единиц эВ.

Расчет, проведенный методом изображений, показывает, что заряд взаимодействует с поверхностью с силой

$$F(z) = -\frac{e^2}{4z^2 \epsilon_1} \cdot \frac{\epsilon - \epsilon_1}{\epsilon + \epsilon_1},$$

а энергия взаимодействия равна

$$W(z) = \int_z^{\infty} F(h) dh = -\frac{e^2}{4z\epsilon_1} \cdot \frac{\epsilon - \epsilon_1}{\epsilon + \epsilon_1},$$

где ось z направлена по нормали от поверхности, ϵ - диэлектрическая проницаемость диэлектрика, ϵ_1 - диэлектрическая проницаемость газа, окружающего электрон. В эксперименте [1], когда плотность молекул газа n была $< 10^{20}$, ϵ_1 полагалась равной 1. Величина ϵ близка к единице (например, для жидкого ${}^4\text{He}$ $\epsilon = 1,0572$). При этих условиях

$$W(z) = -\frac{e^2}{4z} \cdot \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1}.$$

Таким образом, потенциал сил изображения

$$\varphi(z) = -\frac{e}{4z} \cdot \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} = -\frac{Qe}{z}, \quad (8)$$

и электрон оказывается в потенциальной яме (рис.6), ограниченной с одной стороны гиперболическим потенциалом, а с другой стороны – барьером, который можно считать бесконечно большим, $\varphi(z) = +\infty$ при $z \leq 0$.

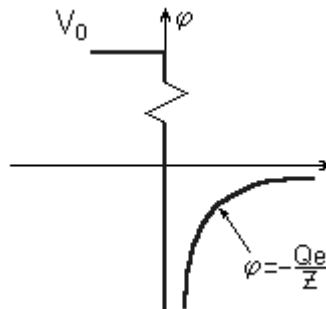


Рис. 6.

Спектр энергетических уровней электрона в такой потенциальной яме

$$E_n = -\frac{mQ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad (9)$$

а среднее расстояние от электрона до поверхности диэлектрика на n -м энергетическом уровне составляет

$$\langle z_n \rangle = \frac{3}{2} n^2 \frac{a_0}{Q},$$

где $a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0,529 \text{ \AA}$ - боровский радиус.

У многих распространенных диэлектриков величина $(\epsilon - 1)$ заметно отличается от 1 в большую сторону (например, тефлон – 2,04, кварц – 3,2, алмаз – 5,5). В этом случае

$\langle Z_1 \rangle \sim a_0$, и электроны оказываются привязанными к отдельным атомам или к дефектам поверхности; тем самым получается картина обычной электризации. Напротив, для таких диэлектриков, как конденсированные водород, гелий или неон, выполняется условие $(\epsilon - 1) \ll 1$, что дает $\langle Z_1 \rangle \gg a_0$ (так, $Q_{Ne} = 0.031$ при $T = 1 K$), и электрон локализуется далеко от поверхности ($\langle Z_1 \rangle \sim 30 - 150 \text{ \AA}$). Вследствие этого электрон имеет возможность свободно перемещаться вдоль поверхности.

На близких расстояниях от поверхности потенциал $\varphi(z)$ отклоняется от (1), но мы не будем этого учитывать, тем более что $\langle Z_1 \rangle \gg a_0$ (подробный расчет приведен в [1]).

Энергетические состояния электрона E_1 и E_2 и предлагается использовать в качестве $|0\rangle$ и $|1\rangle$ для квантовых вычислений. Дальнейшее изложение проводится для зарядов над поверхностью гелия, а затем обсуждаются особенности, связанные с использованием других криодиэлектриков.

4.2. Возбуждение электрона

Если кинетическая скорость движения электронов вдоль поверхности $E_k \ll (E_2 - E_1)$ и $E_k \ll kT$, то электроны почти все время находятся в основном состоянии с энергией E_1 . Для того, чтобы перевести электрон в возбужденное состояние, можно воздействовать на него лазером, частота излучения которого является резонансной ($\hbar\omega = E_2 - E_1$). Расстояние между уровнями контролируется при помощи постоянного электрического поля \vec{K}_z , перпендикулярного к поверхности. Возникает поправка к потенциальной энергии, $U_s = -eK_z z$, за счет которой уровни сдвигаются (Штарк-эффект). При этом поправки к уровням энергии в первом порядке теории возмущений будут равны

$$\Delta E_n = eK_z \langle z_n \rangle,$$

а картина потенциала изменится (рис.7). На бесконечности (далеко от электрона) потенциал линейно зависит от координаты z .

Экспериментально было обнаружено, что при частотах перехода $f_{1 \rightarrow 2} = 130 - 220 GHz$ штарковский сдвиг частоты составляет приблизительно $1 GHz/(V/cm)$. Возможность перестройки спектра позволяет существенно облегчить процесс доступа к кубитам и проведение измерений.

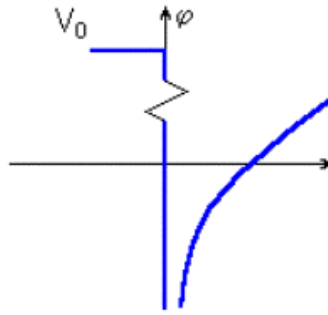


Рис.7.

К сожалению, наблюдавшаяся в эксперименте (см. [4]) ширина линий резонансного поглощения составляла $\sim 1\text{GHz}$ при температуре $T > 1.2\text{K}$. Темп декогерентизации получается слишком высоким; преобладающий механизм в этом случае – рассеяние электронов на окружающих его атомах газообразного гелия. При понижении температуры плотность паров гелия экспоненциально быстро падает, почти сравнявась с нулем при 0.01K .

4.3. Создание кубитов

Чтобы создать набор контролируемых кубитов, в работе [4] предлагается поместить под поверхностью гелия электроды (см. рис.8). Каждый микроэлектрод призван удерживать отдельный заряд; форма потенциала, безусловно, зависит от формы и размеров электрода, а также от приложенного напряжения. Это напряжение, также как и наличие прижимающего поля \vec{K}_z , сдвигает уровни электрона и изменяет расстояние между ними. Таким образом, кроме пространственного ограничения, система электродов играет еще и управляющую роль.

Теперь, подстраивая при помощи изменения потенциала на конкретном электроде резонансную частоту перехода $f_{1 \rightarrow 2}$, и воздействуя внешним излучением, можно управлять состоянием кубита, реализовав, по сути, однокубитовый вентиль (single-qubit gate).

Известно, что в двухуровневой системе под воздействием резонансного поля с амплитудой E_{RF} возникают осцилляции населенностей уровней $|0\rangle$ и $|1\rangle$ с частотой Раби,

$$\Omega_{12} = eE_{RF} \langle 2|z|1\rangle / \hbar. \quad (10)$$

Если длительность воздействия составляет π/Ω_{12} (так называемый π -импульс), то система, находившаяся в состоянии $|0\rangle$, перейдет в состояние $|1\rangle$ (импульс в два раза меньшей длительности, например, «приготовит» состояние $(|0\rangle - i|1\rangle)/\sqrt{2}$). По порядку величины $\Omega_{12} \approx 1\text{GHz}$ для амплитуды возбуждающего поля 1В/см , а длительность π -

импульса составляет несколько наносекунд. При помощи разных импульсов можно приготовить необходимое начальное состояние кубита.

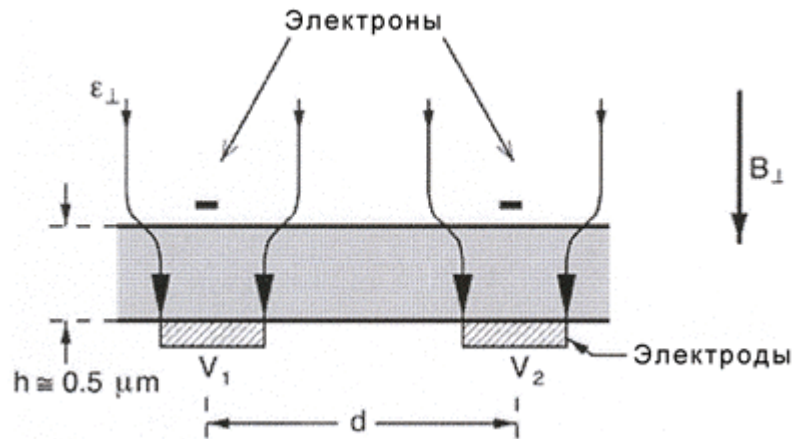


Рис.8.

4.4. Время когерентности. Электрон-риплонное рассеяние

Основной механизм взаимодействия электрона с внешней средой при температурах ниже 1К – рассеяние на риплонах, колебания поверхности гелия. Эти колебания являются капиллярными волнами, описываемыми дисперсионным уравнением

$$\omega^2(k) = gk + (\sigma/\rho)k^3,$$

$\rho = 0.145 \text{ г/см}^3$ и $\sigma = 0.37 \text{ эрг/см}^2$ – плотность и поверхностное натяжение сверхтекучего гелия, g – ускорение свободного падения. Гамильтониан электрон-риплонного взаимодействия

$$H_{er} = e \hat{E} \delta$$

($\delta = \delta(\vec{r}, t)$ – изменение высоты поверхности гелия, \vec{r} – координата электрона в плоскости), \hat{E} – оператор, характеризующий перпендикулярное поверхности электрическое поле, состоящее из внешнего поля и поля заряда-изображения. Величина последнего составляет $10^2 - 10^3 \text{ В/см}$.

Типичные значения k для риплонов в системе не превышают $5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ (поэтому в законе дисперсии может быть опущен гравитационный член); таким образом, частоты риплонов $\omega_r < 4 \cdot 10^{-3} \text{ К}$, и это означает, что даже при сотых долях градуса в системе присутствуют колебания. Среднеквадратичное значение δ при этом равно

$$\delta_T = \left(\frac{k_B T}{\sigma} \right)^{1/2} \approx 10^{-9} \text{ см}.$$

Для электрона как двухуровневого кубита важны два аспекта взаимодействия с окружающей средой и риплонами в частности. Во-первых, это рассеяние между уровнями E_1 и E_2 , а во-вторых, сбой фазы волновой функции.

В первом из этих процессов изменяется энергия, поэтому, согласно п. 2.5, соответствующее время когерентности можно обозначить как T_1 . Существует несколько основных причин такого рассеяния.

Простое рассеяние $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ с испусканием высокоэнергетического риплона запрещено по причине невыполнения закона сохранения импульса. Но для электрона, который может свободно двигаться вдоль поверхности, возможно рассеяние на присутствующих в системе низкоэнергетических риплонах, показанное на рис.9а. Поскольку энергии риплонов малы, можно считать это рассеяние упругим. Электрон передает небольшую часть энергии риплону с волновым вектором $k \sim 10^6 \text{ см}^{-1}$, при этом переходя в состояние, соответствующее $|0\rangle$, но с большой кинетической энергией внутриплоскостного движения $\hbar^2 k^2 / 2m_e \approx E_2 - E_1$. Время жизни электрона на возбужденном уровне, связанное с этим механизмом, составляет порядка 10^{-5} с для частоты перехода 120 GHz [4].

Механизм однориплонного рассеяния возбужденного состояния может быть полностью подавлен при помощи магнитного поля, направленного по нормали к поверхности. Действительно, в присутствии магнитного поля энергетический спектр электронов в плоскости превратится в дискретный набор уровней Ландау, расстояние между которыми $\approx \hbar \omega_c$, где $\omega_c = eB_{\perp} / mc$ – циклотронная частота. В такой ситуации упругое рассеяние на одном риплоне запрещено, поскольку расстояние от уровня $|1\rangle$ до ближайшего снизу уровня увеличилось, и выполнение обоих законов сохранения в процессе электрон-риплонного взаимодействия невозможно (рис. 9б).

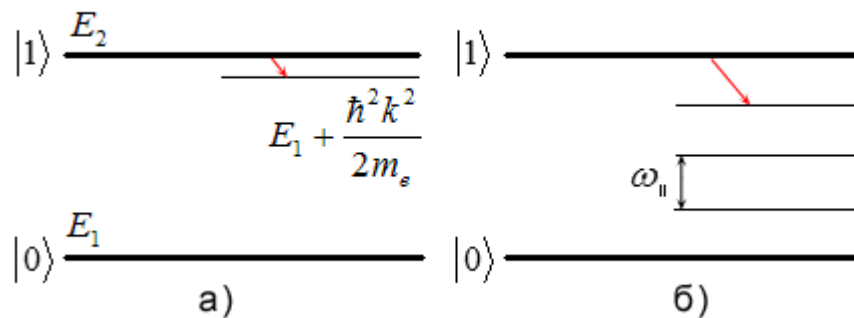


Рис.9. Электрон-риплонное рассеяние.

Однако, в рассматриваемой системе нет необходимости использовать магнитное поле – к квантованию энергии в плоскости xu приводит наличие нижнего электрода. Картина энергетического спектра изменяется (рис. 9б): находясь на основном или возбужденном уровне, электрон может обладать также и определенной кинетической энергией внутриплоскостного движения, но кинетическая энергия может принимать только дискретные значения. Для предлагаемой в [5] геометрии расстояние между уровнями внутриплоскостного движения составляет $\omega_{\parallel}/2\pi \approx 1.0K$ для прижимающего поля 500 В/см (напомним, что частота перехода из основного в возбужденное состояния составляет в единицах температуры порядка $8K$).

Итак, большое расстояние между уровнями энергии электрона приводит к невозможности однориплонного распада, но возможен процесс рассеяния с участием нескольких риплонов. Наиболее вероятным будет процесс двухриплонного рассеяния. Энергия, выделившаяся при переходе электрона на более низкий уровень, расходуется на образование двух риплонов, распространяющихся в противоположных направлениях. В этом случае возможно выполнение закона сохранения импульса. Вероятность двухриплонного распада $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ меньше вероятности перехода, показанного на рис. 9б (он тоже может быть двухриплонным), поэтому последний оказывает большее влияние на время T_1 . Временная оценка этого процесса дает около 10^{-3} с [5].

Помимо взаимодействия с риплонами, существуют и другие источники декогерентизации с изменением энергии. Важным механизмом релаксации оказывается рассеяние электрона на фононах в гелии. Величина энергии, передающаяся фонону, составляет $\hbar\omega_{\parallel}$; при этом в процессе рассеяния участвуют фононы, распространяющиеся перпендикулярно поверхности гелия. Теоретики выделяют несколько механизмов взаимодействия электронов с фононами, в том числе рассеяние на индуцированных фононами изменениях высоты поверхности гелия и изменение потенциала изображения вследствие локальных изменений плотности (и, соответственно, диэлектрической проницаемости) гелия. Время релаксации в обоих процессах составляет $\sim 10^{-4}\text{ с}$. Уменьшить темп рассеяния можно, увеличив прижимающее поле или изменив форму ограничивающего потенциала, так, чтобы увеличилась частота перехода ω_{\parallel} .

Среди других источников декогерентности в системе следует особо выделить помехи, создаваемые флуктуациями напряжения на электродах. Надо отметить, что в предлагаемой в [4,5] геометрии электроны находятся достаточно далеко от различных управляющих элементов, поэтому данный механизм не является главным фактором,

ограничивающим время когерентности. Оценка [4] дает время когерентности, связанное с шумами на электродах, около $10^{-4} c$, что вполне удовлетворительно.

Наконец, необходимо упомянуть процесс простого спонтанного распада $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ с излучением фотона. Для этого воспользуемся известной формулой для вероятности дипольного излучения [19]:

$$T_1^{sp} = \left(\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{12}|^2 \right)^{-1} \approx 0.2 \text{ сек}, \quad (11)$$

где $d_{12} = e a_0 / Q$ – дипольный момент электрона. Этот процесс настолько маловероятен по сравнению с риплонным рассеянием, что его вклад в декогерентизацию можно не учитывать.

Второй принципиально другой аспект взаимодействия с окружением – сбой фазы волновой функции состояния кубита, характеризующийся временем T_2 .

Время когерентности электрона T_2 определяется несколькими процессами. Учет рассеяния на присутствующих в системе риплонах дает $T_2 \sim 10^{-2} c$ для температуры 10 мК [5]. Флуктуации потенциала на ограничительном электроде тоже приводят к изменениям расстояния между уровнями энергии и, следовательно, к изменениям фазы волновой функции. Оценки [5] показывают, что этот процесс происходит со скоростью $10^4 c^{-1}$.

Экспериментально наблюдаемый результат влияния риплонов на кубит – уширение линии резонансного поглощения микроволнового излучения электроном. Вместо δ -образного пика в спектре поглощения на частоте $(E_2 - E_1)/\hbar$ получается линия поглощения, полуширина которой определяется суммой обратных времен когерентности и релаксации электрона.

4.5. Двухкубитовые операции и взаимодействие электронов

Кроме однокубитовых, в квантовом компьютере нужно также реализовать и двухкубитовые регистры. Применительно к предложенной схеме это означает, что ограничивающие электроды надо расположить определенным образом, например так, чтобы кубиты образовывали на плоскости пары или целые цепочки.

Взаимодействие электронов, влияющее на их движение по оси z , имеет дипольных характер и определяется выражением

$$\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{e^2 z_n z_m}{d_{nm}^3}. \quad (12)$$

Это взаимодействие присутствует всегда и его нельзя «выключить». Изменяя величину потенциалов электродов, а также воздействуя на пару кубитов импульсами излучения определенной формы, можно, используя кулоновское взаимодействие электронов, осуществлять двухкубитовые операции, например XOR или SWAP. Для реализации последней достаточно воздействовать на систему, находящуюся в состоянии $|\downarrow\uparrow\rangle$, прижимающим полем «треугольной» формы, сначала повышая, затем понижая потенциал V_1 под электроном [4]. После такого воздействия определенной длительности система перейдет в состояние $|\uparrow\downarrow\rangle$.

Здесь необходимо отметить, что подобные теоретические способы проведения квантовых операций, кажущиеся на первый взгляд простыми, на практике могут быть значительно усложнены или изменены по ряду причин. Во-первых, если процесс приготовления начального состояния может быть условно отделен от процесса вычислений, то считывание конечной информации является неотъемлемой частью вычислительного процесса. Это налагает дополнительные условия на совершаемые над системой действия. Затем, как процесс вычислений, так и считывание результата, могут потребовать включения дополнительных кубитов в регистр. Их наличие существенно усложнит изначально простые алгоритмы.

4.6. Считывание информации

Одним из возможных способов считывания результата является «испарение» электронов при помощи приложения к системе обратного электрического поля (рис. 10). В условиях прижимающего поля (рис.7) электроны не могли удалиться от далеко поверхности, а могли лишь занимать одно из низших энергетических состояний в яме. Теперь же один край потенциальной ямы представляет собой барьер конечной ширины, через который возможно туннелирование.

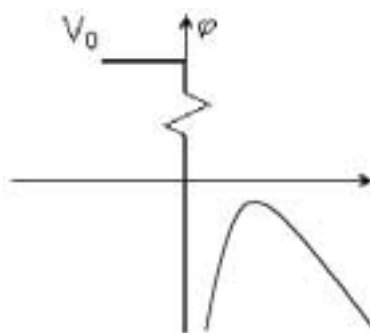


Рис. 10. Вид потенциала для считывания результата.

Очевидно, что электроны будут покидать поверхность за время, которое зависит от того, были ли они в возбужденном или в основном состоянии. Можно выбрать поле таким, чтобы за выбранное время ожидания наружу вылетят лишь электроны, занимавшие состояние $|1\rangle$. Затем на их пути можно поставить пластину (анод), имеющую некую периодическую структуру, которая позволила бы зарегистрировать «прибытие» электрона, который в момент столкновения с пластиной будет иметь вполне определенную кинетическую энергию – порядка нескольких эВ. Таким устройством для считывания мог бы служить мультисканальный детектор, представляющий собой матрицу из электродов, покрытых веществом, в котором электрон вызывает вторичную эмиссию, детектируемую электродом.

Такая схема считывания имеет несколько недостатков. Во-первых, каждый раз, производя эту операцию, мы будем получать отличающиеся результаты. Это связано с различными вероятностными процессами в системе, а также сильно зависит от длительности приложения обратного потенциала и его величины. Поэтому для надежного считывания, так же как и во время вычислений, требуется высокая точность всех проводимых над системой манипуляций, а также максимальная изоляция от внешней среды. Во-вторых, во время приложения обратного поля волновая функция электрона продолжает эволюционировать во времени, что может привести к радикальному ее изменению и невозможности получения правильного результата в масштабе всего регистра кубитов.

Но главным недостатком является разрушение системы кубитов в процессе считывания; помимо технических трудностей, связанных с необходимостью заново готовить начальное состояние квантового регистра, это сильно снизит «рабочую частоту» (clock frequency) компьютера.

Принципиально другой способ, не разрушающий системы кубитов, состоит в использовании одноэлектронных транзисторов (SET), в качестве которых могут выступать сами ограничительные электроды. Точнее, эти электроды должны быть либо заменены на транзисторы, либо структура под поверхностью криодиэлектрика должна включать оба этих устройства.

Одноэлектронный транзистор представляет собой металлический островок, соединенный туннельными переходами с двумя проводниками. Если сопротивление этого островка достаточно мало, то энергия, необходимая для помещения на него избыточного электрона, превосходит kT . Таким образом, если среднее число электронов на островке полуцелое, то ток через транзистор может течь, если же целое – то нет (кулоновская блокада).

В [6] было оценено время когерентности, связанное с флуктуациями потенциала на одноэлектронном транзисторе – около $10^{-5} c$. В то же время, различия в заряде на острове транзистора для двух состояний кубита составляют всего $0.04e$, так что измерение состояния должно проводиться в течение $10^{-8} c$, чтобы не потерять сигнал на фоне дробового шума.

Итак, рассмотренная система электронов над жидким гелием в достаточной степени удовлетворяет набору требований Ди Винченцо, и принципиальных препятствий для реализации квантового бита на основе электронов, левитирующих над поверхностью гелия, нет. Изготовление микроскопической структуры для создания набора кубитов также не выходит за рамки существующих технологий.

Для получения наибольшей рабочей частоты вычислительного устройства необходимо тщательно подобрать все геометрические параметры системы: расстояния между электродами, толщину гелиевого слоя, величины всех напряжений и т.д., одновременно стараясь увеличить времена релаксации и когерентности. Рабочая частота ограничена сверху скоростью выполнения однокубитовых и двухкубитовых операций. Частота операций с одним кубитом по порядку величины совпадает с частотой Раби (10), $\Omega_{12} \approx 1GHz$. Частота двухкубитовых операций определяется дипольным взаимодействием (12) между кубитами и сильно зависит от геометрии и прижимающего поля. Оценки, проведенные в работе [5] для расстояний между электронами $d \sim 1\mu m$, показывают, что двухкубитовые операции ограничивают частоту компьютера величиной $10^7 - 10^8 Hz$, а оценка общего времени когерентности дает $T \approx 10^{-4} c$. Тогда мы получаем $\Omega_{12}T \geq 10^4$, что, в принципе, уже приемлемо для квантового компьютера (см. формулу (6)).

Во время напуска электронов на поверхность гелия следует учитывать, что в каждую из потенциальных ям, создаваемых ограничивающими электродами, может сесть не один, а несколько электронов. Это состояние будет энергетически устойчивым, если электронов в яме будет не слишком много (2-4). Для того, чтобы избежать такой явно нежелательной ситуации, возможно, необходимо уменьшать напряжение на электродах на время процесса напуска. Еще одна трудность, связанная с проникновением в потенциальную яму избыточных электронов – сильное искривление поверхности гелия. В присутствии сильного прижимающего поля даже один электрон заметно прогибает поверхность. Образовавшаяся яма притягивает другие электроны, которые, в свою очередь еще больше увеличивают ее глубину. Это в конце концов приводит к тому, что собравшиеся в ямке электроны проникают внутрь гелия и достигают электрода внутри

небольшого «пузырька». Таким образом, происходит разрушение системы. Такой процесс, конечно, в большей степени характерен для системы свободных электронов над поверхностью, которые могут в больших количествах «стекаться» в место прогиба, но и в случае, когда в одной потенциальной яме оказывается более одного электрона, этот эффект может иметь место. Таким образом, необходимо принимать специальные меры для предотвращения попадания в одну потенциальную яму нескольких электронов.

4.7. Особенности твердых криодиэлектриков

Электронные состояния над гелием на сегодняшний день изучены гораздо лучше, чем над поверхностями других криодиэлектриков. Это связано, в первую очередь, с простотой использования жидкого гелия в эксперименте.

В отличие от гелия, кристаллический диэлектрик имеет твердую поверхность, что исключает проникновение электронов на нижний электрод. Это же обстоятельство делает систему чувствительной к примесям посторонних веществ: если в гелии присутствующая в системе грязь просто «тонула», то здесь она просто будет собираться на поверхности диэлектрика. Также при работе с криокристаллами нужно учитывать, что форма их поверхности сильно зависит от условий роста. Неконтролируемый рост кристалла может привести к образованию сильных неровностей, влияющих на пространственное распределение левитирующих электронов, поскольку они находятся сравнительно недалеко от поверхности (см. таблицу 1.). К преимуществам криокристаллов можно отнести устойчивость к механическим вибрациям и возможность работать при более высоких, по сравнению с гелием, температурах.

Среди криодиэлектриков, использованных ранее [1,3,7] для наблюдения левитирующих электронов, следует выделить кристаллы неона, водорода и дейтерия. Некоторые параметры этих веществ приведены в таблице 2, где для сравнения приведены также значения этих параметров для гелия.

вещество	$Q, \times 10^3$	T_3, K	$P_3, \text{Тор}$	$f_{1 \rightarrow 2}, \text{ТГц}$	$z_1, \text{Å}$
жидк. ^4He	6.9			0.116	115
тверд. Ne	27	24.6	324	1.77	33
тверд. H_2	32	14.0	54	2.49	25
тверд. D_2	36	18.7	128.5	3.15	23

Таблица 2. Параметры криодиэлектриков (для твердых тел приведены давление и температура, соответствующие тройной точке; частота перехода дана для случая без прижимающего поля)

Схема реализации кубита в случае использования твердых криодиэлектриков такая же, как и в случае с гелием. Отдельного рассмотрения требуют только вопросы декогерентизации.

Прежде всего надо отметить, что резонансные частоты электронов над криокристаллами на порядок превосходят соответствующую частоту для гелия. Соответственно, можно ожидать увеличения рабочей частоты до ≈ 10 ГГц, что, в соответствии с соотношением (6), позволит ослабить ограничения на темп декогерентизации.

В случае «жидкой» подложки основным источником декогерентизации является электрон-риплонное взаимодействие, т.е. возмущения, вызванные колебаниями поверхности гелия. Если же поверхность твердая, то риплоны в системе отсутствуют, а основной вклад во время когерентности дают объемные колебания, приводящие, в частности, к модуляции диэлектрической проницаемости в объеме диэлектрика. В работе [20] приведены оценки времени релаксации T_1 свободного электрона, находящегося на основном уровне и имеющего кинетическую энергию горизонтального движения порядка $0.2 - 0.5$ К (температура в системе при этом составляет 1 К). Для водорода T_1 составляет $1.5 \cdot 10^{-7}$ с, для неона $4 \cdot 10^{-3}$ с. Существенно более сильное рассеяние в водороде связано с его меньшей плотностью, т.е. с большей амплитудой нулевых колебаний [20]. Это обстоятельство делает неон более предпочтительным для использования. Однако, следует учитывать, что в кубите движение электрона вдоль поверхности квантовано, расстояние между уровнями составляет порядка 1 К (см. пункт 4.4), и время T_1 должно быть выше, чем приведенные оценки; поэтому водород, вероятно, все же может быть использован для конструирования кубита.

Максимальное время жизни электрона на уровне $|1\rangle$ можно оценить по формуле (11). Оно получается около 10^{-3} с, существенно меньше, чем для гелия. Оценок времени дефазировки волновой функции T_2 для случая криокристаллов не проводилось. Вклад в T_2 , связанный с флуктуациями напряжения на ограничительных электродах имеет такой же порядок, как и для гелия, а именно $\sim 10^{-4}$ с. Ожидается, что полное время когерентности электрона над поверхностью неона составит $T \approx 10^{-4} \div 10^{-5}$ с, что дает достаточную для квантового компьютера величину $\Omega_{12}T \geq 10^4$.

5. Квантовый бит на основе электронов, левитирующих над поверхностью твердого криодиэлектрика.

5.1. Схема экспериментальной установки

Принципиально схема установки для наблюдения переходов в кубите мало отличается от установки для наблюдения переходов свободных двумерных электронов, подробно описанной в [3]. Поэтому целесообразно подробно остановиться на реализации самой структуры микроэлектродов, образующих кубит, а устройство установки описать лишь вкратце.

Кристалл неона или водорода выращивается в камере, представляющей собой тонкостенный стальной цилиндр. Камера расположена в вакуумном объеме оптического криостата и защищена от внешнего теплового излучения азотным и гелиевым экранами. На дне камеры находится структура микроэлектродов (микросхема, «чип»), представляющая собой кубит (см. далее). На ее поверхности выращивается криокристалл. На некотором расстоянии над поверхностью кристалла (~ 1 мм) находится сетка, создающая прижимающее поле.

После кристаллизации диэлектрика производится напуск электронов на поверхность кристалла при помощи вольфрамового термоэмиттера, разогреваемого кратковременными (0.1 с) импульсами.

Воздействие на электроны производится при помощи газоразрядного лазера на парах воды [3], работающего на частотах 78.4 , 79.1 , 118.6 мкм (H_2O) или 84.3 и 107.7 мкм (D_2O). Через окно криостата резонансное лазерное излучение попадает на поверхность кристалла и взаимодействует с электронами. Отраженное от поверхности излучение регистрируется германиевым фотоприемником, находящимся при гелиевой температуре. Переход электронов с основного на возбужденный уровень регистрировался фотоприемником по падению интенсивности отраженной волны, соответствующему резонансному поглощению излучения левитирующими электронами.

Поскольку для изучения состояния кубита используются оптические методы, которыми невозможно отследить изменение состояния одного электрона ввиду недостаточной чувствительности, в качестве кубита используется ансамбль электронов, находящихся в эквивалентных ячейках. Набор ячеек выполнен в виде чипа, схема которого изображенного на рис. 11.

Чип представляет собой кристалл размером 10×10 мм, на поверхности которого нанесена структура, состоящая из нескольких слоев металла и диэлектрика. На кремниевой подложке расположен первый (нижний) слой, состоящий из трех электродов,

выполненных в форме двух «гребенок» и «змейки» между ними. Сверху на расстоянии ~ 100 нм расположен верхний («зеленый») электрод, в котором прорезаны ячейки. Между верхним и нижними электродами расположен диэлектрический слой (окрашен серым на виде сбоку, рис.11), причем таким образом, что он не выходит вбок за пределы верхнего электрода, оставляя прямой доступ к нижним электродам в ячейках. Водород или неон кристаллизуется не только на поверхности верхнего электрода, но и внутри ячеек.

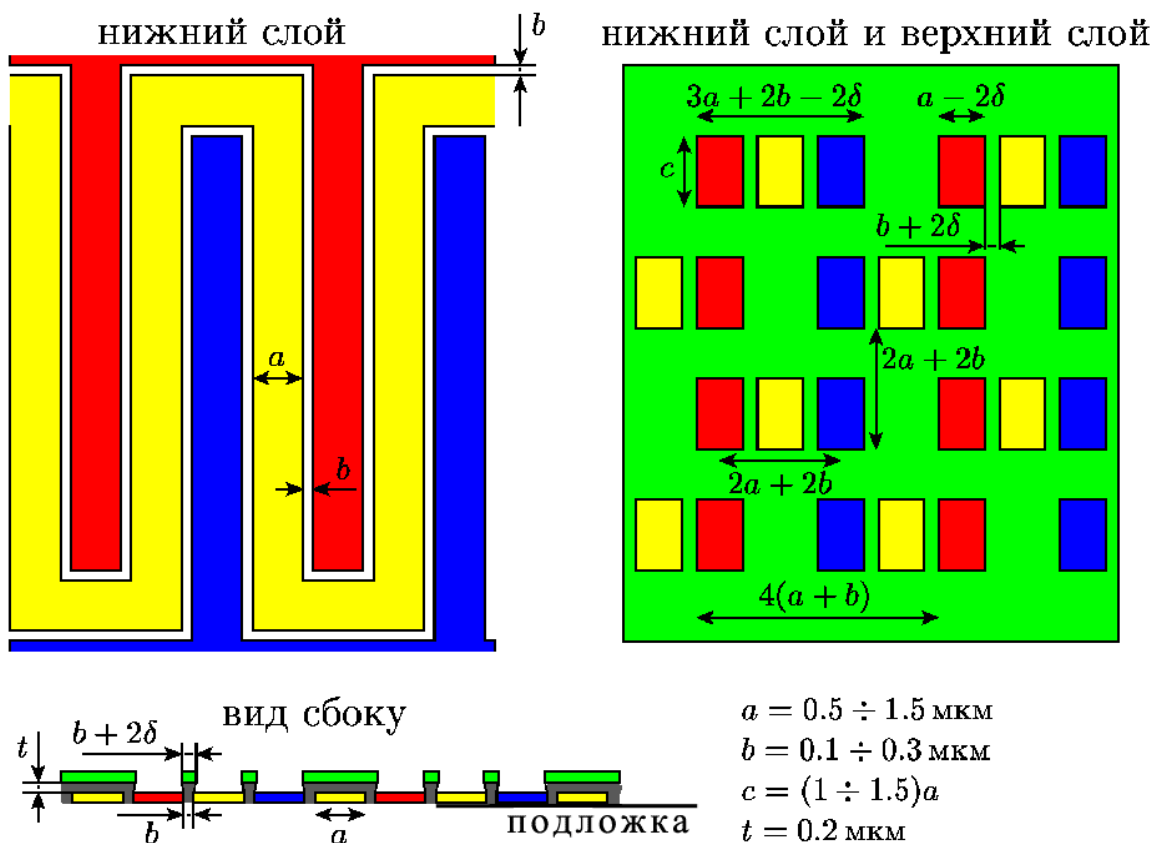


Рис. 11. Схема чипа.

Данный чип изготавливается методом электронной литографии. На кремниевую подложку наносится фоторезист, который засвечивается электронным лучом по форме нижних электродов. Затем резист травится, и на месте засветки образуется впадина. После этого на образовавшуюся поверхность напыляется металл, и оставшийся резист смывается вместе с попавшим на него металлом. Таким образом, остается лишь металл, напыленный непосредственно на подложку (получается набор из трех нижних электродов). На следующем этапе наносятся два слоя резиста, причем первый из них неконтрастный, а второй – контрастный. Затем оба слоя засвечиваются в соответствии с маской верхнего электрода. После этого контрастный резист травится строго по засветке, а неконтрастный – еще и в стороны, что приводит к образованию немного наклонных боковых стенок ячеек. Затем на полученную структуру напыляется металл, образуя верхний электрод, а

наклонные стенки ячеек не позволяют попадать на них металлу, обеспечивая отсутствие закоротки между верхним и нижним слоем.

Исходя из конструкции чипа, в нем можно выделить три ансамбля ячеек, «красные», «желтые» и «синие». Каждый ансамбль представляет собой отдельный кубит, состоянием которого можно управлять независимо, меняя напряжение на соответствующем нижнем электроде. Кубиты расположены близко друг от друга и могут взаимодействовать; причем можно утверждать, что их взаимное расположение делает наиболее сильными взаимодействия «желтый-красный» и «желтый-синий», а взаимодействие «красный-синий» более слабое. На первом этапе исследований предполагается использовать только «желтый» кубит. Это можно сделать, положив потенциалы «красного» и «синего» электродов равными потенциалу верхнего электрода.

Рабочая область кристалла составляет 10 мкм^2 ($3 \times 3 \text{ мкм}$), что соответствует 1.125 млн ячеек «желтого» кубита. Соответственно, концентрация электронов над поверхностью криоэлектрика составляет $n = 1.25 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$.

5.2 Постановка модельной задачи

Для нахождения оптимальных значений различных параметров структуры кубитов прежде всего необходимо определить характер поведения электрона в одной ячейке. С этой целью была сформулирована модельная задача нахождения энергетического спектра электрона в отдельной потенциальной яме.

Задача нахождения энергетических уровней в некоторой выбранной области пространства может быть разделена на две части: вначале необходимо получить распределение потенциала в этой области, решив уравнение Пуассона, а затем определить потенциальную энергию электрона и подставить в уравнение Шредингера. Анализируя полученные собственные значения уравнения Шредингера, соответствующие уровням энергии электрона, можно сделать выводы относительно необходимости изменения параметров ячейки. Ввиду непростой геометрии системы наиболее рациональный способ решения – численный. В этом случае также не составляет труда повторное решение задачи после изменения значений любых ее параметров.

Задача решалась в цилиндрической геометрии. На рис. 12 изображено сечение ячейки вертикальной плоскостью, проходящей через ось симметрии, совпадающей с центром ячейки (масштаб по оси z увеличен в несколько раз для наглядности). Значения фиксированных геометрических размеров системы приведены на этом же рисунке. Величина z_{surf} , определяющая толщину криокристалла, является основным параметром задачи и может изменяться в некотором диапазоне; на рисунке показан случай

$z_{surf} = 1 \text{ мкм}$. Ячейка представляет собой круглое отверстие в верхнем электроде диаметром 1 мкм , и, соответственно, областью решения задачи является цилиндр, соосный с этим отверстием. Радиус цилиндра выбирался таким, чтобы при дальнейшем его увеличении в полтора раза решение уравнение Пуассона оставалось неизменным с выбранной точностью (расчетным путем для радиуса цилиндра было получено $r_e = 10 \text{ мкм}$). Нижнее основание цилиндра совпадает с нижним электродом, который экранирует диэлектрик, служащий в качестве подложки для всей рассматриваемой структуры.

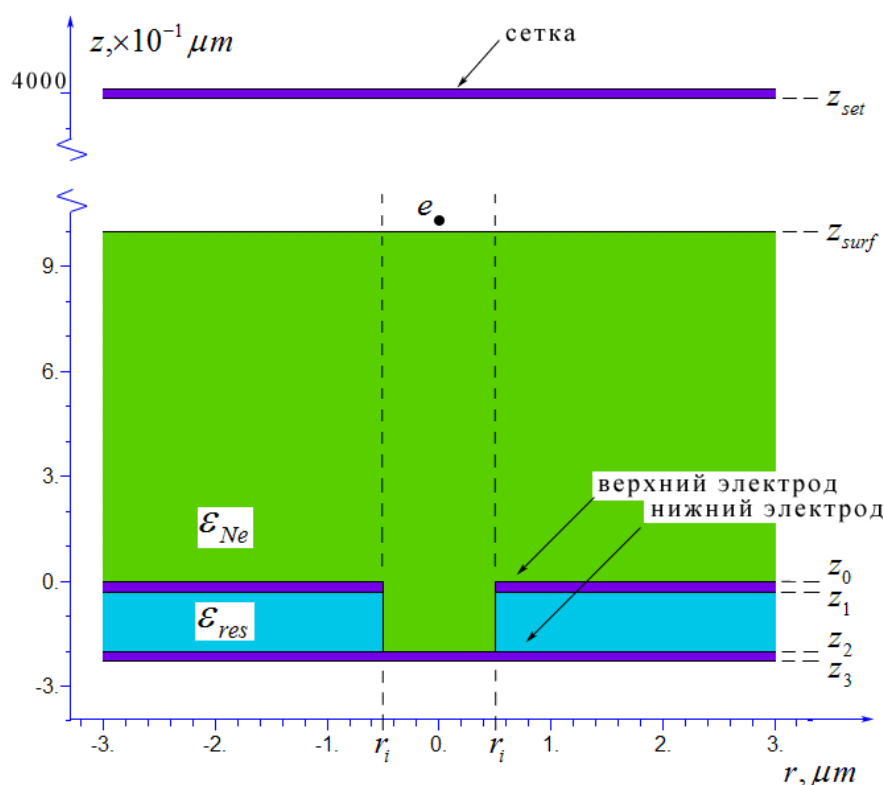


Рис. 12. Ячейка для одного электрона ($z_0 = 0$, $z_1 = 3 \cdot 10^{-2} \text{ мкм}$, $z_2 = 2 \cdot 10^{-1} \text{ мкм}$, $z_3 = 2.3 \cdot 10^{-1} \text{ мкм}$, $r_i = 0.5 \text{ мкм}$, $\epsilon_{Ne} = 1.242$, $\epsilon_{res} = 4$).

Предполагается, что в эксперименте сетка, создающая прижимающее поле, находится на расстоянии 400 мкм от поверхности верхнего электрода. Если выбрать ее в качестве верхней границы области счета, то задачу придется решать в узком цилиндре, высота которого в двадцать раз больше ширины. Это нерационально, поскольку заметные неоднородности потенциала находятся в области порядка размеров ячейки, и картина потенциала далеко от нее не представляет интереса. К тому же, масштаб этих неоднородностей гораздо меньше разности потенциалов между сеткой и верхним электродом (см. далее), поэтому расчет этих неоднородностей с высокой точностью потребует много времени и ресурсов. На основе этих соображений было решено заменить

реальную сетку на эффективную, расположенную ближе к электродам, насколько это возможно без изменения потенциала около ячейки.

Заданная разность потенциалов между сеткой и верхним электродом составляла 100 В ($V_{set} = 0\text{ В}$, $V_{upper} = 100\text{ В}$), что соответствует напряженности прижимающего поля $E = 2.5\text{ кВ/см}$. Такие поля использовались ранее в экспериментах [1,3]. Полученное при расчете положение эффективной сетки составляет $z_{set} = 12\text{ мкм}$. Соответственно, уменьшена (примерно в 30 раз) разность потенциалов «сетка – верхний электрод». Максимальная же разность потенциалов на верхнем и нижнем электродах ячейки составляет порядка нескольких вольт; при повышении этой разницы велика вероятность пробоя между электродами.

Таким образом, определена область, в которой должно решаться уравнение Пуассона

$$\text{div}(\varepsilon \cdot \text{grad}\varphi) = -4\pi\rho, \quad (13)$$

где ρ – объемная плотность зарядов. Граничные условия выглядят следующим образом: на верхнем и нижнем основаниях цилиндра естественным образом задаются постоянные значения потенциала $\varphi = V_{SET}$ и $\varphi = V_{LOWER} = 101\text{ В}$ (V_{LOWER} является еще одним варьируемым параметром системы, наряду с толщиной кристалла), а на всей боковой поверхности цилиндра ставилось условие $\partial\varphi/\partial n = 0$. Кроме того, на верхнем электроде учитывалось условие $\varphi = V_{UPPER}$.

В задаче имеется всего один заряд – электрон. В точке, где он находится, объемная плотность обращается в δ -функцию, а потенциал – в бесконечность. Тем самым, при численном решении в этой точке возникнет расходимость. Но нас интересует не полный потенциал (связанный с работой по перемещению пробного заряда в системе), а потенциал, в котором находится электрон:

$$\varphi' = \varphi - \frac{e}{|\vec{r} - \vec{r}_0|}, \quad (14)$$

\vec{r}_0 – радиус-вектор электрона. Именно с этим потенциалом должно решаться уравнение Шредингера. Подставив (14) в (13), получаем уравнение Лапласа

$$\text{div}(\varepsilon \cdot \text{grad}\varphi') = 0, \quad (15)$$

при этом потенциал φ' получается конечным во всем пространстве. Соответствующим образом должны быть изменены и все граничные условия.

Потенциал φ' , в котором находится электрон, состоит из двух частей: потенциалов всех электродов и потенциалов всех зарядов-изображений. Если изменить положение электрона, то заряды-изображения также переместятся, и изменится потенциал, создаваемый ими в точке нахождения электрона. Поэтому для нахождения потенциала во всем пространстве требуется каждый раз перемещать электрон в ту точку, в которой надо посчитать φ' , и решать уравнение (15).

Программа, численно решающая уравнение Лапласа (15), не выполняет такого логического разбиения потенциала. Тем не менее, ответ должен получиться правильным и без каких либо дополнительных предположений, а лишь за счет правильной постановки всех граничных условий. Например при приближении электрона к поверхности верхнего электрода новое граничное условие

$$\varphi' = V_{UPPER} - \frac{e}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} \quad (16)$$

обеспечивает стремление эффективного потенциала к $-\infty$; тем самым учитывается заряд-изображение в этом электроде. Но на границе диэлектрика и вакуума ($\epsilon = 1$) граничные условия – это условия непрерывности нормальной компоненты вектора \vec{D} и касательной компоненты вектора \vec{E} . При переходе от φ к φ' программа, в которой граничные условия на границе двух диэлектриков учитывались автоматически, не могла корректно преобразовать эти условия. В результате получалось, что, решая уравнение (15), программа учитывала лишь заряды-изображения в электродах, что приводило к неверному результату для φ' .

Чтобы преодолеть эту трудность, было решено действовать следующим образом. Задача (15) решалась с исходными граничными условиями

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi' = V_{SET}, z = z_{SET} \\ \varphi' = V_{LOWER}, z = z_2 \\ \varphi' = V_{UPPER}, z = z_{0,1}, r > r_i \\ \partial\varphi'/\partial n = 0, r = r_e \end{array} \right. \quad (17)$$

Получающийся в результате потенциал – это потенциал, создаваемый всеми электродами системы. Затем к полученному потенциалу добавлялся потенциал заряда-изображения в криодиэлектрике

$$\varphi_I(z) = -\frac{Q_{Ne}e}{z - z_{SURF}},$$

а заряды-изображения в металле не учитывались. Так можно поступить только в том случае, если поверхность криокристалла расположена достаточно далеко от электродов, и

влияние изображений в металле на электрон мало по сравнению с изображением в диэлектрике. Параметр $Q = (\varepsilon - 1)/(4(\varepsilon + 1))$ равен 0.25 для металла и около $3 \cdot 10^{-2}$ для неона; простые оценки показывают, что при толщине кристалла 1 мкм вклад в потенциал от изображений в металле на два порядка меньше вклада от изображения в диэлектрике (характерное расстояние электрона от поверхности кристалла – несколько десятков Å). Таким образом, при толщине кристалла более микрона заряды-изображения в электродах можно не учитывать.

Такой подход полностью оправдан с физической точки зрения. В том случае, если толщина кристалла мала, неоднородности потенциала, связанные с зарядами-изображениями в металле, дают основной вклад в потенциал электрона в системе. Эти неоднородности сложно учесть аналитически из-за множества «переотражений» электрона во всех поверхностях системы⁶, а численное решение может иметь малое отношение к действительности, потому что даже небольшая неточность в изготовлении ячейки может привести к радикальному изменению системы зарядов-изображений. К тому же при приближении электрона к электродам ячейки усиливается влияние на него флуктуаций напряжения, уменьшающее время когерентности.

После решения уравнения Лапласа с полученным потенциалом $\varphi = \varphi' + \varphi_l$ решается уравнение Шредингера. Возможности программы позволяли решать уравнения на собственные значения только в двумерном случае, поэтому модельная задача изначально ставилась в аксиально-симметричной геометрии. Поскольку потенциальная энергия есть $U = U(z, r)$, то решения уравнения Шредингера ищутся в виде

$$\Psi = \psi(z, r) \cdot \exp(\pm i l \phi),$$

а само уравнение принимает вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{ZR} \Psi + \left(E - U(z, r) - \frac{\hbar^2 l^2}{2mr^2} \right) \Psi = 0, \quad (18)$$

$$\Delta_{ZR} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}.$$

Подставляя в уравнение (18) различные значения $l = 0, 1, 2, \dots$, мы можем получать значения энергии и волновые функции, соответствующие данному l . Уровни энергии, соответствующие $l \neq 0$, двукратно вырождены.

⁶ Потенциал зарядов-изображений даже в двухслойном диэлектрике представляется в виде суммы бесконечного числа слагаемых [15].

Уравнение Шредингера решалось в области, лежащей выше поверхности криокристалла, то есть там, где реально может находиться электрон: $z \in [z_{SURF}, z_{SET}]$, $r \in [0, r_e]$. Как было сказано ранее, электрон не может проникнуть внутрь диэлектрика из-за потенциального барьера, который можно считать бесконечно высоким. Поэтому на поверхности ставилось условие $\psi(z = z_{SURF}) = 0$, в центре ямы $-\frac{\partial \psi}{\partial r}(r = 0) = 0$. На краях области счета $r = r_e$ и $z = z_{SET}$ использовалось условие $\psi = 0$. Поскольку полученные волновые функции обращались в нуль, существенно не доходя до этих границ, то при последующих вычислениях область счета была значительно уменьшена (до десятых долей микрона по r и по z). При этом существенно сократилось время вычислений и возросла точность.

5.3 Методы решения

Для решения поставленной задачи (уравнения Лапласа, а затем уравнения Шредингера) использовалась программа FlexPDE 3.01с. Структура программы позволяла задавать область решения требуемых уравнений и граничные условия на краях этой области. Полученный результат представлялся как в табличном, так и в графическом виде.

Уравнение Лапласа решалось программой методом конечных элементов. При этом во всей области решения строилась треугольная сетка и непрерывная величина (в данном случае, потенциал) заменялась на набор дискретных значений; поведение исследуемой величины в пределах ячейки описывалось интерполяционным многочленом. Производные, входящие в уравнение, заменялись соответствующими разностными соотношениями. Затем решалась система уравнений, неизвестными в которой были значения потенциала в узлах сетки. После этого оценивалась ошибка, и ячейки, в которых она превышала заданное значение, дробились самой программой. Применительно к задаче с потенциалом, наиболее тщательно исследовались области вблизи резких изломов поверхности (рис 13). Надо отметить, что точная разновидность метода, применявшегося программой, не приведена в ее описании, но, по всей видимости, значения потенциала брались не только в узлах, но и на ребрах ячеек (т.е. использовались многоузловые элементы, описанные, например, в [17]). Поэтому необходимая точность соблюдалась даже в ячейках сравнительно больших размеров.

Область, в которой решалось уравнение Лапласа, состояла из нескольких подобластей, различающихся значением диэлектрической проницаемости. Как видно из рис. 13, сетка строилась таким образом, чтобы границы этих подобластей не попадали внутрь ячеек, а совпадали с их ребрами. Условия непрерывности нормальной компоненты

вектора \vec{D} и касательной компоненты вектора \vec{E} на границах ячеек, содержащих разные материалы, выполнялись программой автоматически в процессе применения теоремы Остроградского-Гаусса к каждой вычислительной ячейке для понижения порядка членов, содержащих вторые производные.

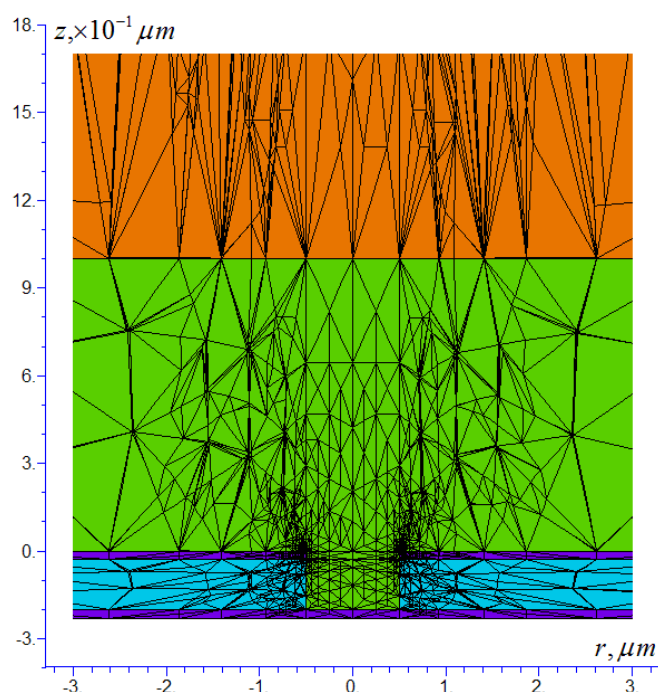


Рис. 13. Структура сетки конечных элементов (пример).

Также программа решала уравнение Шредингера, находя требуемое число собственных значений и соответствующие им собственные функции. Собственные значения находились последовательно, начиная с наименьшего (т.е. с основного состояния). Опишем вкратце алгоритмы поиска собственных значений и векторов.

Если для квадратной матрицы A выполняется соотношение

$$A \vec{x} = \lambda \vec{x} \quad (19)$$

при $x \neq 0$, то число λ называется собственным значением матрицы A , а соответствующий вектор \vec{x} – собственным вектором. Для нахождения собственных значений необходимо найти корни характеристического многочлена $\det(A - \lambda E)$, равенство нулю которого обеспечивает существование нетривиального решения задачи (19) (E – единичная матрица). Поскольку методы поиска корней, например, метод парабол, для нахождения одного корня требует около 10 раз вычислить многочлен, то необходимо иметь быстрый способ его определения. Вычислять характеристический многочлен можно многими способами, как прямыми, когда он получается в результате

конечного числа действий, так и итерационными, когда многочлен определяется как предел некоторого вычислительного процесса.

После нахождения собственного значения $\tilde{\lambda}$ нельзя искать собственный вектор из уравнения (19). Это связано с тем, что, в силу неизбежной погрешности численного решения, найденное значение немного отличается от точного, поэтому при подстановке $\tilde{\lambda}$ задача (19) будет иметь только тривиальное решение. Поэтому для нахождения собственного вектора применяется, например, метод обратных итераций. Суть его заключается в следующем (подробное изложение можно найти в [16]).

Выберем случайным образом вектор \vec{b} и рассмотрим систему

$$(A - \tilde{\lambda}E)\vec{x} = \vec{b}. \quad (20)$$

Ее определитель отличен от нуля, так что она имеет единственное решение. В простом случае, когда матрица A n -го порядка имеет n линейно-независимых собственных векторов, то эти вектора образуют базис, по которому можно разложить \vec{x} и \vec{b} :

$$\vec{x} = \sum_{j=1}^n \xi_j \vec{x}_j, \quad \vec{b} = \sum_{j=1}^n \beta_j \vec{x}_j.$$

После подстановки этих выражений в систему (20), и учитывая условие $A\vec{x}_j = \lambda_j \vec{x}_j$, получаем

$$\sum_{j=1}^n [\xi_j (\lambda_j - \tilde{\lambda}) - \beta_j] \vec{x}_j = 0,$$

откуда, согласно требованию независимости \vec{x}_j , вытекает соотношение

$$\xi_j = \frac{\beta_j}{\lambda_j - \tilde{\lambda}}.$$

Из последнего равенства видно, что если $\tilde{\lambda} \cong \lambda_j$ для некоего j , то соответствующий коэффициент ξ_j будет очень большим, и остальные малы. Это означает, что найденный из системы (20) вектор \vec{x} будет почти совпадать с искомым собственным вектором.

Если собственные значения найдены слишком грубо или вектор \vec{b} выбран неудачно, то вектор \vec{x} может заметно отличаться от \vec{x}_j . В этом случае \vec{x} подставляется в правую часть системы (20) в качестве нового случайного вектора, и истинный собственный вектор ищется как предел итерационного процесса. Обычно этот процесс быстро сходится, и бывает вполне достаточно и двух итераций. При численной

реализации метода обратных итераций в качестве координат вектора \vec{b} рекомендуется использовать псевдослучайные числа [16].

Также необходимо отметить существование специальных методов⁷, приводящих матрицу A к более удобному для дальнейших операций виду, например, диагональному или треугольному.

Наконец, укажем способ приведения уравнения Шредингера к виду (19). Для этого необходимо разбить рассматриваемую область аналогично случаю решения уравнения Лапласа, и в качестве координат вектора \vec{x} выбрать значения волновой функции в узлах решетки. Затем входящие в уравнение Шредингера производные заменяются разностными соотношениями, и само уравнение заменяется на систему типа (19), в которой в качестве λ выступают собственные значения энергии.

В процессе счета программа в каждой ячейке вычисляла интегралы от решаемого уравнения и сравнивала их между собой. На основе этого оценивалась относительная ошибка в искомой переменной, которая затем сравнивалась с заранее установленной минимальной величиной ошибки. В случае превышения этой величины «плохая» ячейка делилась и решение вычислялось снова. Но, после достижения удовлетворительных величин ошибки в каждой ячейке, отнюдь не гарантировалось, что общая ошибка во всей области решения задачи также не превысит заданную величину. Это обстоятельство является следствием трудно предсказуемого характера накопления ошибки в каждой конкретной задаче⁸. Поэтому, несмотря на то, что для уравнений Шредингера и Лапласа описанные выше численные методы обладают достаточной устойчивостью [16,17], ввиду неизвестности конкретной разновидности метода, реализованного в программе, было по меньшей мере полезным оценить точность численного решения для поставленной модельной задачи.

Правильность и точность решения уравнения Лапласа демонстрировалась в многочисленных примерах, прилагавшихся к программе. Для исследования уравнения Шредингера было решено рассчитать уровни энергии электрона в потенциале заряда-изображения над поверхностью твердого неона. Во-первых, у этой задачи было известно аналитическое решение (9), во-вторых, форма потенциала (8), равного ∞ в нуле и уходящего в нуль при $x \rightarrow \infty$, создавала дополнительные сложности при вычислениях (в

⁷ «Метод отражений» позволяет найти собственные значения за $((4/3)n^3+50n^2)$, а собственные вектора – за $(2n^3+10n^2)$ арифметических операций [16].

⁸ Об этом прямо говорилось в руководстве к программе. По заявлению разработчиков, программа FlexPDE способна решать очень широкий круг уравнений. Поэтому среди них могли встретиться такие, для которых применяемые численные методы могли быть недостаточно точными.

случае простого потенциала вроде прямоугольной ямы получаемые программой решения обладали высокой точностью).

Все физические величины, использовавшиеся при расчетах, задавались в системе единиц CGSE. Это могло дополнительно влиять на точность, поскольку программе часто приходилось оперировать с числами порядка 10^{-28} . Для оценки этой погрешности уравнение Шредингера для заряда-изображения решалось также и в системе единиц, где энергия и координаты электрона измерялись, соответственно, в эффективных «ридбергах» и боровских радиусах,

$$Ry = \frac{Q^2 e^4 m}{2\hbar^2} = 1.582 \cdot 10^{-14} \text{ эрг} \approx 10 \text{ мэВ}$$

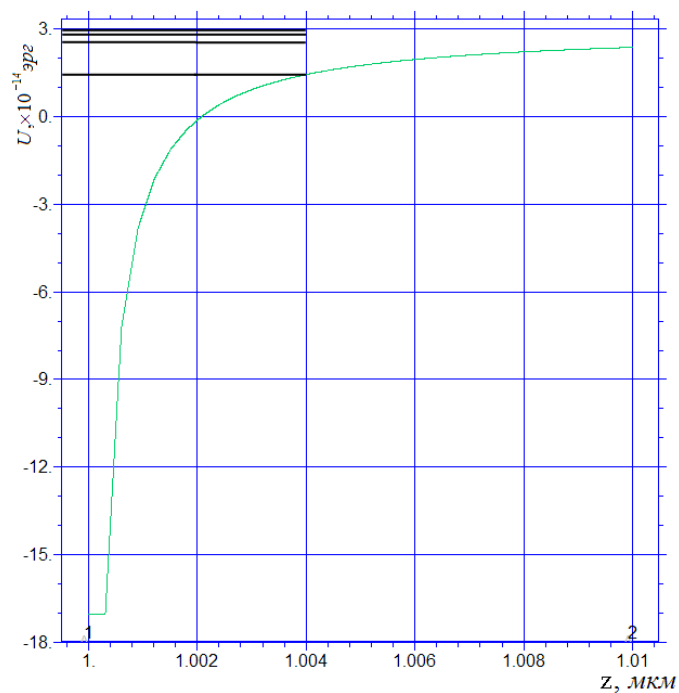
$$r_B = \frac{\hbar^2}{me^2 Q} = 1.966 \cdot 10^{-7} \text{ см} \approx 20 \text{ \AA} ,$$

по аналогии с атомом водорода. В этих единицах уровни энергии электрона (9) имели вид $E_n = 1/n^2$, и программа работала с величинами порядка единицы. Оценка точности в этой системе единиц по существу совпала с точностью в системе CGSE, поэтому все дальнейшие вычисления проводились в последней системе единиц.

На рис. 14 изображена потенциальная энергия, в которой находится электрон над поверхностью неона, а также результаты расчета первых энергетических уровней. Полученные значения лишь немного отличаются от теоретических, несмотря на то, что на расстоянии $\sim 1 \text{ \AA}$ около поверхности потенциал был искусственно «обрезан» во избежание сбоя в вычислениях. Это говорит о том, что применение программы к данной модельной задаче вполне оправдано⁹.

Также на рис. 14 показано еще одно обстоятельство, влияющее на точность вычислений. Для корректной работы программы требовалось таким образом составить уравнения, чтобы получающиеся собственные значения были больше нуля. Поэтому потенциальная энергия была искусственно «приподнята» на $3 \cdot 10^{-14} \text{ эрг}$. При этом уровни энергии находятся близко к нулевой отметке, поэтому точность их вычисления велика. При большем подъеме потенциальной энергии точность расчетов заметно падает. На рис. 15 также показаны нормированные волновые функции, соответствующие найденным уровням энергии.

⁹ Тем не менее, полная ошибка более чем на два порядка превосходит среднюю по ячейкам разностной сетки.



$E_{\text{ТЕОР}}, \text{эрг}$	$E_{\text{ЧИСЛ}}, \text{эрг}$	ошибка, %
$1.5820 \cdot 10^{-14}$	$1.5838 \cdot 10^{-14}$	0.1
$0.3955 \cdot 10^{-14}$	$0.3954 \cdot 10^{-14}$	0.03
$0.1758 \cdot 10^{-14}$	$0.1757 \cdot 10^{-14}$	0.06
$0.0989 \cdot 10^{-14}$	$0.0988 \cdot 10^{-14}$	0.1

Рис. 14. Потенциальная энергия изображения (вблизи поверхности неона) и первые 4 энергетических уровня. Частота перехода $f_{1 \rightarrow 2} = 1.79 \text{ ТГц}$.

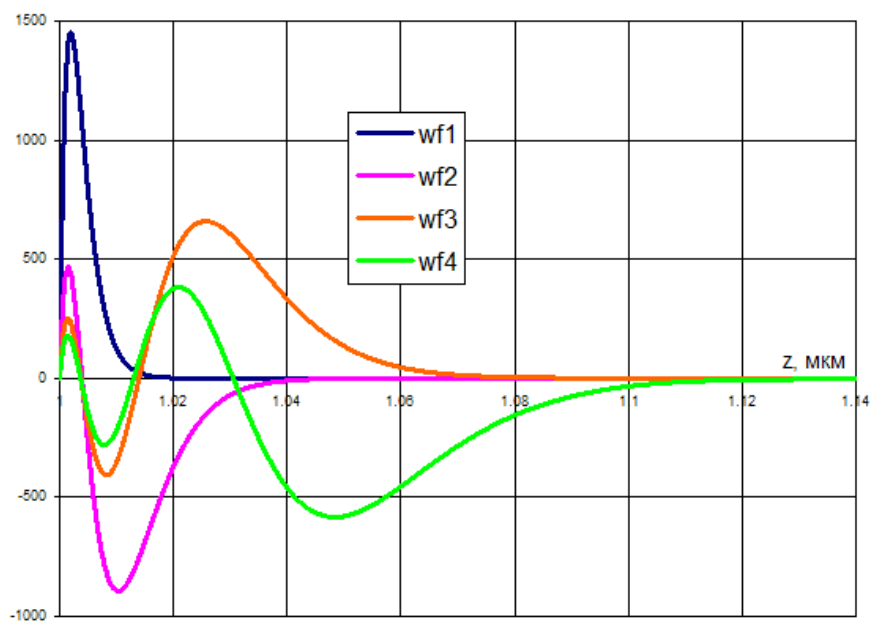


Рис. 15. Волновые функции электрона над поверхностью неона.

5.4. Спектр электрона в ячейке

После проверки корректности работы программы были проведены основные вычисления. Сначала были найдены уровни энергии электрона, находящегося над поверхностью диэлектрика «далеко от ячейки» (при больших значениях r). Потенциальная яма, в которой находится электрон, изображена на рис. 16 (в пределах 0.1 мкм около поверхности неона). Видно, что потенциальная энергия электрона состоит из суммы двух слагаемых: потенциала заряда изображения в неоне и линейного вклада от разности потенциалов сетка – верхний электрод. Уже на расстоянии порядка 0.05 мкм от поверхности влияние первого слагаемого практически незаметно.

Первым трем уровням вертикального движения электрона соответствуют энергии $E_1^F = 6.64$ мэВ, $E_2^F = 15.91$ мэВ и $E_3^F = 19.35$ мэВ (относительно нуля, изображенного на рисунке). Частота перехода между основным и первым возбужденным уровнями равна $f_{1 \rightarrow 2} = 2.24$ ТГц, а длина волны резонансного излучения $\lambda_{1 \rightarrow 2} = 134$ мкм. Сравнение с частотой перехода в отсутствие прижимающего поля $f_{1 \rightarrow 2}^0 = 1.79$ ТГц дает грубую оценку сдвига частоты в зависимости от величины поля – 0.2 ТГц/(В/см).

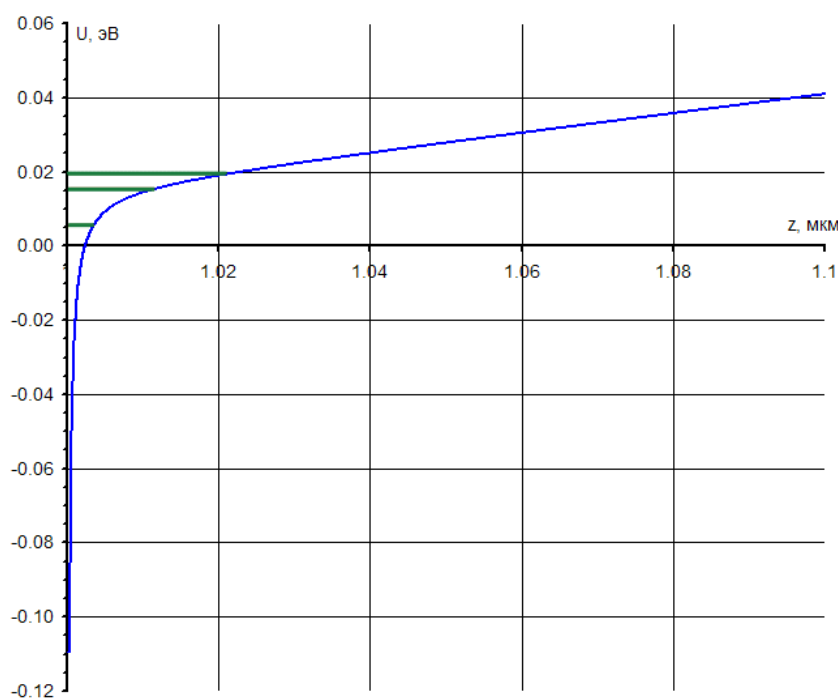


Рис. 16. Уровни энергии электрона «далеко от ячейки».

Форма волновых функций первых трех состояний в этом случае напоминает форму функций, изображенных на рис. 15; однако основной максимум находится ближе к поверхности неона, что соответствует более низкому положению электрона в присутствии прижимающего поля. Следует отметить, что найденные уровни соответствуют движению электрона по оси z , а вдоль поверхности его спектр непрерывен: электрон, находящийся

в стороне от ячейки, не локализован и может двигаться в плоскости, обладая, в принципе, любой кинетической энергией. Реально его движение ограничивается благодаря наличию соседних ячеек, которые не учитываются в модельной задаче.

Далее решалась непосредственно задача с ячейкой. Первым этапом было решение уравнения Лапласа. На рис. 17 показаны зависимости потенциальной энергии, создаваемой электродами ячейки, от расстояния от ее оси, на высоте 10 \AA над поверхностью (т.е. приблизительно там, где находится электрон в основном состоянии). Из левой диаграммы очевидно, что при более тонком кристалле ширина ямы, а, следовательно, и область локализации электрона уменьшается, но следует помнить, что мы работаем в приближении $z_{surf} > 1 \text{ мкм}$ (см. п. 5.3), поэтому два нижних графика не полностью соответствуют реальному распределению энергии. В частности, учет зарядов-изображений в металле приведет к возникновению локального максимума на краю ямы.

Из правой диаграммы видно, что варьирование разности потенциалов dU между верхним и нижним электродами ячейки приводит, в основном, к изменению глубины потенциальной ямы, оставляя ее ширину практически неизменной. Приведенные далее результаты получены для $z_{surf} = 1 \text{ мкм}$ и $dU = 1 \text{ В}$.

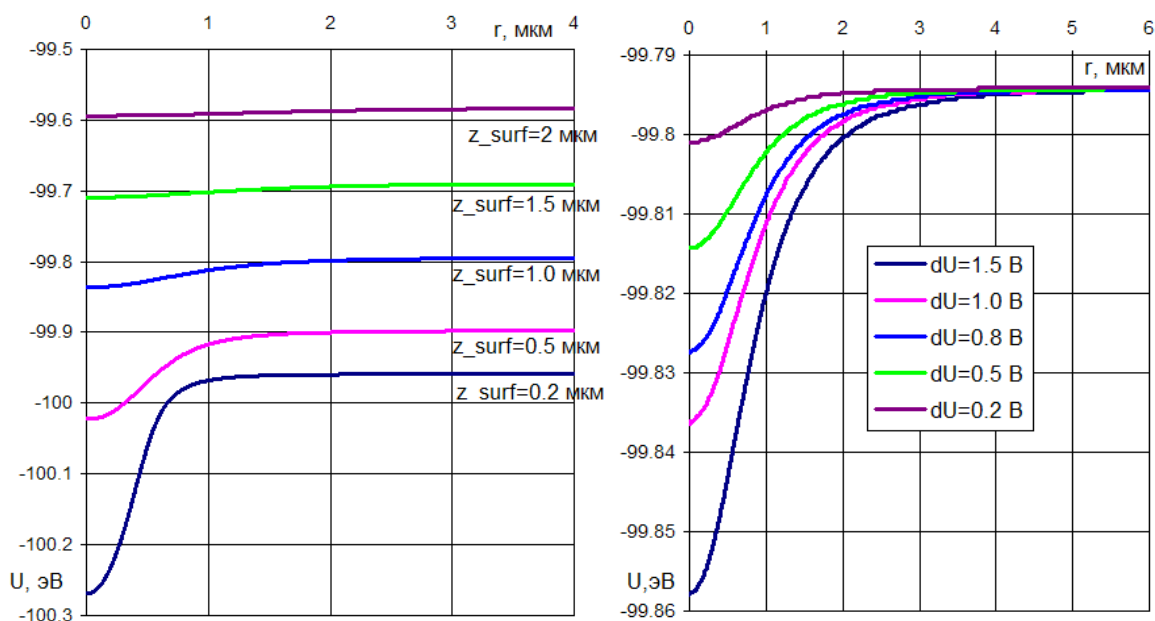


Рис. 17. Вид потенциальной ямы для электрона $U(r)$ в зависимости от толщины кристалла (слева) и разности потенциалов на электродах в ячейке.

На рис. 18 изображена полная потенциальная энергия электрона, которая подставлялась в уравнение Шредингера. Фактически, она представляет собой объединение зависимостей энергии от r и от z , показанные на предыдущих рисунках.

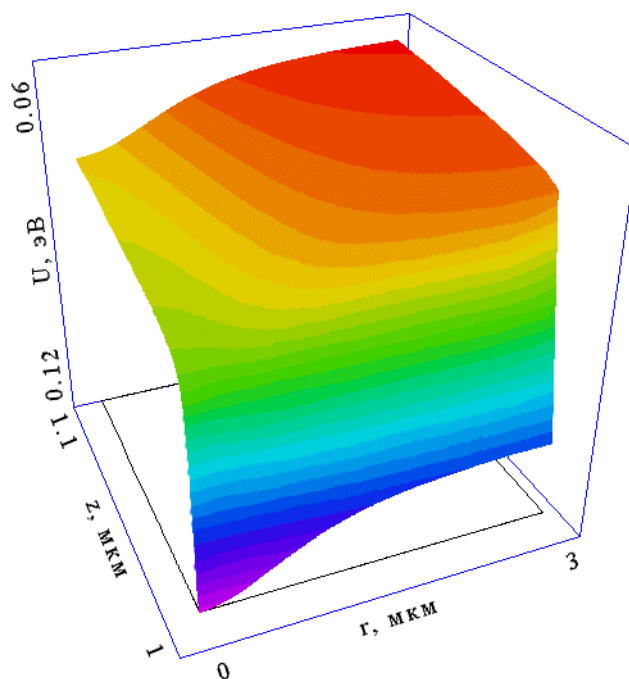


Рис. 18. Потенциальная энергия электрона.

Волновые функции электрона удобно классифицировать, ставя в соответствие каждой функции три квантовых числа: Z и R , равные количеству нулей волновой функции вдоль соответствующей оси, и L - проекцию «орбитального момента» электрона, подставляющуюся в уравнение Шредингера (18) как l . На рисунке 19 представлено несколько первых волновых функций, каждая из которых характеризуется своей тройкой квантовых чисел Z .

В процессе решения уравнения Шредингера было обнаружено, что первым энергетическим состояниям электрона соответствует набор достаточно близких уровней – расстояние между ними не превышало 0.2 мэВ (около 2.7 К). Программа за разумное время (несколько часов) могла найти около десяти волновых функций с точностью порядка 1% (точность найденных значений энергии была на порядок выше). Исходя из вида волновых функций, можно было заключить, что всем им соответствует $Z = 0$, а квантовые числа R последовательно возрастают. Это указывает на то, что волновые функции электрона по r и z могут быть разделены,

$$\psi(z, r) = \psi_1(z) \cdot \psi_2(r), \quad (21)$$

где $\psi_1(z)$ – уже найденные волновые функции электрона «далеко от ячейки».

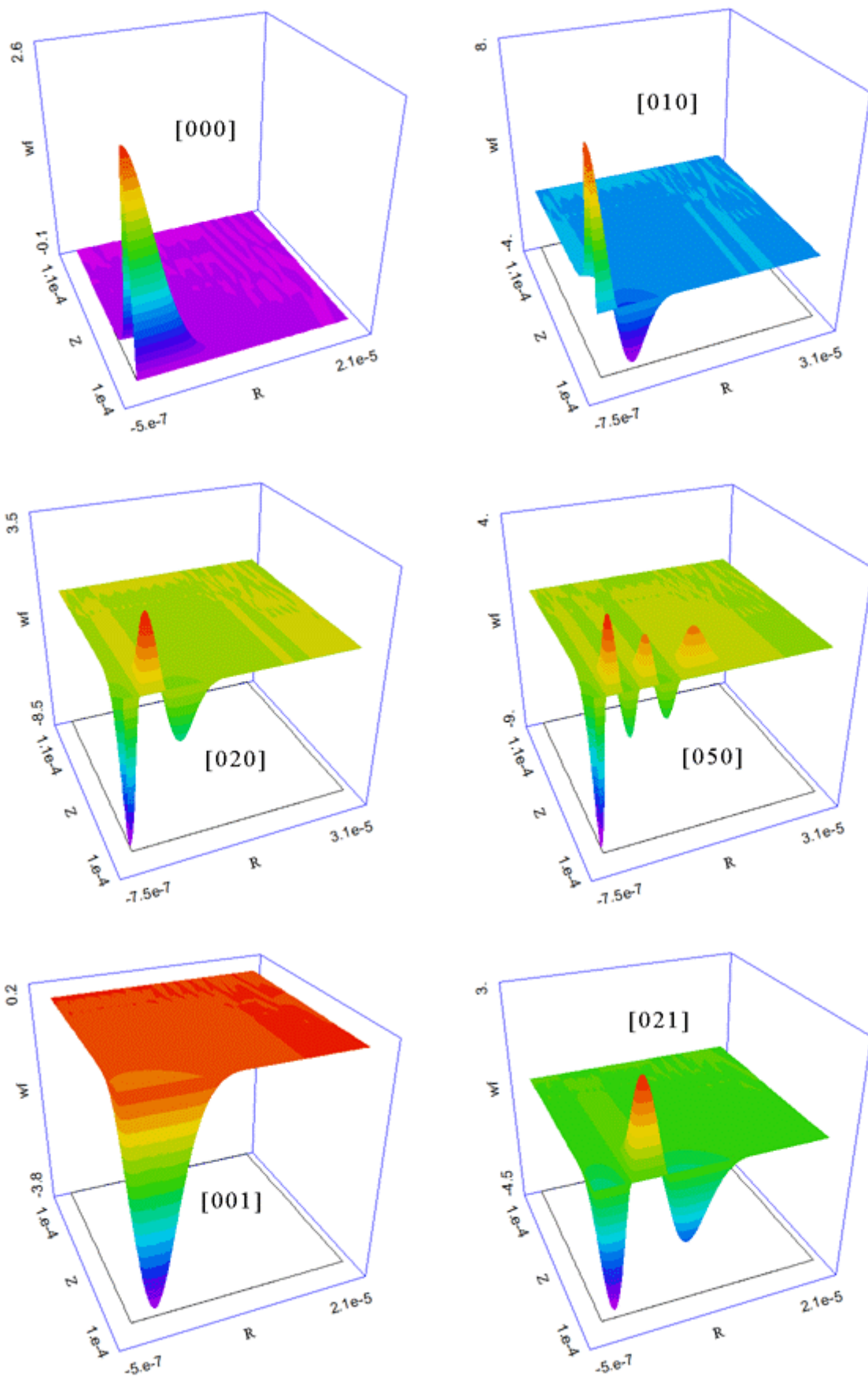


Рис. 19. Некоторые волновые функции электрона в ячейке (расстояния приведены в см.).

Обоснование такого разделения состоит в следующем. Во-первых, расстояние между первыми уровнями вертикального движения ($\sim 107.5 \text{ K}$) значительно превышает расстояния между уровнями движения вдоль плоскости неона, при этом область локализации электрона по оси z ($\sim 30 \text{ \AA}$) гораздо меньше, чем по оси r : электрон, описываемый волновой функцией с $R = 1$, локализован в плоскости в области размером 10^3 \AA , а при $R = 10$ – в пределах $4 \cdot 10^3 \text{ \AA}$. В качестве малого параметра, по которому производится разделение (21), можно взять первое из этих двух отношений.

Более строгое объяснение можно получить, рассмотрев вид потенциальной ямы, в которой находится электрон (рис. 18). Характерное расстояние, на котором изменяется потенциальная энергия вертикального движения (и где находятся интересующие нас уровни энергии с $Z = 0$ и $Z = 1$), не превышает 100 \AA , тогда как размеры ямы по оси r составляют несколько микрон (это соображение в некоторой степени аналогично предыдущим рассуждениям об области локализации). Это приводит к тому, что, с одной стороны, при переходе электрона с основного уровня вертикального движения на первый возбужденный, форма потенциальной ямы по оси r практически не изменится. С другой стороны, при движении в плоскости (в пределах ямы) электрон «не почувствует» изменений потенциальной энергии по оси z . Проще говоря, потенциальную энергию электрона можно представить в виде суммы

$$U(z, r) = U_1(z) + U_2(r).$$

После этого переменные z и r в уравнении Шредингера разделяются, что позволяет решать отдельно одномерную задачу для нахождения радиальных волновых функций и соответствующих уровней энергии. Найденный набор уровней затем можно приписать каждому из уровней вертикального движения (E_1^F и E_2^F).

Уравнение для $\psi_2(r)$ выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi_2}{\partial r} \right) + \left(E - U(r) - \frac{\hbar^2 l^2}{2mr^2} \right) \psi_2 = 0, \quad (22)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$. Полностью движение электрона в плоскости описывается волновой функцией $\psi_2(r) \cdot \exp(\pm i l \phi)$.

Поскольку задача нахождения уровней горизонтального движения является, по сути, одномерной, то объем машинных вычислений значительно ниже, что позволило рассчитать с достаточной точностью несколько десятков уровней для каждого значения l (до 60 для $l = 0$). На рис. 20 изображены только несколько первых уровней, дальнейшая структура спектра выглядит идентичным образом (нулевому значению энергии

соответствует дно ямы). Напомним, что все уровни, для которых $l \neq 0$, являются двукратно вырожденными.

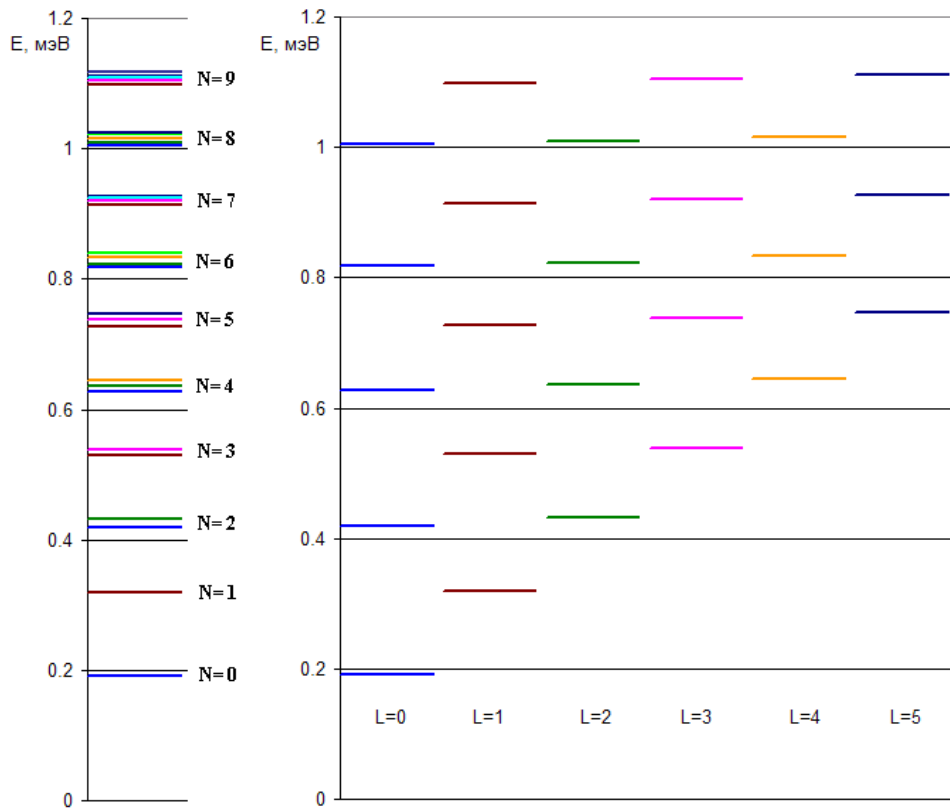


Рис. 20. Энергетический спектр движения электрона в плоскости, полностью (слева) и с классификацией уровней по L.

Энергетические уровни отчетливо разбиваются на группы, расстояние между которыми, за исключением первых 3-4, составляет ~ 0.08 мэВ (около 1 K). Такая картина наблюдается вплоть до 100-й группы уровней (далее расчет не проводился). Полученная структура спектра можно объяснить следующим образом.

Потенциальная энергия электрона $U(r)$ имеет вид, изображенный на рис. 17. Поскольку поперечный размер ямы составляет $R_{я} \approx 2 - 3$ мкм, а область, где находится электрон, не превышает 0.2 мкм для первых десяти групп уровней. Тогда, если разложить $U(r/R_{я})$ в ряд Тейлора в окрестности центра ямы, то получится

$$U\left(\frac{r}{R_{я}}\right) = U(0) + A\left(\frac{r}{R_{я}}\right)^2 + B\left(\frac{r}{R_{я}}\right)^4 + \dots$$

Отсюда видно, что форма потенциальной ямы около ее центра близка к параболической. Уровни в параболической яме хорошо известны – это эквидистантные уровни энергии плоского осциллятора,

$$E_N = \hbar\omega(n_x + 1/2) + \hbar\omega(n_y + 1/2) = \hbar\omega(N + 1), \quad N = n_x + n_y = 0, 1, 2, \dots$$

в координатах XY. Уровень осциллятора, которому соответствует определенное число N , является $(N + 1)$ -кратно вырожденным.

Спектр, полученный численными расчетами в полярных координатах, достаточно хорошо согласуется с уровнями двумерного осциллятора. Отметим важное отличие – степень вырождения рассчитанных уровней меньше, по двум причинам: из-за отклонения реального потенциала от параболического, и из-за неизбежных погрешностей численного счета. Сильное отклонение первых уровней от эквидистантного спектра связана с недостаточной точностью решения уравнения Лапласа около оси ячейки.

Уровню осциллятора с номером N соответствует группа из близко расположенных уровней; «четные» группы включают один невырожденный ($l = 0$) и $N/2$ двукратно вырожденных уровней, «нечетные» состоят из $(N + 1)/2$ двукратно вырожденных уровней.

После нахождения уровней горизонтального движения электрона можно, опираясь на предыдущие рассуждения, составить полную картину энергетического спектра электрона. Она схематически показана на рис. 21, где, для наглядности, ветви спектра, соответствующие $Z = 0$ и $Z = 1$, пространственно разнесены.

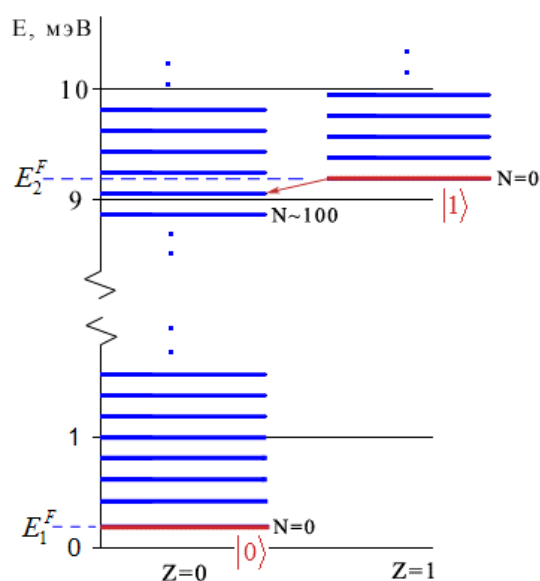


Рис. 21. Полный спектр электрона (точками обозначено продолжение дискретной структуры уровней)

От каждого из z -уровней электрона E_1^F и E_2^F ($|0\rangle$ и $|1\rangle$ в терминологии квантовых битов) начинается «лестница» из уровней внутриплоскостного движения. При выбранных параметрах системы (толщина кристалла $z_{surf} = 1 \text{ мкм}$, разность потенциалов на электродах ячейки $dU = 1 \text{ В}$) получается, что около уровня $|1\rangle$ (квантовые числа $[1\ 0\ 0]$)

находится группа уровней, соответствующая уровню двумерного осциллятора с $N \approx 100$. В этой группе порядка 50 двукратно вырожденных уровней, характеризующихся набором квантовых чисел $[0 A (100 - 2A)]$, $A = 0, 1, 2, \dots, 50$, от уровня $[0 50 0]$ до уровня $[0 0 100]$.

5.5. Основные результаты и выводы

Полученная структура уровней (рис. 21) имеет схожую структуру со спектрами, приведенными в теоретических работах [4,5]. Второй уровень вертикального движения электрона, играющий в кубите роль уровня $|1\rangle$, оказывается в непосредственной близости к целой группе уровней движения вдоль поверхности криокристалла. В связи с этим серия переходов на близлежащие уровни, показанная стрелкой на рис. 21, может оказывать заметное влияние на время когерентности. В приближении, в котором считались уровни в модельной задаче, эти переходы запрещены. Действительно, вероятность перехода $\psi_{|1\rangle} \equiv [1 0 0] \rightarrow \psi_A \equiv [0 A (100 - 2A)]$ описывается интегралом

$$\int_V \psi_{|1\rangle} \cdot \vec{r} \cdot \psi_A dV, \quad (23)$$

входящим в дипольный момент перехода [19]. Каждая из компонент этого интеграла, ввиду возможности разделения волновых функций по координатам, разбивается на произведение трех интегралов. Два из них при этом равны нулю, так как они берутся от произведения ортогональных волновых функций (для z -компоненты интеграла (23) нулю равны интегралы по r и φ), поэтому переход оказывается запрещенным. На практике интеграл (23) отличен от нуля, и полная вероятность перехода на уровни, близкие к уровню $|1\rangle$, будет конечной величиной, зависящей от количества этих уровней. Поэтому целесообразно при конструировании системы кубитов и выборе параметров уменьшить число этих уровней.

Расстояние между уровнями горизонтального движения составляет $\sim 1 K$ для разности потенциалов $dU = 1 B$ между электродами ячейки. Это расстояние можно изменять, варьируя dU : для $dU = 0.5 B$ оно уменьшается до $0.7 K$, а для $dU = 5 B$ возрастает до $2 K$. В последнем случае около уровня $|1\rangle$ будет уже не 100, а 50 уровней. К сожалению, $dU = 1 B$ является практически пороговым значением, при котором еще мала вероятность пробоя диэлектрического слоя между электродами ячейки, и увеличение разности потенциалов возможно лишь при замене используемого диэлектрика ($\epsilon \approx 4$) другим материалом.

Уменьшая dU , мы не только сближаем уровни, но и уменьшаем общую глубину потенциальной ямы (рис. 17). Если ее глубина становится сравнимой с расстоянием между

уровнями $|1\rangle$ и $|0\rangle$, то уровни горизонтального движения, близкие к $|1\rangle$ (и к верхней границе ямы), уже не будут эквидистантными. Расстояние между ними при этом гораздо меньше $1 K$, и вероятность распада возбужденного состояния кубита может сильно возрасти.

Другая возможность состоит в уменьшении расстояния между уровнями $|1\rangle$ и $|0\rangle$. Например, при прижимающем поле $1 B/cm$ расстояние между уровнями кубита мало отличается от случая нулевого прижимающего поля и составляет $86 K$; это также снижает количество близких к $|1\rangle$ уровней. Надо отметить, что такое небольшое прижимающее поле имеет вполне определенный физический смысл: оно примерно соответствует полю, которое создают электроны, находящиеся над чипом (их концентрация $n \sim 10^7 cm^{-1}$). В этом случае слой электронов эффективно экранирует прижимающее поле, понижая вероятность появления в системе явлений лавинного характера, связанных со случайными высокоэнергетическими частицами, попавшими в область прижимающего поля.

В любом случае, полученная структура спектра указывает на необходимость работать при температурах не выше одного кельвина, даже в случае твердого криодиэлектрика.

Модельная задача хорошо описывает поведение электрона в ячейке реальной структуры (рис.11) в том случае, если исследуется один («желтый») кубит. Ячейки этого кубита достаточно далеко удалены друг от друга, поэтому соседние потенциальные ямы перекрываются только в своей верхней части, что не должно оказывать сильного влияния на спектр. Перекрывание волновых функций на самом высоком из используемых уровней спектра ($|1\rangle$) также невелико, и электроны, находящиеся в соседних ячейках, слабо взаимодействуют друг с другом. Картина может существенным образом измениться, если будут использоваться все три кубита, входящие в структуру чипа.

6. Литература

1. Завьялов В.В., Смольянинов И.И. Эффект квантового преломления в газообразных H_2 , D_2 , Ne и He для электронов, локализованных над поверхностями кристаллических водорода, дейтерия и неона
// *ЖЭТФ*, 1988, Т.94, вып.1, с. 307-317.
2. Эдельман В.С. Левитирующие электроны
// *УФН*, 1980, Т.130, вып.4, с. 675.

3. Завьялов В.В., Смольянинов И.И. Экспериментальное наблюдение фоторезонанса электронов, локализованных над поверхностью твердого водорода
// *ЖЭТФ*, 1987, Т.92, вып.1, с. 339-349.
4. M. I. Dykman, P. M. Platzman. Quantum Computing Using Electrons Floating on Liquid Helium.
// *Fortschr. Phys.* 48 (2000) 9-11, 1095-1108.
5. M. I. Dykman, P. M. Platzman, P. Seddighrad. Qubits with Electrons on Liquid Helium.
// *Phys. Rev. B* 67 155402 (2003).
6. M. J. Lea, P. G. Frayne, Yu. Mukharsky. Could we Quantum Compute with Electrons on Helium?
// *Special issue of Fortschritte der Physik on "Experimental Proposals for Quantum Computers"*, 2000
7. Трояновский А.М., Хайкин М.С.
// *ЖЭТФ*, Т. 81, с. 398, 1981.
8. L. P. Kowenhoven, T. H. Oosterkamp et. al. Excitation Spectra of Circular Few-Electron Quantum Dots.
// *arXiv e-print cond-mat/9708229*, 1997.
9. C. H. van der Wal, F. K. Wilhelm, C. J. P. M. Harmans, J. E. Mooij. Engineering Decoherence in Josephson persistent-current Qubits.
// *arXiv e-print cond-mat/0211664*, 2002.
10. B. E. Kane. Silicon-Based Quantum Computation.
// *arXiv e-print quant-ph/003031*, 2000.
11. L. M. K. Vandersypen. Experimental Quantum Computation with Nuclear Spins in Liquid Solution. Dissertation.
// *arXiv e-print quant-ph/0205193*, 2002.
12. А.А.Кокин. Твердотельные ЯМР ансамблевые квантовые компьютеры.
// Диссертация, ФТИ РАН, Москва, 2003.
13. Y. Makhlin, G. Schon, A. Shnirman. Quantum State Engineering with Josephson-junction devices.
// *Rev.Mod.Phys.* 73, 357-400, 2001
14. Менский М.Б. Квантовые измерения и декогеренция.
М., Физматлит, 2001.
15. Шикин В.Б.
// *ФНТ*, Т.1, n7, 1975
16. Калиткин Н.Н. Численные методы.
М., Наука, 1978.
17. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов.
М., Мир, 1979.

18. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., Наука, 1989.
19. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Релятивистская квантовая теория. Часть 1. М., Наука, 1968.
20. Левинсон И.Б. Электроны на поверхности криогенных кристаллов. Рассеяние на колебаниях решетки.
// ЖЭТФ, 1989, Т.95, вып.2, с. 698-708.
21. T. D. Ladd, J. R. Goldman, A. Dana, F. Yamaguchi, Y. Yamamoto. Quantum Computation in a One-Dimensional Crystal Lattice with NMR Force Microscopy.
// arXive e-print quant-ph/0009122, 2001.
22. J.I. Cirac, P. Zoller. Quantum Computations with Cold Trapped Ions.
// Phys. Rev. Lett., 74, 4091, 1995.
23. H.-J. Briegel, T. Calarco, D. Jaksch, J.I Cirac, P. Zoller. Quantum Computing with Neutral Atoms.
// arXive e-print quant-ph/9904010, 1999.