

Nové materiály pre kvantové počítače



M. Orendáč, PF UPJŠ. Košice



Úvod – motivácia

Trochu o klasických počítačoch

Pridáme kvantovú mechaniku

Klasický bit vs. qubit

Ako (a z čoho) postaviť kvantový register?

Súčasný stav štúdia (niektorých) systémov vhodných ako HW
pre kvantové počítače

Záver

KalSem2017, 23. 5. 2017



Thovt

Úvod - Matematika v starom Egypte

Rhindov matematický papyrus (cca 1650 pred n. l.)

„zbierka úloh“

R48 Výpočet druhej mocniny čísel 8 a 9

8:

1	8
2	16
4	32
\ 8	64

9:

\ 1	9
2	18
4	36
\ 8	72

(Násobenie 2mi a sčítanie)

Horove zlomky:



$$\frac{1}{2}$$



$$\frac{1}{4}$$



$$\frac{1}{8}$$



$$\frac{1}{16}$$



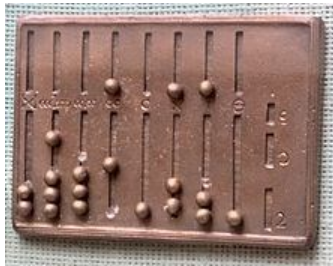
$$\frac{1}{32}$$



$$\frac{1}{64}$$



Je možné zostaviť stroj, ktorý by riešil výpočtové úlohy (aspoň niektoré)?



rímsky abakus

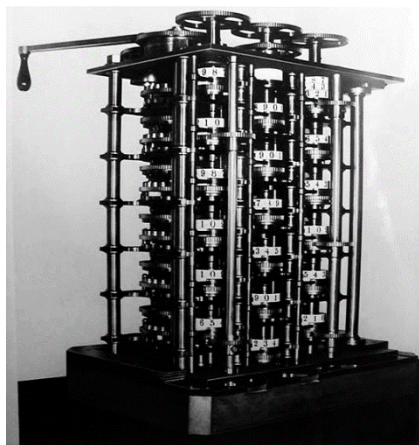


ruský ščot



„Pascalina“ B. Pascal 1642 (+, -)

G. W. von Leibnitz ≈ 1660 (+, -, $\cdot$, $:$, $\sqrt{}$)



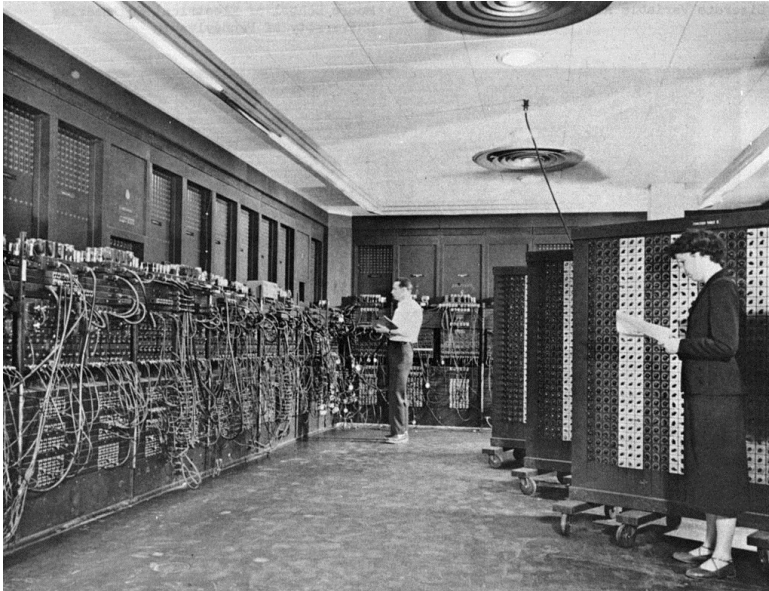
Ch. Babbage 1830

Výpočet logaritmov (pomocou sčítania)

Samočinný mechanický stroj (poháňaný parou)

ENIAC – Electronical Numerical Integrator And Calculator

1946 - 1955 prvý samočinný elektrický počítač



Hmotnosť: 30 t
HW: 17 000 elektróniek
Spotreba energie: $\approx$ 1 súčasná dedina
Chladenie: sada leteckých motorov

Použitie dekadického sústavy
(10 napäťových úrovní pre 1 rád)

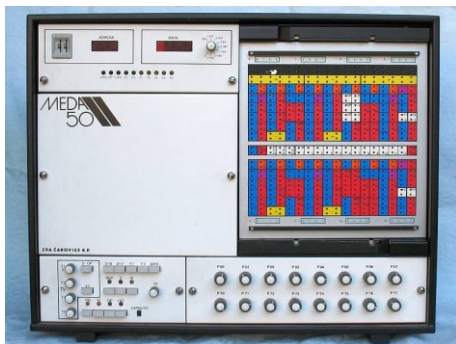
Pamäť: 20 desaťmiestnych čísel
Programovanie = „drôtovanie“

Výpočtový výkon:

Detailný výpočet trajektórie projektilov
(200 matematiciiek, 750 hodín)

→ (ENIAC - 20 sekúnd)

Riešenie integrodiferenciálnych rovníc – analógový počítač

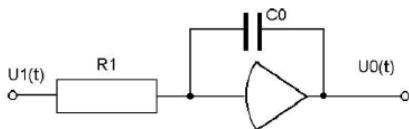


Pr. AP MEDA 50
(vyrobený v ZPA Čakovice r. v. 1986)

Pracuje so spojitými signálmi
(Číslo = veľkosť napätia)

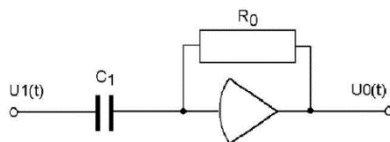
Základné prvky (niektoré):

Integrátor



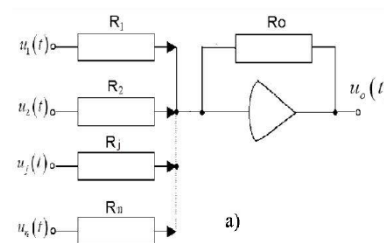
$$u_o(t) = -\frac{1}{C_o R_1} \int_0^t u_1(t) dt$$

Derivátor



$$u_o(t) = -C_1 R_o \frac{du_1}{dt}$$

Sumátor



$$U_o(s) = -R_o \sum_{j=1}^n \frac{U_j(s)}{R_j}$$

Ako zostrojiť počítačový stroj pre riešenie úlohy R48 zo starého Egypta?

R48 Výpočet druhej mocniny čísel 8 a 9

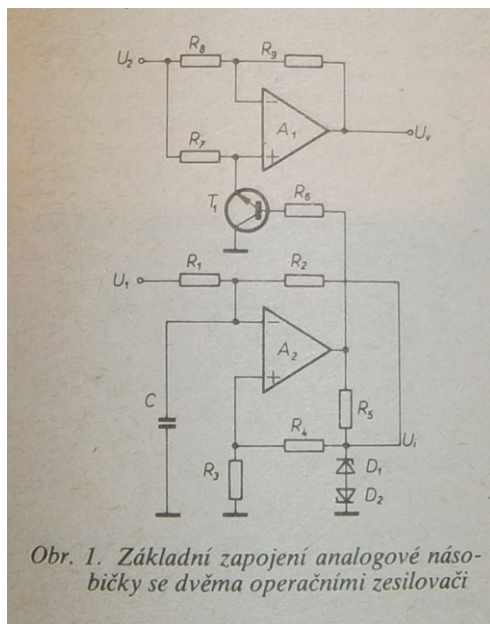
8:

1	8
2	16
4	32
8	64

9:

1	9
2	18
4	36
8	72

1. možnosť Analógová násobička



$$U_v = U_1 \cdot U_2$$

Kódovanie: „1“ (D) $\Leftrightarrow$ 0.1 V

$$U_1 = 0.9 \text{ V}, U_2 = 0.9 \text{ V} \Rightarrow U_v = 8.1 \text{ V}$$

$$\Leftrightarrow 9.9 = 81$$

2. Možnosť Číslicový obvod pracujúci s binárnymi číslami

/ 1 9: 0000 1001

2 18: 0001 0010

4 36: 0010 0100

/ 8 72: 0100 1000

9+72: 0101 1001

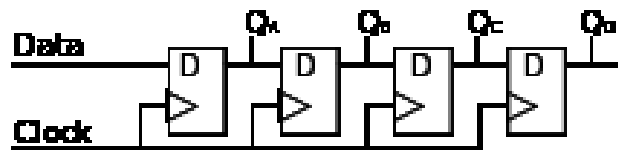
2 typy operácií:

násobenie 2 $\Leftrightarrow$ (posun o 1 miesto doľava)

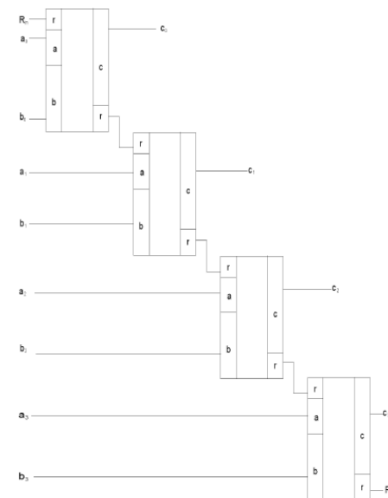
sčítanie (ako v dekadickej sústave)

Kódovanie: „0“ (B) $U = 0 - 0.8 \text{ V}$

„1“ (B) $U = 2.4 - 5 \text{ V}$

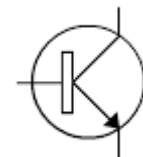


posuvný register

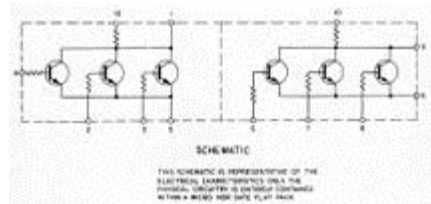


sčítačka

Posuvný register, sčítačka, - obvody obsahujúce tranzistory

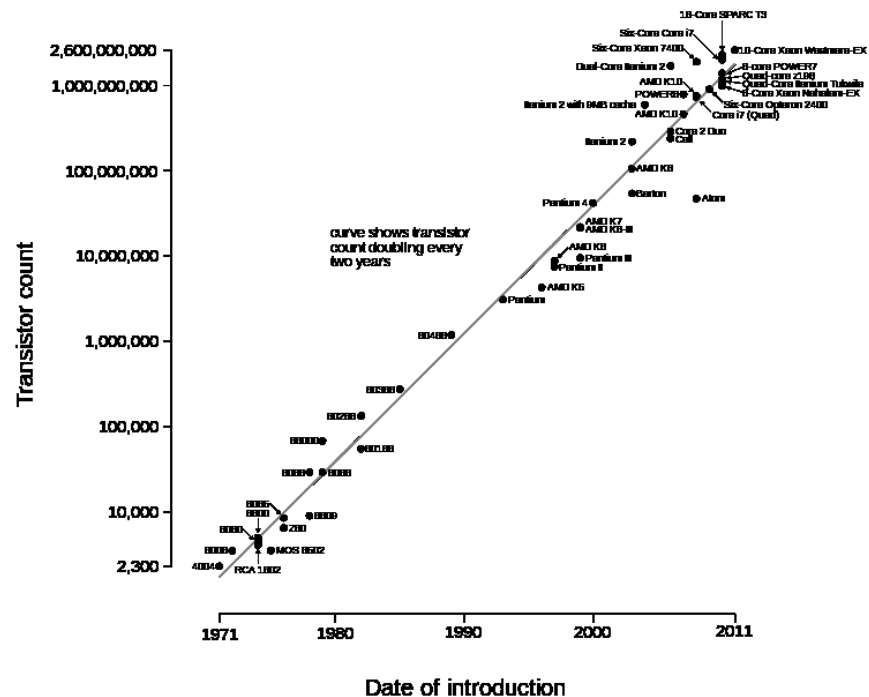


Aký posun nastal v elektronických počítačoch na báze tranzistorov za 50 rokov?



Počítač z lunárneho modulu Apolla (≈ 1960)
(2800 IC.6 = 16 800 tranzistorov)

Microprocessor Transistor Counts 1971-2011 & Moore's Law



Intel Core i5 CPU (2010)
($\approx 10^9$ tranzistorov)

Technologický pokrok – nesmierny, principiálny – nulový (takmer) !

Zachovanie pôvodnej architektúry (von Neumannovho typu, 1945)

Základný HW prvok – tranzistor (zabudovaný v integrovanom obvode)

Kódovanie – napäťové úrovne

Principiálne technologické obmedzenia - zmenšovanie rozmerov vs. kvantové efekty

Změna obmedzujúceho faktora na výhodu:

=> Kvantový počítač – založený na kvantovomechanických efektoch

Nebude mať vlastnosti klasického počítača:

Vykonanie programu nemení vstupné dáta.

Deterministický stroj – Opakované vloženie rovnakých vstupných dát a spustenie rovnakého programu vedú stále k rovnakému výsledku

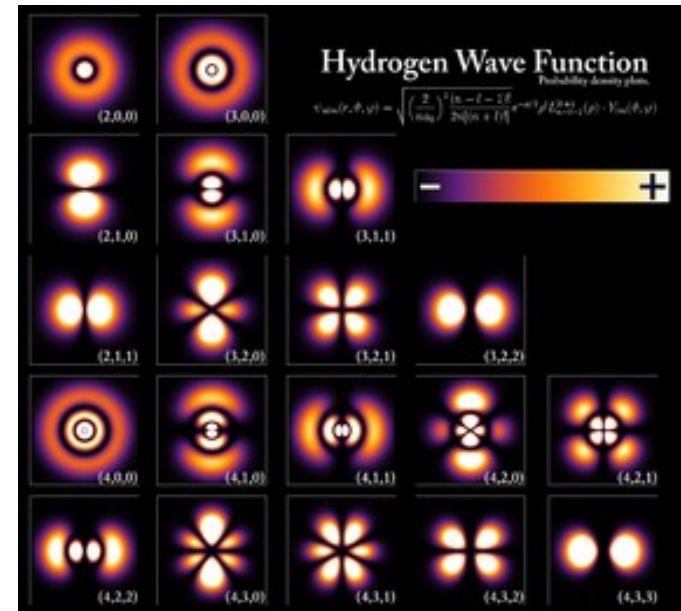
Niektoré črty kvantovej mechaniky

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad |\psi(t)\rangle \quad \text{vlnová (stavová) funkcia}$$

Riešením Schrödingerovej rovnice sú možné stavy kvantového systému.

Charakteristické veličiny (energia, moment hybnosti, ..) nadobúdajú iba vybrané hodnoty

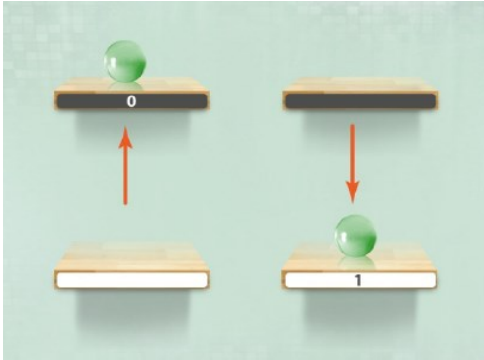
Plati princíp superpozície - $|\psi(t)\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$



Meraním vybranej veličiny meníme stav kvantového objektu

Klasický bit vs. qubit

Klasický bit:



Kódovanie:

„0“ guľička je na hornej poličke

„1“ guľička je na dolnej poličke

Opakované meranie dáva stále identický výsledok a nemení hodnotu bitu.

Kvantovo mechanický bit – qubit:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\vartheta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} |1\rangle$$

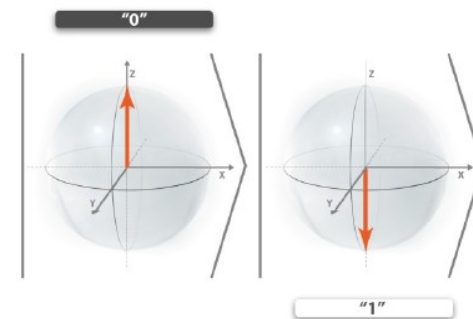
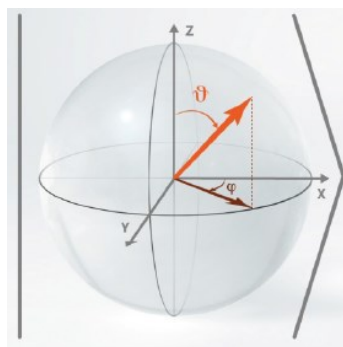
Guľička sa nachádza „niekde“ medzi poličkami

(Nesnažme sa predstaviť si to !!!)

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

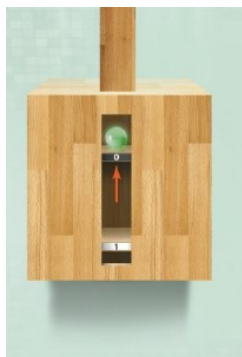
Grafické vyjadrenie qubitu:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\vartheta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} |1\rangle$$

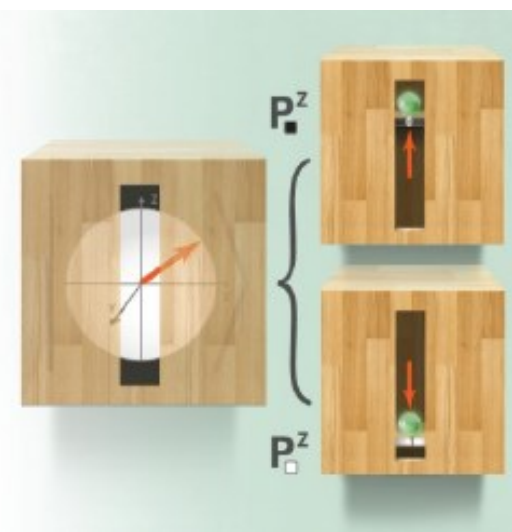


Ako bude vyzerat' meranie (určenie poličky, kde sa guľička nachádza) pre

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\vartheta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} |1\rangle$$



merací prístroj



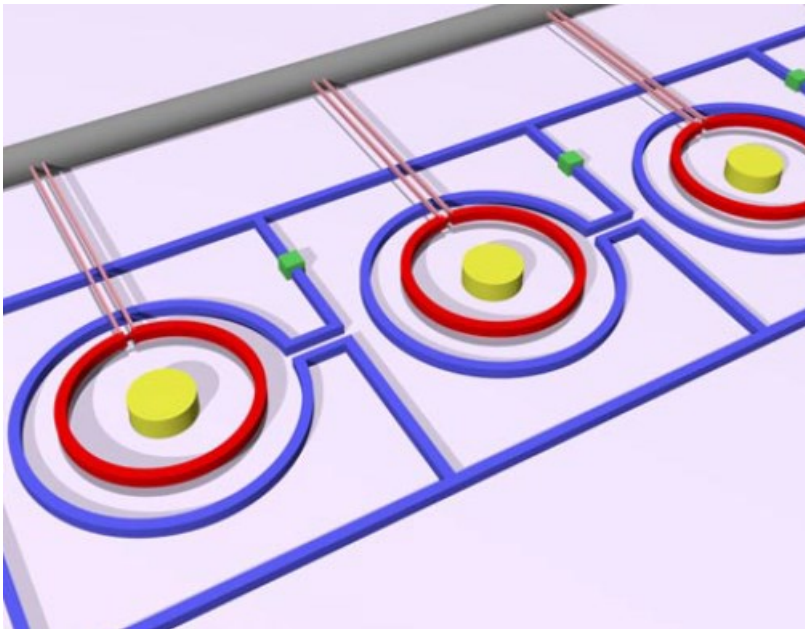
Opakované merania vedú k zmenám zo stavu $|\psi\rangle$ do stavu $|0\rangle$, $|1\rangle$ s pravdepodobnosťou $(\cos(\vartheta/2))^2$, $(\sin(\vartheta/2))^2$

Program v kvantovom počítači $\Leftrightarrow$ definovaná postupnosť zmien
kvantovomechanických stavov

$\Rightarrow$ Teoretický návrh kvantových hradíel

(klasické hradlá NOT, NAND, NOR + iné bez klasického náprotivku)

$\Rightarrow$ Programovanie = drôtovanie



Návrh kvantového registra

(uloženie počiatočnej informácie,
zmena stavu qubitov, adresácia qubitov,
odolnosť voči poruchám, ...)



J. Tejada et al., Nanotechnology (2001)

„Di Vincenzov kontrolný zoznam“

Aby bol daný hardvér ako qubit funkčný, musí umožňovať:

Prípravu počiatočného stavu $|\psi\rangle = \cos \frac{\vartheta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} |1\rangle$)

Udržanie počiatočného stavu dostatočne dlhý čas (koherenčný čas)

Vytvorenie kvantových hradíel

Meranie (vyvolanie zmeny stavu)

=> Príklady realizácie qubitu:

1. Polarizačný stav fotónu
2. Polovodičové kvantové „bodky“ (quantum dots)
3. Magnetické atómy (klastre)

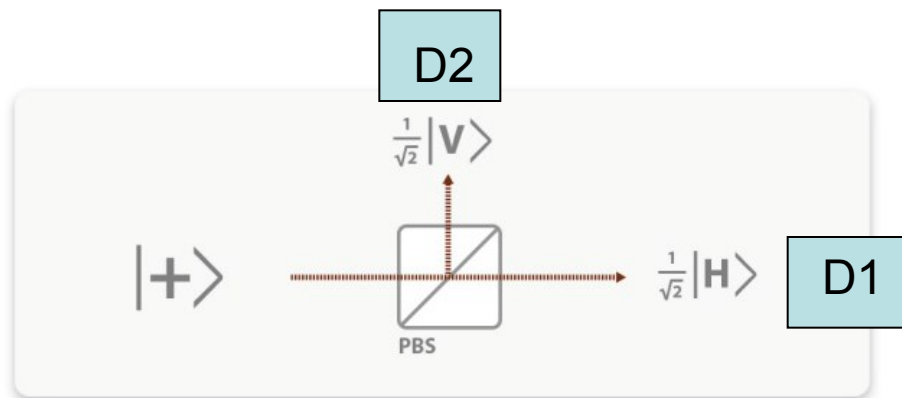
...

Polarizačný stav fotónu (lineárna, 45° polarizácia)

$$|+\rangle = \cos 45^\circ |V\rangle + \sin 45^\circ |H\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|V\rangle + |H\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$$

Kódovanie „0“ - V vertikálna polarizácia

„1“ - H horizontálna polarizácia



PBS – polarizačná doska
D1,D2 – detektory

Klasický experiment: zníženie intenzity zväzku pre D1 a D2

Kvantový experiment: striedavá detekcia fotónu (reaguje D1, alebo D2)

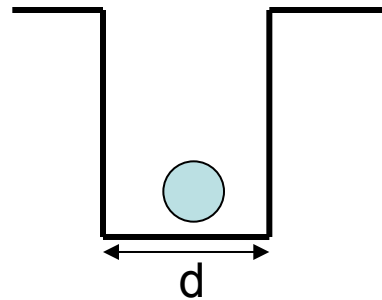
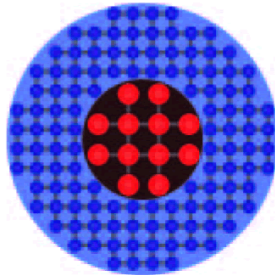
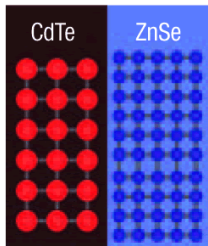
Výhody: prenos informácie na veľkú vzdialenosť, qubit funguje pri 300 K

Nevýhoda: nutnosť spoľahlivej detekcie 1 fotónu

Polovodičové kvantové „bodky“

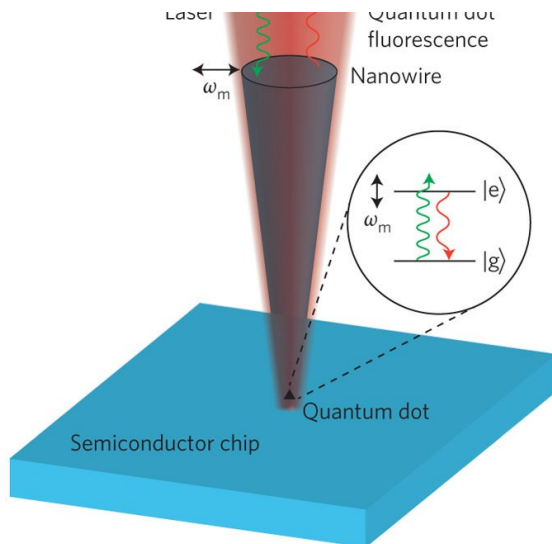
Odlišné vlastnosti elektrónu v bulkovom polovodiči a v „bodke“

pre porovnanie: častica v potenciálovej jame



$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} n^2$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{n\pi}{d} x$$

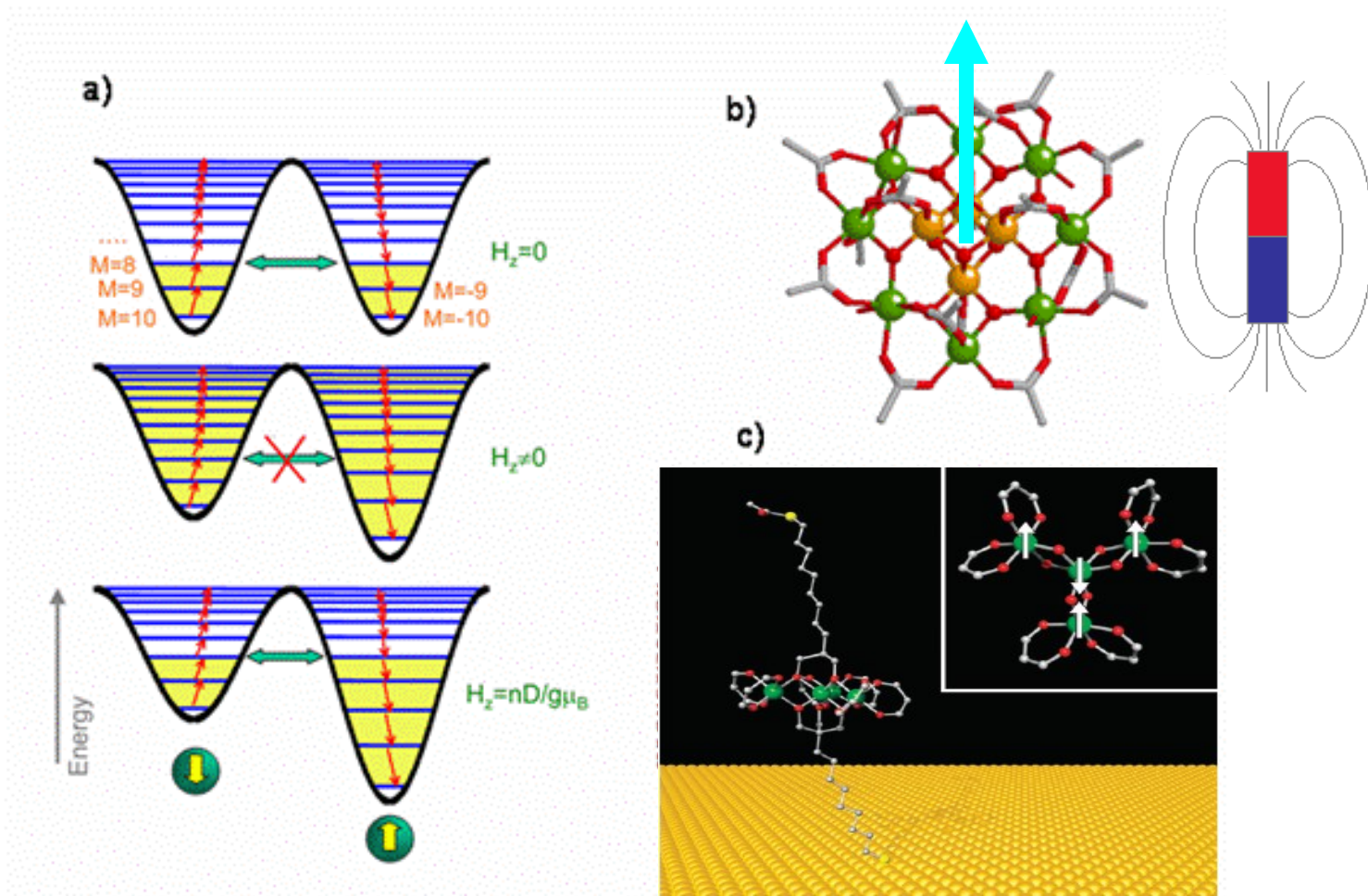


Zmena stavu – interakcia so svetlom

Výhody: odladená technológia pre IO

Nevýhody: citlivosť na poruchy v mriežke,
rychlé deje (≈ 10 ps)

Magnetické atómy (klastre)



„0“ „1“ - pamäť (klasický počítač)
 lineárna kombinácia stavov (qubit)

Výhody: (pomerne) ľahká realizácia
fyzikálne jednoduchý systém

Nevýhody: rýchle prechody medzi stavmi „0“ a „1“ (pri „vyšších“ teplotách (≈ 10 K)
usporiadanie klastrov na podložke

Problémy (niektoré):

Ako adresovať jeden qubit ?

Ako vyčítať stav jedného qubitu ?

Ako predĺžiť koherenčný čas ?

Ako priblížiť pracovnú teplotu izbovej ?

.....

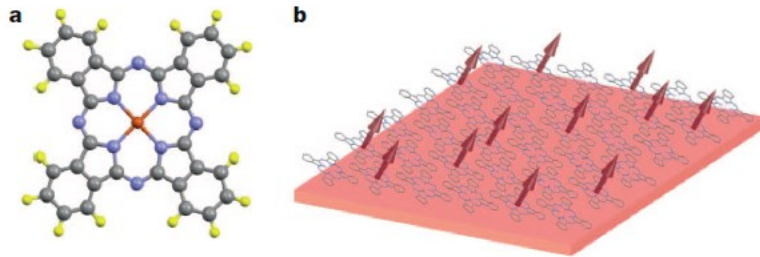
=> Mnoho prác o „qubitoch“

(nano, bio → kvantový počítač)

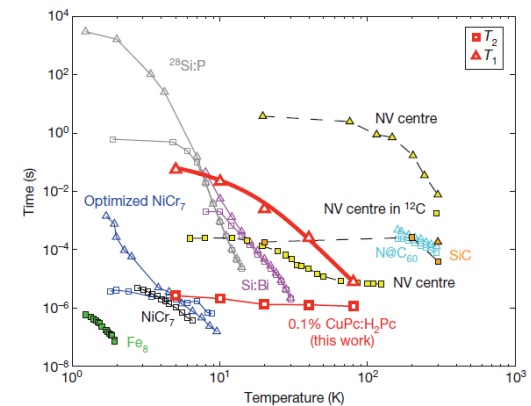
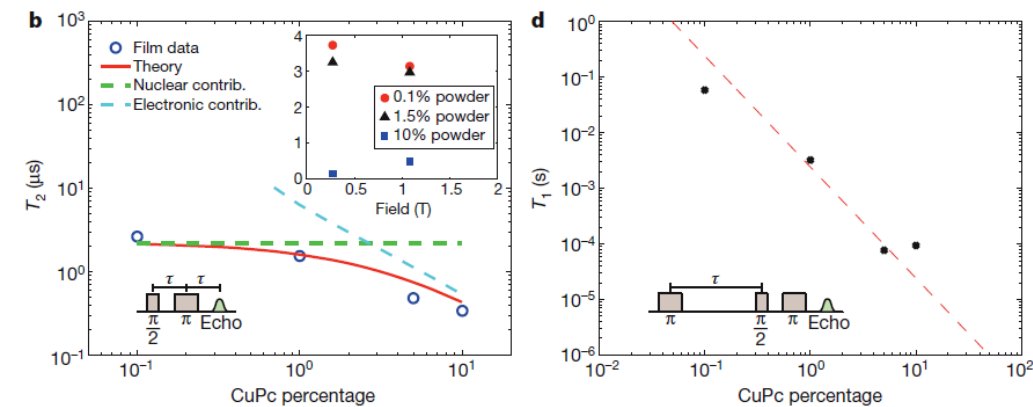
Potential for spin-based information processing in a thin-film molecular semiconductor

Marc Warner^{1†}, Salahud Din², Igor S. Tupitsyn³, Gavin W. Morley^{1†}, A. Marshall Stoneham^{1‡}, Jules A. Gardener^{1†}, Zhenlin Wu², Andrew J. Fisher¹, Sandrine Heutz², Christopher W. M. Kay⁴ & Gabriel Aeppli¹

ESR štúdium Cu ftalcyaninu (CuPC) na Kaptone



Súčasná depozícia CuPC and H₂PC
(400 nm (!!!) CuPC:H2PC film)

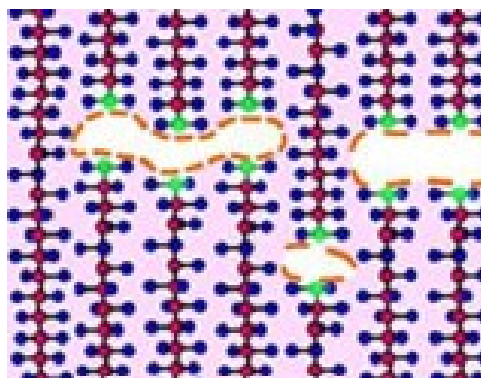


Room temperature ferromagnetism in Teflon due to carbon dangling bonds

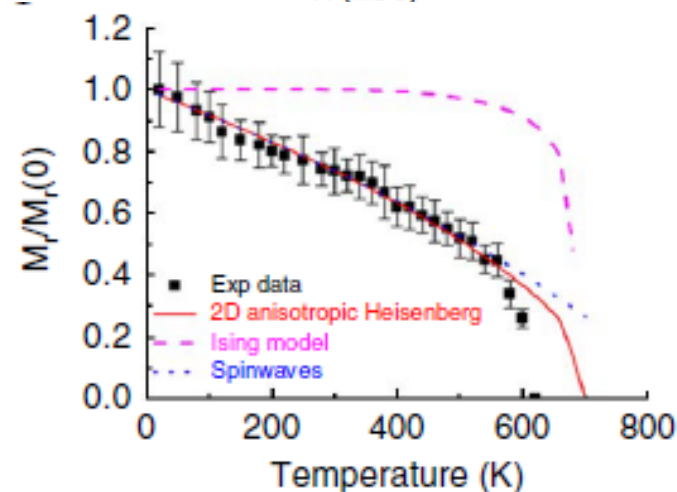
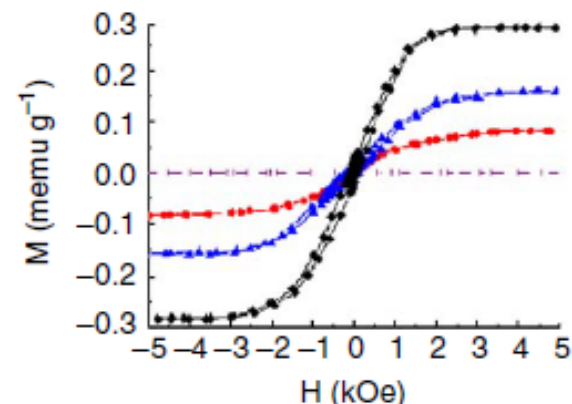
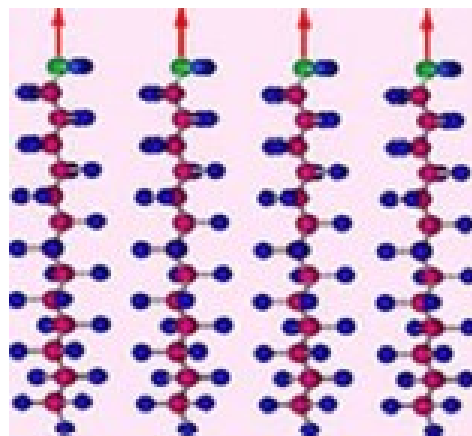
Y.W. Ma¹, Y.H. Lu^{2,3}, J.B. Yi^{1,4}, Y.P. Feng², T.S. Herng¹, X. Liu⁵, D.Q. Gao⁶, D.S. Xue⁶, J.M. Xue¹, J.Y. Ouyang¹ & J. Ding¹



$\Rightarrow$

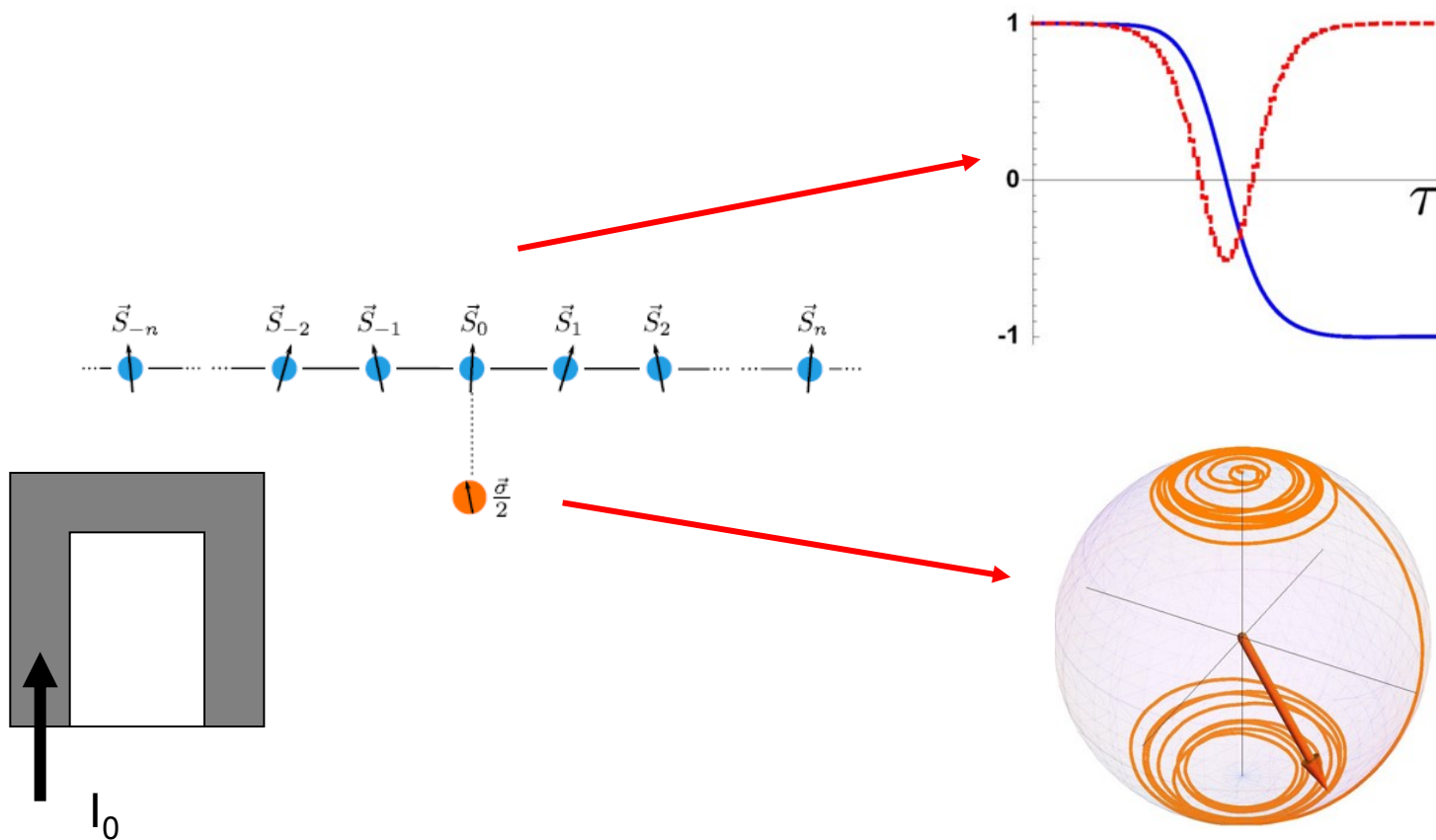


$\Rightarrow$

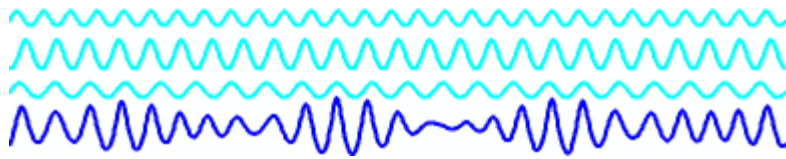


Ako adresovať qubit?

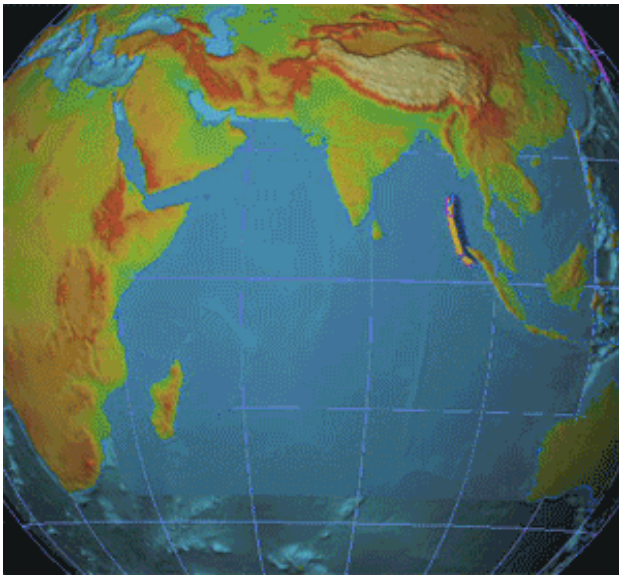
Pomocou solitónového impulzu mag. poľa



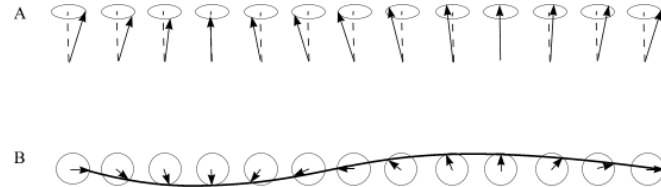
malé vlny v hlbkej vode



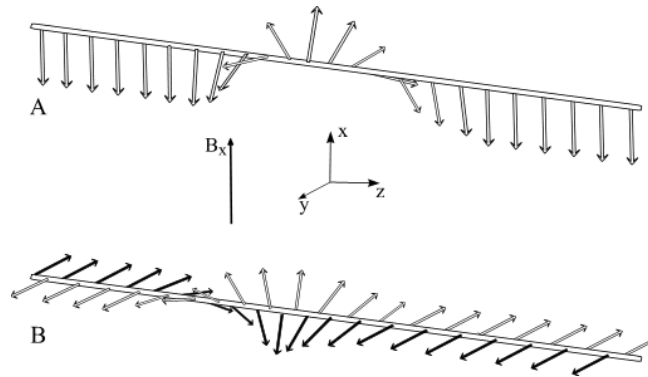
tsunami



„magnetická vlna“

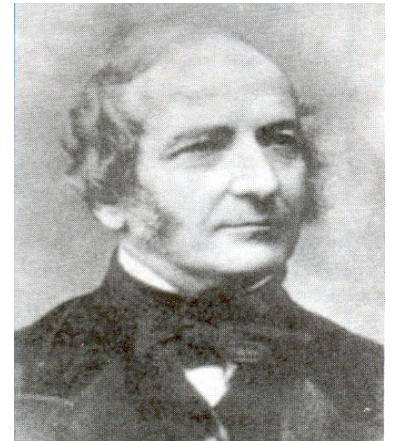


sine - Gordonov solitón



$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = m^2 \sin \phi$$

$$c=c(D,J,S) \quad m=m(J,H,S)$$

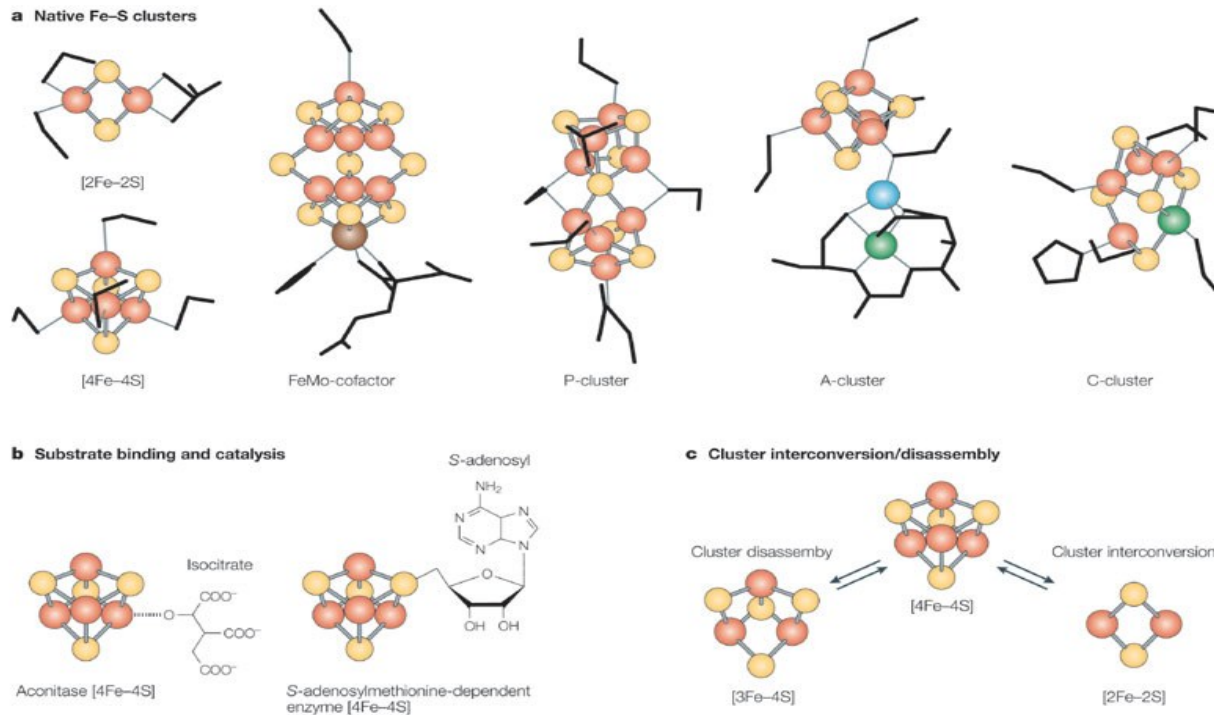


J. S. Russel, 1844
„solitary waves“

Ako zvýšiť pracovnú teplotu ?

Zvýšením energetickej bariéry, znížením magnetických interakcií

⇒ Cielená syntéza – magnetoštruktúrne korelácie (chemici)
určenie charakteristických parametrov
(z termodynamických veličín, relaxačných javov)



Spin Dynamics and Low Energy Vibrations: Insights from Vanadyl-Based Potential Molecular Qubits

Matteo Atzori,^{*,†,‡} Lorenzo Tesi,[†] Stefano Benci,^{†,‡} Alessandro Lunghi,[§] Roberto Righini,^{†,‡} Andrea Taschin,[‡] Renato Torre,^{‡,||} Lorenzo Sorace,[†] and Roberta Sessoli^{*,†,‡}

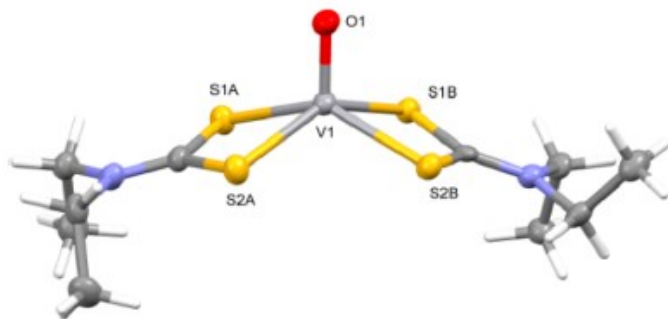
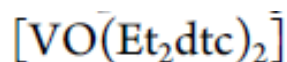
[†]Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff" & INSTM RU, Università degli Studi di Firenze, I50019 Sesto Fiorentino, Italy

[‡]European Laboratory for Nonlinear Spectroscopy, Università degli Studi di Firenze, I50019 Sesto Fiorentino, Italy

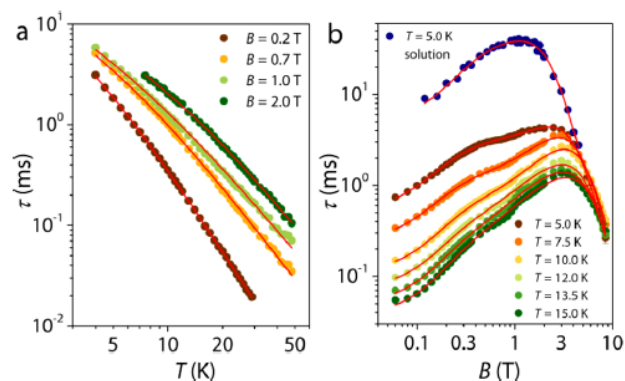
[§]School of Physics, AMBER and CRANN, Trinity College, Dublin 2, Ireland

^{||}Dipartimento di Fisica ed Astronomia, Università degli Studi di Firenze, I50019 Sesto Fiorentino, Italy

 Supporting Information

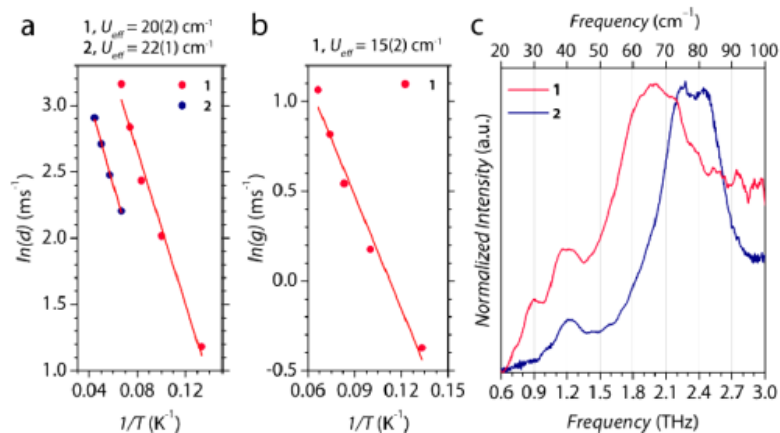


DOI: 10.1021/jacs.7b01266
J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 4338–4341



$$\mathcal{H} = \hat{I} \cdot \mathbf{A} \cdot \hat{S} + \mu_B \hat{S} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{B}$$

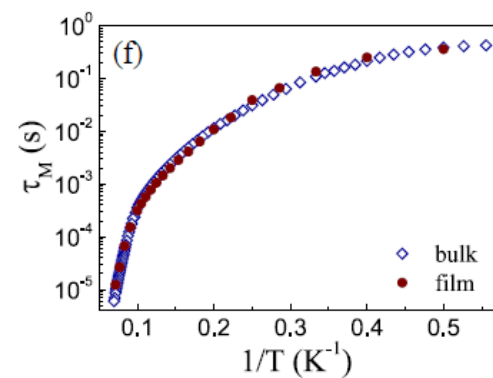
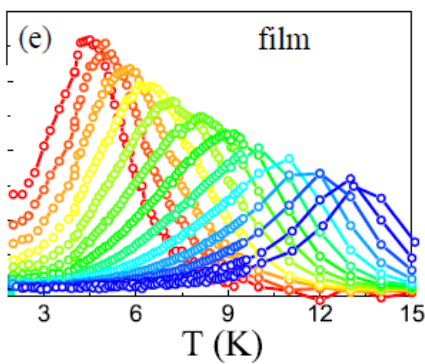
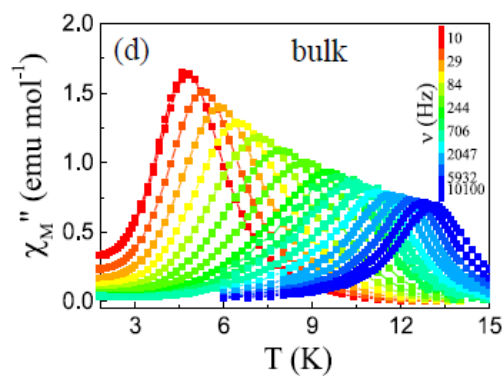
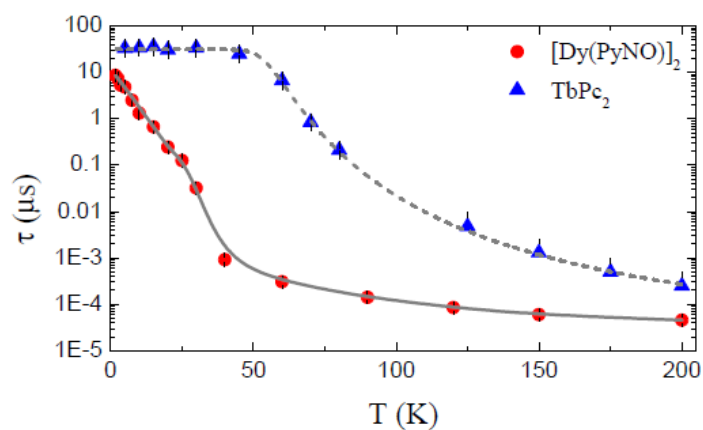
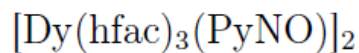
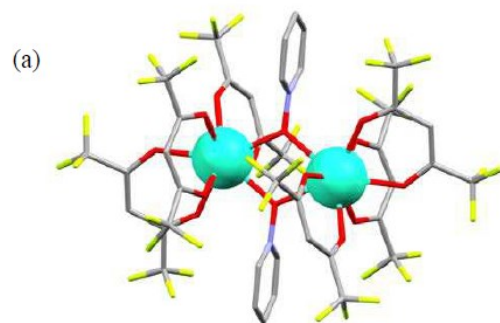
$$\tau^{-1} = cB^4 + d \frac{1 + eB^2}{1 + fB^2} + g \frac{1 + eB^2}{1 + hB^2}$$



Robust Magnetic Properties of a Sublimable Single Molecule Magnet

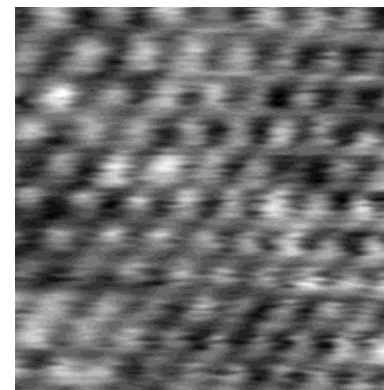
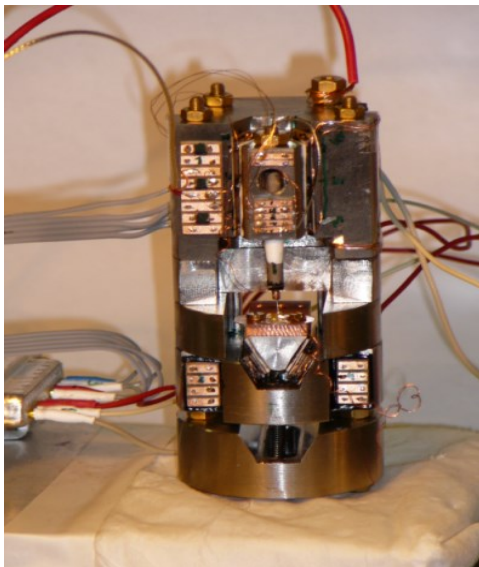
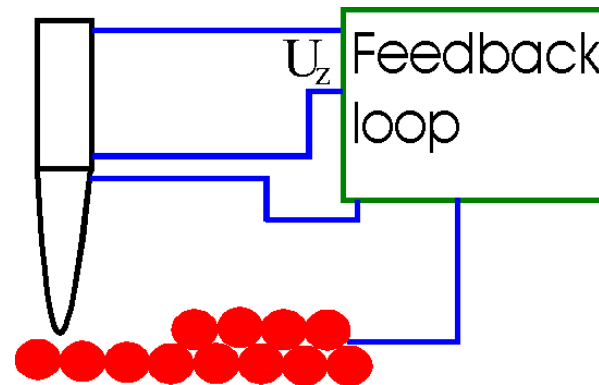
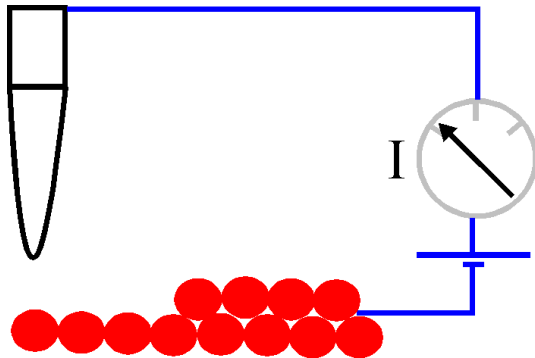
Evan Kiefl, Matteo Mannini, Kevin Bernot, Xiaohui Yi, Alex Amato, Tom Leviant, Agnese Magnani, Thomas Prokscha, Andreas Suter, Roberta Sessoli, and Zaher Salman

ACS Nano, Just Accepted Manuscript • DOI: 10.1021/acsnano.6b01817 • Publication Date (Web): 03 May 2016



Ako „prečítať“ stav magnetického qubitu (1 atómu, molekuly) ?

Použitím „nízkoteplotného ($T < 1\text{ K}$)“ STM



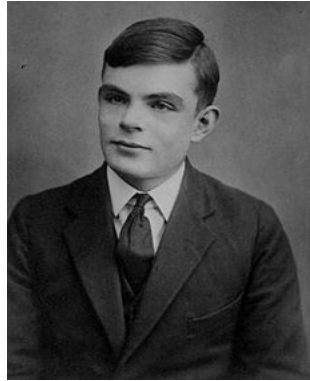
3.3nm
(LaSe)_{1.14}(NbSe)₂ @ 400mK

Záverom

Súčasný stav v „quantum computing“ – analógia s klasickými počítačmi
(1940 – 1950 teoretické základy 60 roky - rozvoj HW, 70 roky - PC



J. von Neumann



A. Turing



Apple II (1977)

Kvantové počítače

SW: kvantová informatika

HW „čokoľvek kvantové, spĺňajúce Di Vincenzov zoznam“

=> interdisciplinárna oblasť (fyzika, chémia, materiálové inžinierstvo,
nanotechnológie,)

„The large number of candidates demonstrates that the topic, in spite of rapid progress, is still in its infancy. There is also a vast amount of flexibility“

Ďakujem za pozornosť