

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Jakub Višňák

Kvantově chemické algoritmy pro kvantové počítače

Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí diplomové práce: prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc.

Studijní program:

Studijní obor: Biofyzika a chemická fyzika

Praha 2012

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval konzultantovi mé diplomové práce Mgr. Jřímu Pittnerovi Dr. Rer. nat. za cenné rady a konzultace, doporučení a zapůjčení větší části literatury a spolupráci při vytváření vědeckého článku [1]. Rád bych poděkoval vedoucímu diplomové práce, prof. RNDr. Lumobírovi Skálovi, DrSc. za řadu rad a konzultací, především ohledně problematiky *ab initio* kvantově chemických výpočtů a technické rady ohledně obsahu a struktury práce. Mnoho díky patří Mgr. Liboru Veisovi - za pomoc při programovém/počítačovém zajištění práce na problematice simulace kvantových algoritmů a za doporučení článků popisujících různé kvantové algoritmy.

Na diplomové práci jsem pracoval na Ústavu Fyzikální Chemie Jaroslava Heyrovského (ÚFCHJH AVČR). Děkuji za možnost využití výpočetního klastru ÚFCHJH k praktickému provedení počítačových simulací kvantových algoritmů.

Rád bych poděkoval Grantové agentuře ČR za finanční podporu projektu 203/08/0626, jehož součástí byl i výzkum prezentovaný v této práci.

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona.

V dne.....

podpis

Název práce: Kvantově chemické algoritmy pro kvantové počítače

Autor: Jakub Višňák

Katedra / Ústav: Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí diplomové práce: prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc., Katedra chemické fyziky a optiky

Abstrakt: Práce se zabývá simulací kvantového výpočtu diagonalizace maticové reprezentace hamiltoniánu na klasickém počítači pro dva různé rozvoje vlnové funkce v rámci limited CI (LCI) metody pro popis všech elektronů molekuly SbH v rámci Dirac-Coulombova hamiltoniánu pro dva energeticky nejnižší elektronové stavy $X 0^+$ a $A 1$ pomocí Iterative Phase Estimation Algorithm (IPEA). V simulacích je použita reprezentace evolučního operátoru $\exp(i \hat{H} \Delta t)$ pomocí „compact mapping“, v teoretické části je naznačeno jakým způsobem lze simulovat „direct mapping“. Je studován vliv různé metodiky volby vstupního odhadu vlastního vektoru pro metody IPEA A a IPEA B pro které jsou rovněž porovnány hodnoty pravěpodobnosti úspěchu p_m pro různé body disociačních křivek molekuly SbH. Je ukázáno, že pro použité LCI rozvoje a pro vstupní odhady vlastního vektoru vycházející z LCI rozvoje označovaného jako „CISD(2)“ lze obě varianty metody IPEA použít až do mezijaderné vzdálenosti¹ $R \approx 6 a_0$. Byla zkoumána závislost hodnoty p_m na překryvu vlastního vektoru se svým vstupním odhadem - $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ v případě metody IPEA B a diskutována použitelnost obou variant metody IPEA v dalších možných výpočtech.

Klíčová slova: Konfigurační interakce, Kvantové počítání, Dirac-Coulombův hamiltonián, Trotterův rozvoj, Jordan-Wignerova transformace, Iterativní odhad fáze (Iterative Phase Estimation Algorithm)

¹ a_0 značí v celé práci Bohrovův poloměr (viz seznam zkratk).

Title: Quantum computing algorithms for quantum chemistry
Author: Jakub Višňák
Department: Department of Chemical Physics and Optics
Supervisor: prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc., Department of Chemical Physics and Optics

Abstract: The topic of this study is the simulation of the quantum algorithm for the diagonalization of the matrix representation of the all-electron Dirac-Coulomb hamiltonian of the SbH molecule. Two different limited CI expansions were used to describe both the ground state ($X 0^+$) and the first excited doublet ($A 1$) by simulating the Iterative Phase Estimation Algorithm (IPEA). In the simulations numerically performed in this work, the „compact mapping“ has been employed for the representation of the evolution operator $\exp(i \hat{H} \Delta t)$; in the theoretical part of the work, the „direct mapping“ is described as well. The influence of the methods for choosing the initial eigenvector estimate is studied in both IPEA A and IPEA B variants. For those variants, the success probabilities p_m are computed for different single-points on the SbH dissociation curves. The initial eigenvector estimates based on the „CISD(2)“ method are found to be sufficient for both studied LCI-expansions up to internuclear distance $R \approx 6 a_0$. The p_m dependence on the overlap between the eigenvector in question and its initial estimate - $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ is studied for the IPEA B method. The usability of the both variants of the IPEA in possible later calculations is discussed.

Keywords: Configuration interaction, Quantum Computing, Dirac-Coulomb Hamiltonian, Trotter expansion, Jordan-Wigner transformation, Iterative Phase Estimation Algorithm

Obsah

Úvod		1
Motivace		3
1	Teoretická část	5
1.1	Princip funkce kvantového počítače	5
1.1.1	Teoretický model kvantového počítače	5
1.1.2	Stav kvantového jádra, qubit	8
1.1.2.1	Hilbertův prostor, čisté stavy	8
1.1.2.2	Operátor hustoty, smíšené stavy	11
1.1.2.3	Qutrit a qudity	14
1.1.2.4	Klasické a kvantové výpočetní modely	15
1.1.3	Operace na kvantovém jádře	20
1.1.3.1	Časový vývoj, interakce a unitární transformace	20
1.1.3.2	Unitární transformace kvantového jádra	26
1.1.3.3	Obecná měření v kvantové mechanice	38
1.1.3.4	POVM měření	40
1.1.3.5	Projektivní měření	41
1.1.3.6	Vztah projektivních a obecných měření	42
1.1.3.7	Měření ve výpočetní bázi	43
1.1.4	Kvantový algoritmus a klasická část počítače	45
1.1.4.1	Superpozice	45
1.1.4.2	Kvantový paralelismus	46
1.1.4.3	Entanglement	49
1.1.4.4	Interference	56
1.2	Programovací jazyk QCL	58
1.3	Kvantové algoritmy	59

1.3.1	Výpočetní modely	59
1.3.2	Příklady kvantových algoritmů	60
1.3.2.1	Deutschův-Jozsův algoritmus	60
1.3.2.2	Kvantová diskrétní fourierova transformace	63
1.3.2.3	Diagonalizační algoritmus	73
1.4	Konfigurační interakce	121
1.4.1	Nerelativistická CI	121
1.4.2	Relativistická CI, KRCI [50]	126
2	Simulace kvantových výpočtů	130
3	Plány do budoucna	178
	Seznam použité literatury	183
	Použitý software	187
	Seznam tabulek	188
	Seznam použitých zkratk	190

Úvod

Jak již uvedl R. Feynmann ve svém příspěvku z roku 1982 [2], chceme-li přístroj (počítač) schopný simulovat chování kvantových systémů tak efektivně, aby jeho výpočetní zdroje (velikost paměti, počet použitých hradel) rostly lineárně (nebo alespoň pomaleji než exponenciálně) s velikostí simulovaného systému, je třeba, aby tento přístroj ke zpracování informace sám využíval zákonů kvantové teorie.

Pak půjde spíše o skutečnou „simulaci podobného podobným“ než o „výpočet“ kvantového systému (ve smyslu aproximativní řešení diferenciální rovnice na klasickém počítači).

Existují i další úlohy pro které nejsou známy klasické algoritmy řešící daný problém efektivněji než kvantový algoritmus (Groverovo vyhledávání v nestrukturované databázi, Deutsch-Jozsův algoritmus, Shorův faktorizační algoritmus, ...), ale i práce jinak velmi kritická ke skutečné výpočetní síle kvantových počítačů [3] připouští, že pokud jde o simulaci jiných kvantových systémů, lze předpokládat, že unikátnost a vhodnost kvantových počítačů nebude v budoucnu zpochybněna.

Možností efektivního řešení problému vlastních čísel mnohačasticového hamiltoniánu se zabývali D. S. Abrams a S. Lloyd v práci [4]. V případě úplné konfigurační interakce (FCI) pro *ab initio* výpočty v kvantové chemii (která vede k nárokům na klasické výpočetní zdroje exponenciálně rostoucí s velikostí jednočasticové báze (a tedy i molekuly)) bylo v práci [5] ukázáno, že s použitím kvantového algoritmu je na kvantovém počítači možné dosáhnout pouze polynomiální závislosti na (kvantových) výpočetních zdrojích - plně v souladu s představou prezentovanou v [2]. Podrobný rozbor průsečíku kvantového počítání a kvantové chemie poskytuje J. D. Whitfield [6], první zmínky o experimentálním výpočtu molekuly vodíku v minimální bázi na reálném kvantovém počítači popisuje práce Lanyon a kol. [7].

Tato práce si klade za cíl prezentovat stručnou rešerši problematiky kvantového počítání obecně, algoritmu Phase Estimation a jeho iterativních verzí (IPEA A a IPEA B), tedy cest k použití kvantových počítačů pro diagonalizace unitárních, nebo hermitovských matic zvláště a aplikací na problematiku kvantové chemie. Vlastní výpočty prezentované v práci na str. 130-178 – zkoumají možnost

použití algoritmů IPEA A a IPEA B pro případ výpočtu energetické separace dvou energeticky nejnižší ležících elektronových stavů molekuly $SbH - X 0^+$ a $A 1$ (respektive závislosti této energetické separace na mezijaderné vzdálenosti) pomocí čtyřkomponentního Dirac-Coulombovského popisu v rámci omezené konfigurační interakce. Simulace kvantového algoritmu pro diagonalizaci matice byla provedena v rámci programu napojeného na kvantově-chemický program DIRAC [D]. Zkoumám vliv metodiky volby vstupního odhadu vlastního vektoru evolučního operátoru (odpovídajícího hamiltoniánu zkoumané molekuly) na pravděpodobnost úspěchu metod a porovnávám obě metody navzájem.

Kromě zjištěných závěrů (kritické hodnoty mezijaderné vzdálenosti nad které se stávají přímočaré metody volby vstupního odhadu vlastního vektoru nepoužitelnými, dobrá použitelnost metody IPEA B, pokud se v rámci každé iterace provede dostatečný počet opakování, odhady vztahů pro pravděpodobnost úspěchu metody IPEA B) považuji za důležitý mezivýsledek existenci programů, které budou po úpravách schopny pokročilejších simulací (zahrnujících například simulaci dekoherenčního procesu, kvantového šumu, nepřesnosti v aplikaci kvantových hradel, Trotterovu diskretizační chybu při aplikaci evolučního operátoru pomocí elementárních hradel (nikoli jako „orákula“ jak v této práci), atd.) jak na relativistických výpočtech molekuly SbH , tak na jiných kvantových systémech.

Motivace

Práce si klade za cíl simulovat na klasickém počítači algoritmus pro kvantový počítač sloužící k výpočtu energie molekuly v rámci vybrané varianty konfigurační interakce (relativistická CI). Budou diskutovány různé alternativy reprezentace Hilbertova prostoru molekuly (a tomu odpovídající reprezentace hamiltoniánu) pomocí qubitů (compact mapping, direct mapping) a s tím související rozklad kvantových hradel v algoritmu použitých na elementární hradla.

Kvantové počítače umožňují vykonávat řadu algoritmů s dramaticky nižšími nároky na výpočetní čas (respektive výpočetní zdroje obecně) než jaké by odpovídaly nejefektivnějšímu algoritmu pro klasický Turingův stroj. Menší část z výše zmiňovaných úloh je založena na Groverově algoritmu pro vyhledávání v nestrukturované databázi. Větší část pak vychází z kvantové Fourierovy transformace (obdoba diskrétní Fourierovy transformace pro kvantové algoritmy) a přináší exponenciální zrychlení oproti nejefektivnějším dosud známým klasickým algoritmům. Nejjednoduším příkladem z této kategorie je Deutsch-Jozsovův algoritmus, jiným příkladem může být Shorova faktorizace čísel, nebo výpočet diskrétního logaritmu. Pro účel práce důležitý algoritmus je metoda „odhadu fáze“ (Phase Estimation), respektive její interaktivní verze (IPEA, Iterative Phase Estimation Algorithm). Vstupem pro něj je unitární matice (operátor) $U \in C^{(2^n, 2^n)}$ ($\hat{U}: C^{2^n} \rightarrow C^{2^n}$)² a vektor $|\psi_0\rangle$, který je odhadem vlastního vektoru U pro který hledáme vlastní číslo U (resp. jeho „fázi“, tj. vlastní čísla U jsou parametrizována jako $\lambda_k = \exp(2\pi i (q/2^n))$, kde $q \in \langle 0; 2^n \rangle$). Výsledkem algoritmu je pak racionální³ aproximace „fáze“ vlastního čísla λ_k (algoritmus je pravděpodobnostní, ale vhodnou volbou $|\psi_0\rangle$ a parametrů algoritmu lze dosáhnout, že bude poskytovat správnou hodnotu „fáze“ s pravděpodobností větší než $p = 0,5$, což umožňuje opakovaným použitím algoritmu tuto pravděpodobnost dále navyšovat až k $p \rightarrow 1$.

² Respektive 2^p -té mocniny této matice/operátoru, kde p je přirozené číslo, nebo nula.

³ $(q/2^n)$, kde $q \in \{0, 1, 2, \dots, 2^n - 1\}$.

Úplná konfigurační interakce (FCI) je (v limitě zvětšující se báze jednočásticových funkcí (v limitě poskytující úplnou bázi daného prostoru jednočásticových funkcí)) spolehlivá metoda pro nalezení přesných energií stacionárních stavů více-částicového kvantového systému (tj. řešení stacionární Schrödingerovy, Diracovy, Dirac-Breitovy, nebo jiné (integro-)diferenciální rovnice (v kvantové chemii) pro molekulu). Exponenciální nárůst dimenze Hilbertova prostoru ve kterém je hledáno řešení vzhledem k počtu částic (velikosti molekuly) a mocninný nárůst vzhledem k velikosti jednočásticové báze (pro danou molekulu) však u FCI vede k exponenciální časové složitosti pro implementaci na klasických počítačích, což znamená praktickou neškálovatelnost metody. Vhodná implementace algoritmu IPEA na kvantovém počítači má však vzhledem k velikosti molekuly pouze polynomiální časovou složitost (hodnocenou podle počtu elementárních kvantových hradel potřebných pro vykonání algoritmu) a vyžaduje výpočetní zdroje o počtu qubitů lineárně závislém na velikosti počítaného kvantového systému (např. počtu elektronů v molekule).

1 Teoretická část

1.1 Princip funkce kvantového počítače

1.1.1 Teoretický model kvantového počítače

Kvantový počítač (v teorii informace pak jeho model – kvantový Turingův stroj, nebo také „Univerzální kvantový počítač“) je zařízení, které využívá vlastností charakteristických pro kvantové systémy (v této práci se omezím na kvantově-mechanické systémy) ke zpracování informace (popř. provádění výpočtů). V širším kontextu můžeme chápat kvantový počítač jako jeden z mnoha případů využití konkrétního fyzikálního modelu reality (kvantová mechanika) pro zpracování informace, jinými případy mohou být klasický počítač (klasická fyzika), nebo naopak počítač využívající komplikovanější fyzikální modely⁴.

V knize [8] je model kvantového počítače⁵ charakterizován pomocí *kvantového jádra* nesoucího kvantovou informaci a klasické části⁶ obsahující *klasickou paměť* včetně *kódu pro algoritmus* popisující jaká kvantová hradla (unitární operátory působící na stav kvantového jádra) a jaká měření (měření na části nebo celém kvantovém jádře) mají být provedena (provádění těchto operací a jejich synchronizaci s průchodem kódu algoritmu jakož i klasickými operacemi nad

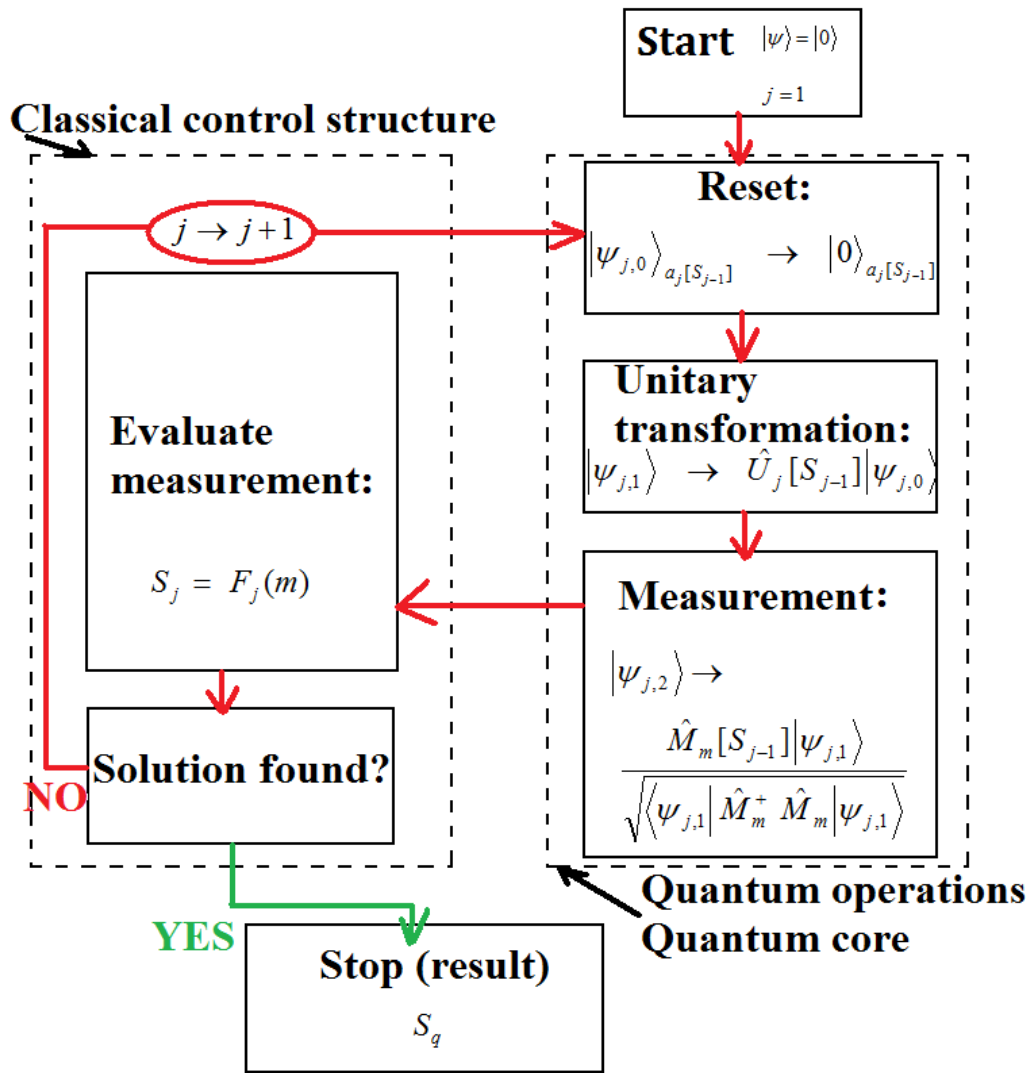
⁴ Kvalitativně pokročilejší výpočetní sílu by například teoreticky mohly poskytnout: kvantová teorie ve spojení s uzavřenými časopodobnými smyčkami v časoprostoru, kvantová gravitace [9], nebo různé modifikace kvantové teorie (nelineární, s hradly, které jsou invertovatelná, ale neunitární, s jiným pravidlem pro výpočet pravděpodobností než-li $p_i = |\Psi_i|^2$ (např. $p_i = |\Psi_i|^p$ pro $p \neq 2$) [3], [10].

⁵ V této [8] knize je takto ve skutečnosti popisována architektura programovacího jazyka QCL (Quantum Computing Language) – meta-programovací jazyk fungující na (pravděpodobnostním) klasickém počítači, který kontroluje chod kvantového jádra. V některých případech je za kvantový počítač označováno pouze kvantové jádro samo, popřípadě jádro a sada instrukcí (někdy obsahujících jen unitární transformace, jindy i měření). Takové definice jsou důležité a účelné z hlediska teorie (kvantové) informace a jejího zpracování a jsou zajímavé např. pro porovnání Klasického a Kvantového Turingova stroje, nicméně nejsou účelné pro první seznámení s tím jak kvantové zpracování informace funguje v praxi. Proto je uvádím až dále označené skutečně jako matematické definice.

⁶ Na obr 1 znázorněné levým obdelníkem s přerušovanou hranicí.

klasickou paměť má na starosti *interface*). Výsledky prováděných měření pak vstupují do zpracování klasické informace uvnitř klasické paměti a mohou (a ve většině netriviálních kvantových algoritmů tomu tak je) zpětně ovlivňovat typ a pořadí aplikovaných kvantových hradel i typ a pořadí dalších měření prováděných na kvantovém jádře.

Tento model je velmi dobře vystihnout v knize [8] v diagramu Fig. 2.1, který jsem převzal, graficky upravil a doplnil o popis změny stavu kvantové jádra i klasické části kvantového počítače – viz obr 1, kde kvantovým jádrem je kvantový systém X popisovaný stavovým vektorem $|\psi\rangle$, respektive $|\psi_{j,k}\rangle$. Stav $|0\rangle$ odpovídá pevně danému ketu tzv. „výpočetní báze“ a a_j označuje kvantový registr – tj. určitý podsystem systému X .



Obr. 1: Model kvantového počítače. Během dané smyčky ($j = \text{konst.}$) může být resetování registrů přeskočeno (odpovídá prázdnému registru) a_j , unitárních operací může být více než jedna (pak je \hat{U}_j součinem jim odpovídajících operátorů), nebo naopak „ani jedna“ (\hat{U}_j pak odpovídá identitě), měření může být vynecháno (sada operátorů pro měření tak buďto působí na prázdný registr, nebo sestává z jediného operátoru – identity). Vyhodnocení měření může proběhnout také triviálně – pouze se zvýší index j o jednotku a pokračuje se na další stav klasického kódu S . Význam „Solution found“ (řešení nalezeno) je třeba vnímat v zobecněném slova smyslu jako podmínku, kdy ukončit běh výpočtu. S_q je potom jeden z (v principu mnoha) možných koncových stavů výpočtu.

1.1.2 Stav kvantového jádra, qubit

1.1.2.1 Hilbertův prostor, čisté stavy

Stav kvantového jádra $|\psi\rangle \in C^{2^N}$ (je-li v čistém stavu), popřípadě $\hat{\rho} \in C^{(2^N, 2^N)}$ (použijeme-li pro popis stavu matice hustoty, což je nezbytné, je-li ve smíšeném stavu) náleží do Hilbertova prostoru systému N rozlišitelných kvantových subsystémů (*qubitů*), jejichž Hilbertovy prostory jsou izomorfní C^2 (a kanonickou bázi označujeme v analogii s modelem klasického počítače operujícího v binární soustavě jako $\{|0\rangle, |1\rangle\}$).

Pro jednoduchost se v teorii kvantové informace obvykle pracuje s normalizovanými stavy, tj. $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ pro jednotlivé qubity a tedy i pro celkový stav (kvantového jádra)⁷. V takovém případě lze obecný stav každého qubitu popsat jako lineární kombinaci

$$|\varphi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (1)$$

kde $\alpha, \beta \in C$ jsou komplexní koeficienty, které s ohledem na normalizaci splňují podmínku

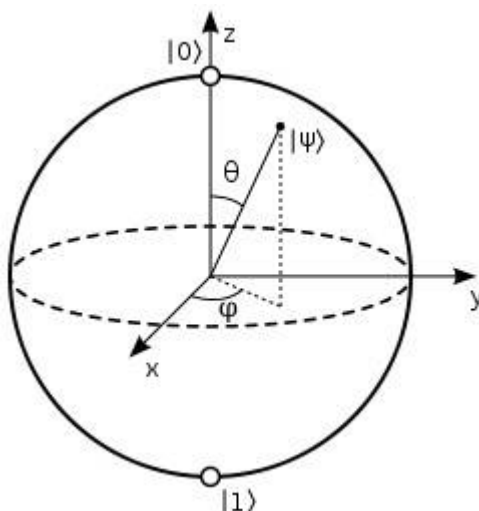
$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (2)$$

Dvojici komplexních čísel splňujících (2) lze, ignorujeme-li globální (absolutní) fázi, parametrizovat pomocí vztahů $\alpha = \cos(\theta/2)$ a $\beta = e^{i\phi} \sin(\theta/2)$, kde $\theta \in \langle 0; \pi \rangle$ a $\phi \in \langle 0; 2\pi \rangle$, tj.

$$|\varphi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle, \quad (3)$$

⁷ Této normalizaci pro smíšené stavy odpovídá podmínka $Tr \hat{\rho} = 1$.

tato parametrizace umožňuje zobrazení čistého stavu daného qubitu jako bodu na povrchu jednotkové koule v R^3 (v případě qubitů hovoříme o „Blochově sféře“), kde θ a ϕ jsou úhly obvyklé pro sférické souřadnice (viz. obr. 2)



Obr. 2: Blochova sféra, statisticky čistý stav qubitu $|\psi\rangle$ je vyjádřen jako bod na povrchu jednotkové koule v R^3 . Navíc lze ukázat, že směr \vec{r} do jakého míří jako vektor v R^3 je současně směrem ve kterém byl-li by měřen dvojnásobek spinu (tj. veličina⁸ $\hat{\sigma} \cdot \vec{r}$), bude výsledná hodnota +1 s pravděpodobností 1.

Čistý stav kvantového jádra $|\psi\rangle$ je stavem systému složeného z N rozlišitelných qubitů a podle kvantové mechaniky je jemu odpovídající Hilbertův prostor izomorfní tenzorovému součinu $\otimes_{i=1}^N C^2 \cong C^{2^N}$. Kanonická („výpočetní“) báze prostoru C^{2^N} je dána direktními součiny vektorů kanonické báze pro jednotlivé qubity a lze tedy pro čistý stav kvantového jádra $|\psi\rangle$ obecně psát

⁸ Kde $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3) \equiv (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ je vektor Pauliho matic působících jako operátory na Hilbertově prostoru daného qubitu (C^2). Jejich tvary uvádím níže:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1=0}^1 \sum_{j_2=0}^1 \cdots \sum_{j_N=0}^1 \alpha_{j_1, j_2, \dots, j_N} |j_1\rangle \otimes |j_2\rangle \otimes \cdots \otimes |j_N\rangle, \quad (5)$$

kde $\alpha_{j_1, j_2, \dots, j_N}$ jsou komplexní amplitudy pravděpodobnosti splňující (7). Nebo alternativně, uvážíme-li, že j_1, j_2, \dots, j_N lze vnímat jako číslice binárního zápisu jediné celočíselné proměnné $\tilde{j} \in \{0; 1; \dots; 2^N - 1\}$ (v opačném pořadí nežli jsou uvedeny v (5)) lze výraz na pravé straně (5) zapsat jako

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^N-1} \tilde{\alpha}_j |\tilde{j}\rangle, \quad (6)$$

kde $|\tilde{j}\rangle = \otimes_{i=1}^N |j_i\rangle$. Požadavek normalizace stavu jádra pak vede na následující omezení pro amplitudy pravděpodobnosti

$$\sum_{j=0}^{2^N-1} |\tilde{\alpha}_j|^2 = 1. \quad (7)$$

Stav kvantového jádra tedy odpovídá superpozici všech 2^N možných kvantových analogů klasických stavů N bitové paměti. Množství „teoretické“ informace (odpovídající množství rozvojových koeficientů na pravé straně (6)), která je tak v kvantovém jádře obsažená tak s počtem qubitů roste nikoli lineárně, ale exponenciálně. Informace skrytá ve 2^N amplitudách pravděpodobnosti však není přístupná měření a po měření (na všech qubitech, ve výpočetní bázi) se systém nachází vždy v jediném ze stavů popsatečných N bity⁹.

Definice 1: Kvantový registr

Podobně jako u klasických počítačů, má smysl zavést pojem registru. *Kvantovým registrem* budu dále rozumět libovolnou uspořádanou k -tici navzájem

⁹ Nicméně, jak bude později ukázáno, přesto lze šikovným způsobem využít paralelní přítomnost všech 2^N komponent a jejich paralelní zpracovatelnost pomocí kvantových hradel, pokud využijeme interference a potřebnou informaci „shromáždíme“ s velkou pravděpodobností do jediné amplitudy pravděpodobnosti (pro daný qubitový registr).

různých qubitů kvantového jádra ($k \in Z, 0 \leq k \leq N$), k pak budu nazývat *velikostí kvantového registru*.

1.1.2.2 Operátor hustoty, smíšené stavy

Při studiu vlivu kvantového šumu a dekoherence na výpočet kvantového počítače, ale o pro studium stavu kvantových registrů entanglovaných s qubity, které nejsou jejich součástí¹⁰ je nezbytné zavést pojem (stavové) matice (operátoru) hustoty $\hat{\rho}$ stavu k -qubitového registru: operátor hustoty $\hat{\rho}$ k -qubitového registru je pozitivně-semidefinitní operátor $\hat{\rho} : C^{2^k} \rightarrow C^{2^k}$, který má jednotkovou stopu, tj. $Tr \hat{\rho} = 1$. Z této abstraktní definice vyplývá, že existuje (nikoli jednoznačně určená) báze b ortonormálních čistých stavů k -qubitového registru $b = \{|\psi_i\rangle \mid i \in \{0; 1; \dots; 2^k - 1\}\}$ taková, že lze psát

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^{2^k-1} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (8)$$

kde $p_i \geq 0$ odpovídají pravděpodobnostem, že daný k -qubitový registr bude nalezen ve stavu¹¹ $|\psi_i\rangle$, z požadavku jednotkové stopy $\hat{\rho}$ tak plyne přirozený vztah pro pravděpodobnosti p_i

¹⁰ Tj. stav kvantového jádra v takovém případě nelze napsat jako direktní součin stavů uvažovaného k -qubitového reistru a $(N-k)$ -qubitového podsystemu.

¹¹ Je třeba se vyvarovat omylu, že kvantový registr popsáný operátorem hustoty $\hat{\rho}$ je možné (po měření provedeném na všech qubitech registru) nalézt pouze ve stavech báze b , nebo, že tyto jeho možné čisté stavy jsou nějakým způsobem preferované. Kvantový registr popsáný operátorem hustoty $\hat{\rho}$ může být (v závislosti na charakteru měření – uvažujme však jen ta prováděná na všech qubitech registru) nalezen v libovolném stavu $|\psi\rangle \in C^{2^k}$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ s pravděpodobností

$$p[|\psi\rangle] = \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle, \quad (10)$$

je-li tato nenulová.

$$\sum_{i=1}^{2^k-1} p_i = 1. \quad (9)$$

Obsahuje-li suma nezáporných čísel (9) jediný člen (označme jej p_I), tj. $p_I = 1$ (a tedy $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$) je k -qubitový registr v *čistém stavu* $|\psi\rangle \in C^{2^k}$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ a matice hustoty tak představuje pouze alternativní způsob reprezentace tohoto stavu¹². Obsahuje-li suma (9) více nenulových sčítanců řekneme, že daný kvantový registr se nachází ve *smíšeném stavu*.¹³ Lze ukázat, že výše zmíněná definice nezávisí na zvolené bázi diagonalizující¹⁴ matici hustoty $\hat{\rho}$, podobně jako na bázi nezávisí pojem stopy a tedy ani následující definice čistého a smíšeného stavu:

Definice 2: Čistý a smíšený stav

Bud' $\hat{\rho}$ operátor hustoty popisující stav kvantově-mechanického systému. Pak platí vždy

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1. \quad (11)$$

Platí-li vztah (11) s rovností, tj. $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$, pak $\hat{\rho}$ popisuje čistý stav. Platí-li ve vztahu (11) ostrá nerovnost, tj. $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) < 1$, pak $\hat{\rho}$ popisuje smíšený stav.

Operátor hustoty pro jediný qubit

Lze ukázat, že operátor hustoty $\hat{\rho}$ pro jediný qubit lze zapsat ve tvaru

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \vec{r} \cdot \hat{\sigma}), \quad (12)$$

¹² Narozdíl od reprezentace stavovým vektorem zde není volnost ve volbě globální fáze.

¹³ Popis smíšeného stavu pomocí jediného vektoru v Hilbertově prostoru narozdíl od stavu čistého není možný.

¹⁴ Čistý stav lze charakterizovat také jako stav, kterému odpovídá operátor hustoty s jednorozměrným nosičem (tj. podprostorem na kterém je jemu odpovídající kvadratická forma kladná pro nenulové vektory), kdežto smíšenému stavu odpovídá operátor hustoty s vícerozměrným nosičem.

kde \hat{I} je jednotkovým operátorem na prostoru C^2 a $\vec{r} \in R^3$ je vektorem reálných čísel, jehož norma splňuje

$$|\vec{r}| \leq 1. \quad (13)$$

Lze ukázat, že pro rovnost ve vztahu (13) získáme $\hat{\rho}$ odpovídající čistému stavu, který je až na případný faktor globální fáze popsatelný pomocí stavového vektoru (3), kde úhly θ a ϕ mají význam sférických úhlů popisujících orientaci vektoru \vec{r} v prostoru tak jak je naznačeno v Obr. 2¹⁵. Zobrazení pomocí Blochovy sféry tak lze

¹⁵ Lze ukázat, že operátor hustoty $\hat{\rho} : C^2 \rightarrow C^2$ lze kromě tvaru (12) psát také ve tvaru

$$\hat{\rho} = p_+ \hat{P}_+[\vec{u}] + p_- \hat{P}_-[\vec{u}], \quad (14)$$

kde $\hat{P}_+[\vec{u}]$ je projektor na vlastní funkci operátoru $\hat{\sigma}[\vec{u}] = (\vec{u} \cdot \hat{\sigma})$ odpovídající vlastní hodnotě +1 (označme ji ketem $|\sigma[\vec{u}] = +1\rangle$), $\hat{P}_-[\vec{u}]$ je pak projektor na vlastní funkci stejného operátoru odpovídající vlastní hodnotě -1 (označme ji ketem $|\sigma[\vec{u}] = -1\rangle$), vektor \vec{u} je jednotkový vektor stejného směru jako vektor \vec{r} ve vyjádření (12) (tj. $\vec{u} = \vec{r}/|\vec{r}|$). Pro koeficienty p_+ a p_- pak platí $0 \leq p_- \leq p_+ \leq 1$ a navíc:

$$p_+ = \frac{1}{2}(1 + |\vec{r}|), \quad p_- = \frac{1}{2}(1 - |\vec{r}|). \quad (15)$$

To znamená, že lze také psát

$$\hat{\rho} = p_+ |\sigma[\vec{u}] = +1\rangle\langle\sigma[\vec{u}] = +1| + p_- |\sigma[\vec{u}] = -1\rangle\langle\sigma[\vec{u}] = -1| \quad (16)$$

a koeficienty p_+ a p_- odpovídají pravděpodobnostem v rozvoji (8). Při odvození lze s výhodou využít snadno prokazatelného faktu, že projektor na char.podprostor operátoru $\hat{\sigma}[\vec{u}] = (\vec{u} \cdot \hat{\sigma})$ (pro vlastní hodnotu +1) má tvar pravé strany (12), kde namísto vektoru \vec{r} figuruje jednotkový vektor \vec{u} .

přirozeně rozšířit i na smíšené stavy s tím, že smíšeným stavům odpovídá vnitřek Blochovy sféry¹⁶, kdežto čistým stavům její povrch (hranice).

1.1.2.3 Qutrit a qudity

Tak jako teorie klasické informace zná jednotku trit – odpovídající třem možným klasickým stavům – 0, 1, 2 (popřípadě -1; 0; +1), lze v kvantové teorii informace zavést analogický pojem qutritu, tedy systému, který se může nacházet ve třech navzájem plně rozlišitelných (tzn. ortogonálních) stavech (bázi pro ně budu číslovat podle vyvážené trojkové soustavy¹⁷), tj. lze jej popsat normalizovaným ketem $|\varphi^{(3)}\rangle \in C^3$, $\langle\varphi^{(3)}|\varphi^{(3)}\rangle=1$

$$|\varphi^{(3)}\rangle = \alpha_{-1}|-1\rangle + \alpha_0|0\rangle + \alpha_{+1}|+1\rangle, \quad (17)$$

kde α_{-1} , α_0 a α_{+1} jsou komplexní rozvojové koeficienty vektoru $|\varphi^{(3)}\rangle$ vzhledem ke kanonické („výpočetní“) bázi $\{|-1\rangle, |0\rangle, |+1\rangle\}$, které s ohledem na normalizaci splňují

$$\sum_{j=-1}^{+1} |\alpha_j|^2 = 1. \quad (18)$$

Podobně jako v klasické teorii informace, ani v případě kvantové teorie informace nepřináší použití qutritů (popř. quditů pro vyšší d , viz níže) žádné kvalitativní zlepšení a jedná se tak pouze o jiný způsob reprezentace informace. Nicméně se ukazuje, že praktické realizace qutritů bývají robustnější vzhledem k dekoherenci [11]. Přímá manipulace kvantových hradel s qutrity však bývá náročná (proto se

¹⁶ Včetně počátku odpovídající „maximálně smíšenému“ stavu qubitu $\hat{\rho} = \hat{I}$.

¹⁷ Také v souvislosti s jednou z možných realizací qubitů, qutritů a dalších quditů pomocí projekce spinu rozlišitelných mikrosystémů do pevně zvoleného směru („3. osa“), kdy qutrit odpovídá spinovým stavům částice se spinem $S = 1$.

obvykle využívá entanglementu s qubitem na který dané kvantové hradlo působí [12]).

Podobným způsobem jako byly zavedeny qubit a qutrit můžeme hovořit obecně o quditu, tj. systému s d možnými ortogonálními stavy, tj. stavovém vektoru v d -rozměrném komplexním Hilbertově prostoru C^d . Například článek [13] popisuje experimentální realizaci quditu pomocí supravodivé fáze pro $d = 5$. Pro qudity lze odvodit podobné vztahy a podobnou reprezentaci jako v případě qubitů.

1.1.2.4 Klasické a kvantové výpočetní modely

Turingův stroj

V následující definici popíšeme Turingův stroj. Pro přiblížení definice však uvádím tento krátký úvod – Turingův stroj M si lze představit jako mechanické zařízení složené z čtecí/zapisovací hlavy H , pásky P (na jednom konci ukončené, na druhém nekonečné) pro uložení informace ve formě symbolů z množiny Γ (páska je rozdělena na políčka, každé políčko obsahuje právě jeden symbol¹⁸). Speciálním symbolem je „prázdný symbol“ $b \in \Gamma$ odpovídající prázdnému políčku pásky.

Pod „stavem“ si lze představit pětice (n_l, s_1, s_2, m, n_x) , kde n_l je přirozené číslo číslující stavu¹⁹, $s_1 \in \Gamma$ označuje přípustný obsah na pásce před vykonáním zápisu, $s_2 \in G$ označuje obsah, který má být na pásce po vykonání zápisu, $m \in \{L, R\}$ (popř. $\{L, R, N\}$) označuje jakým směrem se má čtecí/zapisovací hlava H posunout ($L = \text{left}$ – na políčko vlevo od současného, $R = \text{right}$ – na políčko vpravo od současného, popřípadě $N = \text{no shift}$ – čtecí/zapisovací hlava se neposune). Konečně, n_x označuje číslo následujícího stavu po stavu n_l .

Množina Q , případně množina Q společně s přechodovou funkcí δ tedy představuje/í seznam instrukcí pro práci hlavy H na pásce P . Na začátku je Turingův stroj v počátečním stavu $q_0 \in Q$ s hlavou H na prvním políčku pásky. Na základě

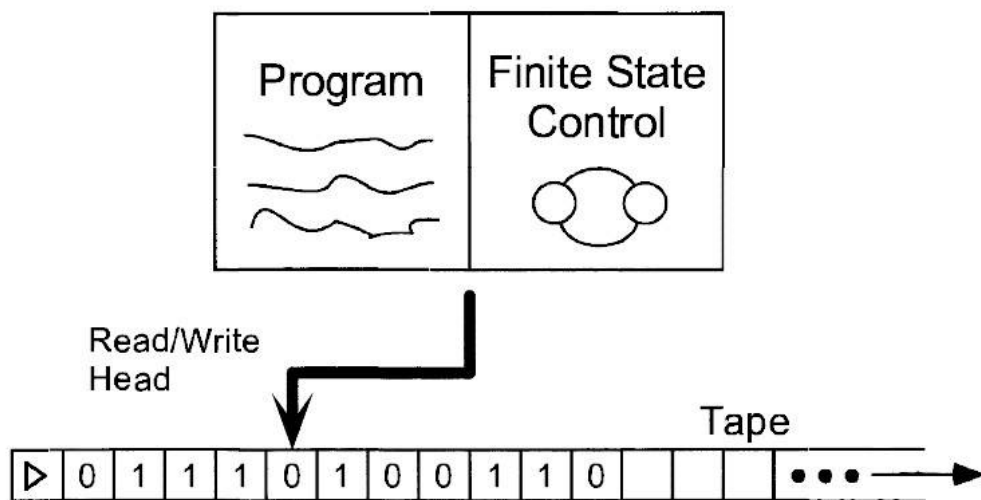
¹⁸ Mezi „symboly“ tímto řadím i prázdný symbol $b \in \Gamma$, který označuje prázdné políčko.

¹⁹ Zřejmě bude množina Q pro daný Turingův stroj obsahovat pro dané n_l právě $\|S\|+1$ pětíc, aby byl Turingův stroj připraven reagovat v daném stavu na všechny možné symboly, které může hlava H přečíst z obsahu pásky.

kombinace obsahu pásky s a takové pětice $(n(q_0), s_1, s_2, m, n_x)$, že $s_1 = s$ provede hlava zápis s_2 na současné (první) políčko, posun m a z množiny Q se vybere instrukce (pětice) s prvním číslem rovným n_x a takovým druhým symbolem, jaký je na současném políčku pásky, ..., tento proces se opakuje až do okamžiku, kdy je aktuálním stavem jeden z množiny $F \subseteq Q$. Pak běh Turingova stroje končí.

Přechod ze stavu do stavu nemusí být zajištěn pomocí prvního a posledního čísla pětice z Q , ale prvky Q mohou být trojice (s_1, s_2, m) a přechody mezi nimi bude definovat přechodová funkce δ , která každému stavu z Q , který není finální (nepatří do F) přiřazuje jiný stav z Q . Popřípadě lze do definičního oboru a oboru hodnot funkce vložit i informaci o symbolu na současném políčku pásky před vykonáním instrukce, po vykonání instrukce a o následném pohybu hlavy H . Pak stavy z Q nejsou trojice, pětice ani jinak strukturované objekty, ale čistě navzájem rozlišitelné prvky abstraktní množiny (jako je tomu v definici 3).

Smyslem běhu bylo na základě algoritmu rozepsaného do instrukcí Q (popřípadě instrukcí uložených v Q a δ) změnit informaci zapsanou na pásce P .



Obr. 3: Turingův stroj. *Tape* = páska P , symbol $\blacktriangleright \in \Sigma \subseteq \Gamma$ označuje začátek pásky, „*Read/Write Head*“ = hlava H , „*Program*“ je seznamem instrukcí (n_1, s_1, s_2, m, n_x) , popsaným v druhém odstavci kapitoly „Turingův stroj“ a „*Finite State Control*“ je zařízení, které instrukce vykonává. Ilustrace byla převzata z [14] (str. 123, kapitola „Models for computation“).

Definice 3: Klasický Turingův stroj (Hopcroft a Ullman, 1979)

(Jednopáskový) *Turingův stroj* M je uspořádanou sedmicí $M = (Q, \Gamma, b, \Sigma, \delta, q_0, F)$, kde

Q je konečná, neprázdná množina stavů

Γ je konečná, neprázdná množina symbolů abecedy pro záznam na pásce

$b \in \Gamma$ je „prázdný symbol“ (jeho výskyt na pásce je přípustný nekonečněkrát v libovolném okamžiku výpočtu)

$\Sigma \subseteq \Gamma \setminus \{b\}$ je množinou vstupních symbolů

$q_0 \in Q$ je počátečním stavem Turingova stroje

$F \subseteq Q$ je množinou koncových stavů

$\delta: Q \setminus F \times \Gamma \rightarrow Q \times \Gamma \times \{L, R\}$ je „parciální funkcí“ nebo „přechodovou funkcí“, kde L odpovídá posunu na pásce doleva a R posunu doprava²⁰.

Poznámka 1: O přechodové funkci δ

Pro další zobecnění definice Turingova stroje je vhodné definovat přechodovou funkci δ jako zobrazení

$$\delta: (Q \setminus F \times \Gamma) \times (Q \times \Gamma \times \{L, R\}) \rightarrow Y, \quad (19)$$

kde Y je v případě odpovídajícímu předchozí definici 3 dvouprvkovou množinou $\{0, 1\}$ a δ z poznámky 1 tak odpovídá charakteristické funkci množiny dané jako podmnožina kartézského součinu definičního oboru δ z definice 3 a oboru hodnot funkce δ z definice 3, tj. množinou všech prvků tvaru $(x, \delta(x))$, kde $x \in D_\delta$, kde D_δ je definičním oborem δ z definice 3.

²⁰ Existují i varianty, připouštějící instrukci „N“ („No shift“, tedy „žádný posun čtecí hlavy“). Toto doplnění však nevede k principiálnímu zvýšení výpočetní síly Turingova stroje.

Definice 4: Pravděpodobnostní Turingův stroj

Bud' T_M Turingův stroj dle předchozí definice 3, pouze přechodová funkce necht' je definována způsobem uvedeným v poznámce 1, kde ovšem množinou Y bud' interval $\langle 0; 1 \rangle$. Funkční hodnoty přechodové funkce pak mají význam pravděpodobností přechodu a běh výpočtu je pravděpodobnostní – přesun ze stavu do stavu se děje náhodně s pravděpodobností danou funkcí δ .

Poznámka 2: Podmínka lokální přípustnosti pravděpodobností

Aby byla existence T_M dle předchozí definice 4 realisticky přípustná, je nutné předpokládat, že (v dalším pro jednoduchost označím $Q \setminus F = Q_F$) platí $\forall (\sigma_1, q_1) \in Q_F \times \Gamma$:

$$\sum_{(\sigma, q, d) \in Q \times \Gamma \times \{L, R, N\}} \delta(\sigma_1, q_1, \sigma, q, d) = 1. \quad (20)$$

Tato podmínka říká, že součet pravděpodobností přechodu z libovolného nekonečného stavu do všech ostatních stavů musí být roven jedné.

Poznámka 3: Pojem konfigurace

Kromě pojmu „stavu“ použitého v definici Turingova stroje a užitečného k praktickému popisu vykonávání instrukcí hlavou H na pásce P Turingova stroje je vhodné zavést pojem stavu odpovídajícího celému obsahu pásky (resp. té její nejkratší části, která je během dané třídy výpočtů zaplněna symboly z QF), pozici čtecí hlavy na pásce. Takový „stav“ budu označovat (v souladu s terminologií v [15]) jako „konfiguraci“.

Definice 5: Kvantový Turingův stroj

Kvantový Turingův stroj lze definovat zobecněním funkce δ z definice 4. Uvažujme přechodovou funkci α

$$\alpha: (Q \setminus F \times \Gamma) \times (Q \times \Gamma \times \{L, R\}) \rightarrow C_{\langle 0,1 \rangle}, \quad (21)$$

kde $C_{\langle 0,1 \rangle}$ je množinou všech komplexních čísel $z \in C$, že jejich absolutní hodnota $|z| \in \langle 0, 1 \rangle$, tedy lze psát $z = r \exp(i \phi)$, kde $\phi \in R$ a $0 \leq r \leq 1$. Hodnoty přechodové funkce a tentokrát neudávají pravděpodobnosti přechodu mezi stavy, ale amplitudy pravděpodobnosti. Pravděpodobnosti přechodu pak odpovídají čtverci absolutní hodnoty odpovídající amplitudy. Pravděpodobnost nalezení Turingova stavu v dané konfiguraci je však dána nikoli součtem pravděpodobností různých cest k této konfiguraci (v rámci stejné hloubky zanoření ve výpočetním stromu [15]), ale čtvercem absolutní hodnoty součtu pravděpodobnostních amplitud. To vytváří pole pro možnost vzniku konstruktivní i destruktivní interference a s tím spojenou možnost řešení výpočetních úloh efektivněji než v rámci klasického Turingova stroje (ať již deterministického, nebo pravděpodobnostního) a jemu ekvivalentních zařízení (klasický počítač) [15], [16].

Klasické a kvantové logické obvody

Pro popis kvantového počítání je ale daleko užitečnějším modelem nežli Turingův stroj, nebo výpočetní strom [15], [16] model logického obvodu [14] (str. 129). V klasickém případě logický obvod sestává z vodorovných čar („vodičů“) jdoucích v diagramu zleva doprava a odpovídajících logickým bitům (prvkům dvouprvkové množiny $\{0, 1\}$), přes ně jsou v diagramu obvodu nakresleny odelníky („boxy“) odpovídající logickým hradlům, tedy boolovským funkcím s obecně k -vstupními bity a l -výstupními bity (viz níže (22))

$$f: \{0, 1\}^k \rightarrow \{0, 1\}^l. \quad (22)$$

V rámci klasických logických obvodů obvykle požadujeme, aby obvod byl „acyklický“, tedy aby se „vodiče“ „nevracely“ (pokud budeme vnímat chod logickým obvodem zleva doprava jako chod (při zpracování informace) v čase). Je však umožněno, aby vodiče končily v určitém hradle, nebo aby byly v určitém bodě „rozvětveny“ (operace FANOUT má charakter boolovské funkce $f(x) = (x, x)$ ($f: \{0,$

$1\} \rightarrow \{0, 1\}^2$) a zajišťuje právě toto). Na počátku vodičů (zcela vlevo v diagramu) lze vepsat označení, které odpovídá vstupním bitovým hodnotám a na výstupu (zcela vpravo) pak očekávat výstupní bitové hodnoty.

Kvantové logické obvody se liší od klasických logických obvodů absencí „mrtvých konců“, absencí operace FANOUT (viz „No cloning theorem“ [14], [15]) i charakterem logických hradel – kvantová logická hradla odpovídají pouze bijektivním operacím a tedy pro ně vždy platí $k = l$ (kvantová logická hradla mají také obecnější charakter než jen bijektivních boolovských funkcí – jde o unitární operátory na prostoru daného počtu qubitů). Zvláštností kvantových logických obvodů je dále fakt, že jednotlivé vodiče v nich nemusejí v daném místě výpočtu (charakterizovaném polohou na pravolevé ose) nést pouze informaci „0“ nebo „1“, ale libovolnou superpozici těchto dvou hodnot odpovídající stavu qubitů. A jelikož stav N -qubitového systému je v obecném případě neseparabilní, tj. nelze jej vyjádřit jako jediný direktní součin stavů jednotlivých qubitů, pro plný popis stavu v rámci kvantového počítání bychom si museli představit superpozici obecně většího množství kopií daného logického obvodu s různými označeními pro vodiče v daném „místě výpočtu“ (charakterizovaném polohou na pravolevé ose). Další zvláštností kvantových logických obvodů

Příklady logických obvodů lze nalézt v [14], [15], [16], ale i dále v této práci.

1.1.3 Operace na kvantovém jádře

1.1.3.1 Časový vývoj, interakce a unitární transformace

1.1.3.1.1 Schrödingerův obraz

Schrödingerův, Heisenbergerův a Interakční (Diracův) obraz jsou různé formulace kvantové teorie, které poskytují stejnou statistiku výsledků měření (danou součiny operátorů působících na hilbertově prostoru H a stavovým vektorem ze stejného prostoru (operátorem hustoty na stejném prostoru)), pouze se liší rozdělením časového vývoje popisu fyzikálního stavu (tj. stavového vektoru, popř. operátoru hustoty) kvantového systému a popisu operátorů fyzikálních veličin. Mezi symboly pro operátory, stavové vektory a matice hustoty v jednotlivých obrazech budu

rozlišovat horním indexem „(S)“, „(H)“ a „(I)“, pouze v případě Schrödingerova obrazu budu horní index vynechávat.

Ve Schrödingerově obrazu jsou operátory explicitně časově nezávislých fyzikálních veličin časově nezávislé a stavový vektor se vyvíjí v čase unitárním způsobem (tj. mezi stavovým vektorem ve dvou různých časech lze přejít pomocí unitární transformace).

Časový vývoj uzavřeného kvantového systému v čistém stavu $|\psi\rangle$ ²¹ je popsán pomocí (nestacionární, časové) Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle, \quad (23)$$

kde $\hbar = 1.054\ 571\ 726(47) \cdot 10^{-34}$ J·s je redukovaná Planckova konstanta, i je imaginární jednotka, t je čas a \hat{H} hamiltonián studovaného systému (lineární hermitovský operátor odpovídající klasické hamiltonově funkci (což pro většinu systémů znamená zároveň „celkové energii“)) s počáteční podmínkou

$$|\psi(t=t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \in H, \quad (24)$$

kde obvykle požadujeme, aby $|\psi_0\rangle$ byl navíc nenulový (nulový vektor vektorového hilbertova prostoru H nepopisuje žádný fyzikální stav), popřípadě dokonce normalizovaný (normalizace zjednodušuje řadu výrazů).

Ekvivalentem pro uzavřený kvantový systém ve stavu (čistém či smíšeném) popsaném operátorem hustoty $\hat{\rho}$ (pozitivně semi-definitní operátor s jednotkovou stopou působící na hilbertově prostoru H studovaného kvantového systému) je kvantová Liouvillova rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (25)$$

²¹ Kde $|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle \in H \quad \forall t \in \langle t_0; +\infty \rangle$, kde H je Hilbertův prostor daného kvantového systému.

kde $[\hat{H}, \hat{\rho}] \equiv \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}$ je komutátor operátorů \hat{H} a $\hat{\rho}$. Časový vývoj podle rovnice (23) lze zapsat také pomocí unitárního evolučního operátoru $\hat{U}(t_1, t_2)$, který má dva parametry – časy t_1 a t_2 a popisuje tak transformaci stavového vektoru v čase t_1 na stavový vektor v čase t_2 podle rovnice (26). Je zřejmé, že evoluční operátor musí splňovat (27), kde \hat{I} je operátor identity na H a podmínku tranzitivity (28), ze které pak plyne (29).

$$\hat{U}(t_1, t_2)|\psi(t_1)\rangle = |\psi(t_2)\rangle, \quad (26)$$

$$\hat{U}(t_1, t_1) = \hat{I}, \quad (27)$$

$$\hat{U}(t_1, t_2) \cdot \hat{U}(t_2, t_3) = \hat{U}(t_1, t_3), \quad (28)$$

$$\hat{U}(t_1, t_2) = \hat{U}^{-1}(t_2, t_1). \quad (29)$$

Vzhledem na požadavek zachování normy stavového vektoru během časového vývoje

$$\langle \psi(t_2) | \psi(t_2) \rangle = \langle \psi(t_1) | \hat{U}^+(t_1, t_2) \hat{U}(t_1, t_2) | \psi(t_1) \rangle = \langle \psi(t_1) | \psi(t_1) \rangle, \quad (30)$$

musí také platit

$$\hat{U}^+(t_1, t_2) = \hat{U}^{-1}(t_1, t_2), \quad (31)$$

tedy $\hat{U}(t_1, t_2)$ musí být unitární pro libovolnou dvojici časů t_1 a t_2 . Platí-li, že hamiltoniány \hat{H} z rovnice (23) pro různé časy komutují (připouštím tak případ explicitně časově závislého hamiltoniánu), lze pro evoluční operátor napsat explicitní výraz

$$\hat{U}(t_0, t) = \hat{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t) dt\right), \quad (32)$$

kde \hat{T} je operátor časového uspořádání²². Pro časově explicitně nezávislý hamiltonián \hat{H} se pak vztah (32) redukuje na

$$\hat{U}(t_0, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t - t_0)\right). \quad (33)$$

Analogicky vztahu (26) (vycházejícímu z rovnice (23)) lze formulovat podobný výraz také pro časovou závislost operátoru hustoty $\hat{\rho}$ (odpovídá pak rovnici (25)), tedy

$$\hat{\rho}(t_2) = \hat{U}(t_1, t_2) \hat{\rho}(t_1) \hat{U}^\dagger(t_1, t_2). \quad (34)$$

1.1.3.1.2 Heisenbergerův obraz

V této formulaci kvantové teorie jsou stavové vektory stacionárních stavů časově nezávislé, tedy $|\psi^{(H)}(t)\rangle = |\psi^{(H)}\rangle = \textit{konst.} \quad \forall t$, ale operátory jednotlivých fyzikálních veličin závisejí na čase podle rovnice

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)}(t) = [\hat{H}, \hat{A}^{(H)}] + \frac{\partial \hat{A}^{(H)}}{\partial t}(t), \quad (35)$$

kde $\partial \hat{A}^{(H)} / \partial t$ odpovídá explicitní časové závislosti operátoru. Podobně jako v případě Schrödingerova obrazu i zde lze s výhodou pro popis časového vývoje (zde operátorů fyzikálních veličin) použít evolučního operátoru (který splňuje podmínky lineariry, unitarity a vlastnost (27)) a lze pak psát

$$\hat{T}\left(\hat{A}(t_1) \cdot \hat{A}(t_2)\right) = \theta(t_1 - t_2) \cdot \hat{A}(t_1) \cdot \hat{A}(t_2) \pm \theta(t_2 - t_1) \cdot \hat{A}(t_2) \cdot \hat{A}(t_1), \quad (36)$$

kde $\theta(x)$ je Heavisideova funkce (skoková funkce), která je nulová pro záporná x , rovna jedné pro kladná x a její hodnota v nule je povětšinou irrelevantní s ohledem na to, že je používána obvykle jako disktribuce. Pro účely naší definice ji pro $x = 0$ položme rovnu 1/2. Znaménko závisí na charakteru operátoru \hat{A} , jde-li o operátor fermionický, použije se dolní znaménko, pro bosonický se použije horní znaménko.

$$\hat{A}^{(H)}(t) = \hat{U}^+(t_0, t) \cdot \hat{A}^{(H)}(t_0) \cdot \hat{U}(t_0, t), \quad (37)$$

snadno se ukáže, že časový vývoj středních hodnot operátoru \hat{A} , stejně jako časový vývoj pravděpodobností změření možných hodnot jemu odpovídající fyzikální veličiny jsou stejné ve Schrödingerově i Heisenbergerově obrazech (a také v Diracově obraze, viz níže), tj. platí

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi^{(H)} | \hat{A}^{(H)} | \psi^{(H)} \rangle, \quad (38)$$

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^+ \hat{A}(t_0) \hat{U} | \psi(t_0) \rangle, \quad (39)$$

pouze v případě Schrödingerova obrazu evoluční operátor \hat{U} v (39) vystupuje na pravé straně jako důsledek vývoje ketu i bry $|\psi\rangle$, kdežto v případě Heisenbergerova obrazu vystupuje evoluční operátor \hat{U} v (39) jako důsledek časového vývoje operátoru \hat{A} podle rovnice (37). Pokud si zvolíme referenční čas t_0 , pak lze psát

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t_0, t) |\psi^{(H)}\rangle, \quad (40)$$

$$\hat{A}^{(H)} = \hat{U}^+(t_0, t) \hat{A} \hat{U}(t_0, t). \quad (41)$$

1.1.3.1.3 Interakční (Diracův) obraz

Interakční obraz je formulace kvantové teorie ve které je část časové závislosti zahrnuta do vývoje stavového vektoru a část do vývoje operátorů pro fyzikální veličiny. V limitě nekonečně slabé interakce pak přechází Interakční obraz v Heisenbergův obraz. Uvažujme rozdělení hamiltoniánu ve Schrödingerově obraze ve tvaru

$$\hat{H}^{(S)} = \hat{H}_0^{(S)} + \hat{H}_I^{(S)}, \quad (42)$$

kde $\hat{H}_0^{(S)}$ je část, která je vzhledem k našemu popisu „triviálnější“ (např. explicitně časově nezávislá, popisující „volný systém“, apod.), $\hat{H}_I^{(S)}$ pak odpovídá „interakční části“ (odtud název). Vzhledem k tomuto rozdělení je pak definován Interakční obraz takto – stavový vektor v interakčním obraze je dán vztahem

$$|\psi^{(I)}(t)\rangle = \exp\left(i \frac{\hat{H}_0^{(S)}}{\hbar} t\right) |\psi(t)\rangle, \quad (43)$$

kde $|\psi(t)\rangle$ je stavovým vektorem ve Schrödingerově obraze. Odtud (43) plyne, že pro časovou závislost operátorů musí platit

$$\hat{A}^{(I)}(t) = \exp\left(i \frac{\hat{H}_0^{(S)}}{\hbar} t\right) \cdot \hat{A}(t) \cdot \exp\left(-i \frac{\hat{H}_0^{(S)}}{\hbar} t\right), \quad (44)$$

kde $\hat{A}(t)$ je operátor ve Schrödingerově obraze a tedy jeho časová závislost znamená možnou explicitní časovou závislost (například závislost na vnějším klasickém časově závislém elektrickém nebo magnetickém poli). Speciálně pro členy rozdělení hamiltoniánu (42) poskytuje vztah (44)

$$\hat{H}_0^{(I)} = \exp\left(i \frac{\hat{H}_0^{(S)}}{\hbar} t\right) \cdot \hat{H}_0^{(S)} \cdot \exp\left(-i \frac{\hat{H}_0^{(S)}}{\hbar} t\right) = \hat{H}_0^{(S)}, \quad (45)$$

$$\hat{H}_I^{(I)}(t) = \exp\left(i \frac{\hat{H}_0^{(S)}}{\hbar} t\right) \cdot \hat{H}_I^{(S)} \cdot \exp\left(-i \frac{\hat{H}_0^{(S)}}{\hbar} t\right), \quad (46)$$

což vytváří explicitní časovou závislost i v případě, že $\hat{H}_I^{(S)}$ na čase původně nezávisel (pokud členy rozdělení (42) spolu nekomutují).

1.1.3.2 Unitární transformace kvantového jádra

1.1.3.2.1 Význam unitarity kvantových hardel

Jak bylo ukázáno v předchozí kapitole, uzavřený kvantový systém se mezi libovolnými dvěma časy vyvíjí unitárním způsobem (stavový vektor v jednom čase je dán unitární transformací stavového vektoru v druhém čase). Tento unitární vývoj může být teoreticky „kontrolován“ například aplikací vhodného vnějšího pole, tj. hamiltonián odpovídající kvantovému jádru bude obsahovat člen $\hat{H}_I^{(I)}(t)$, který bude přenásoben funkcí času s konečným nosičem.

Digitální kvantové počítače fungují právě tímto způsobem – stav kvantového jádra je podle souboru instrukcí podrobován unitárními transformacím daného typu (a měřeními v kanonické bázi), viz obr. 1. V případě *analogových/adiabatických* kvantových počítačů se stav kvantového jádra mění spojitou změnou hamiltoniánu odpovídajícího kvantovému jádru (a měřeními v kanonické bázi). Dále se v textu zabývám pouze problematikou digitálních kvantových počítačů.

Unitární transformaci kvantového jádra o N qubitech odpovídá unitární operátor

$$\hat{U}: C^{2^N} \rightarrow C^{2^N}, \quad (47)$$

je vhodné zavést také unitární operátory na podprostorech menší dimenze (než 2^N) odpovídající n -qubitovým registrům (v souladu s terminologií používanou v teorii informace budu tyto operátory označovat jako „hradla“). Působí-li unitární operátor na n -qubitový kvantový registr a (pak jej označím n -qubitové hradlo, kde $n \in \{1; 2; 3; \dots; N\}$), mohu psát

$$\hat{U}_{[a]}: C^{2^n} \rightarrow C^{2^n}, \quad (48)$$

odpovídající unitární transformace kvantového jádra pak je

$$\hat{U} = \hat{U}_{[a]} \otimes \hat{I}_{[a^c]}, \quad (49)$$

kde $\hat{I}_{[b]}$ je operátor identity působící na kvantový registr b . Registr a^C pak označuje „doplněk“ registru a , tedy právě všechny qubity kvantového jádra, které nejsou zahrnuty v kvantovém registru a .

1.1.3.2.2 Pseudoklasické funkce

Pro každou bijektivní boolovskou funkci $f: \{0; 1\}^n \rightarrow \{0; 1\}^n$ lze definovat odpovídající n -qubitové hradlo (aplikovatelné na libovolný n -qubitový registr) vztahem²³

$$\hat{U}_f |j\rangle = |f(j)\rangle, \quad (50)$$

takové n -qubitové hradlo označují „pseudoklasickou funkcí“. Restrikce na bijektivní boolovské funkce není nezbytná, pokud uvážíme možnost operátoru působit na větší počet qubitů. Pak lze implementovat libovolnou boolovskou funkci $g: \{0; 1\}^n \rightarrow \{0; 1\}^k$ pomocí $n+k$ -qubitového hradla $\hat{U}_{g,2}$ splňujícího

$$\hat{U}_{g,2} |j\rangle_a \otimes |0\rangle_b = |j\rangle_a \otimes |g(j)\rangle_b, \quad (51)$$

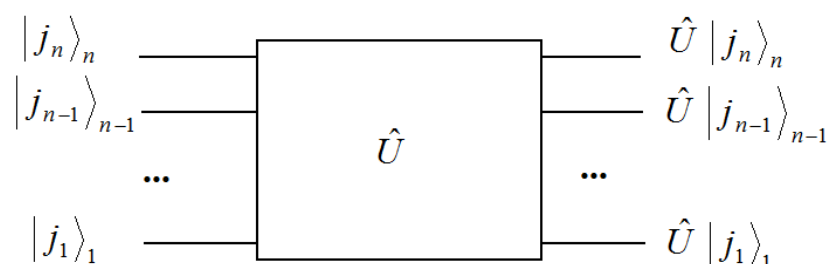
kde $n+k$ qubitů je rozděleno na n -qubitový kvantový registr a „vstupní registr operátoru $\hat{U}_{g,2}$ “ a k -qubitový kvantový registr b „výstupní registr operátoru $\hat{U}_{g,2}$ “. Operátor podle vztahů (51) a (52) ponechává obsah kvantové registru a neměnný. Jedna z možností jak „doplnit“ působení $\hat{U}_{g,2}$ na stavy odpovídající nenulovým bitovým hodnotám registru b je

$$\hat{U}_{g,2} |j\rangle_a \otimes |k\rangle_b = |j\rangle_a \otimes |k \oplus g(j)\rangle_b, \quad (52)$$

kde \oplus mezi dvěma čísly má význam sčítání po jednotlivých bitech modulo 2.

²³ Každý lineární operátor lze plně charakterizovat pomocí jeho působení na báze vektory.

Dále budu pro působení hradel na kvantové registry používat výpočetní model kvantového logického obvodu, kde jednotlivé qubity jsou znázorněny vodorovnými čarami a hradla na ně působící pomocí obdelníků přes (několik) vodorovných čar a pomocí spojení mezi vodorovnými čarami jiného typu. Obecné n -qubitové hradlo \hat{U} tak znázorním následujícím způsobem uvedeným v obr. 4.



Obr. 4: Obecné n -qubitové hradlo působící na n -qubitový registr (tři tečky znázorňují $n-3$ vodorovných čar odpovídajících případným dalším qubitům. j_n, j_{n-1}, \dots, j_1 mohou číslovat kety kanonické báze stejně tak jako mohou označovat nějaký jiný normalizovaný vektor z C^2 . Schéma zahrnuje i stavy, které nejsou produktové tím, že platí obecně pro všechny kombinace stavů jednotlivých qubitů a použité operace jsou lineární.

1.1.3.2.3 Významná hradla

1.1.3.2.3.1 1-qubitová hradla

Pro další účely podstatná 1-qubitová hradla jsou Pauliho matice (5) společně s identitou \hat{I} (53)-(56)

$$\hat{\sigma}_x \equiv \hat{X} \equiv NOT \equiv \hat{\sigma}_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (53)$$

$$\hat{\sigma}_y \equiv \hat{Y} \equiv \hat{\sigma}_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (54)$$

$$\hat{\sigma}_z \equiv \hat{Z} \equiv \hat{\sigma}_3 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (55)$$

$$\hat{I} \equiv \sigma_0 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (56)$$

operátory rotací (57)-(59)

$$\hat{R}_x(\phi) \equiv \exp\left(-i \frac{\phi}{2} \hat{\sigma}_x\right) = \cos(\phi/2) \cdot \hat{I} - i \sin(\phi/2) \cdot \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} \cos(\phi/2) & -i \sin(\phi/2) \\ -i \sin(\phi/2) & \cos(\phi/2) \end{pmatrix} \quad (57)$$

$$\hat{R}_y(\phi) \equiv \exp\left(-i \frac{\phi}{2} \hat{\sigma}_y\right) = \cos(\phi/2) \cdot \hat{I} - i \sin(\phi/2) \cdot \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} \cos(\phi/2) & -\sin(\phi/2) \\ \sin(\phi/2) & \cos(\phi/2) \end{pmatrix}, \quad (58)$$

$$\hat{R}_z(\phi) \equiv \exp\left(-i \frac{\phi}{2} \hat{\sigma}_z\right) = \cos(\phi/2) \cdot \hat{I} - i \sin(\phi/2) \cdot \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} \exp(-i\phi/2) & 0 \\ 0 & \exp(i\phi/2) \end{pmatrix}, \quad (59)$$

a dalšími vybranými operátory, jako je Hadamardův operátor/hradlo \hat{H} (60) (působení Hadamardova hradla na vektor kanonické báze $|x\rangle$, $x \in \{0;1\}$ popisuje vztah (61), který je velmi výhodný pro zobecnění pro více qubitů), $\pi/8$ hradlo \hat{T} (62) a fázové hradlo \hat{S} (63), obecnější varianta předchozích dvou hradel pak má tvar $\hat{V}(\phi)$ (64) a lze ji označit jako „podmíněnou změnu fáze“:

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (60)$$

$$\hat{H}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{y=0}^1 (-1)^{x \cdot y} |y\rangle, \quad (61)$$

$$\hat{T} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\pi/4) \end{pmatrix}, \quad (62)$$

$$\hat{S} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, \quad (63)$$

$$\hat{V}(\phi) \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\phi) \end{pmatrix} = \exp(i\phi) \cdot \hat{R}_z(\phi), \quad (64)$$

Lze ukázat, že libovolnou unitární 2x2 matici lze zapsat ve tvaru

$$\hat{U} = \hat{U}(\alpha, \beta, \gamma, \delta) = e^{i\delta} \hat{R}_z(\alpha) \cdot \hat{R}_y(\beta) \cdot \hat{R}_z(\gamma), \quad (65)$$

kde reálné proměnné α , β , γ a δ jsou úhly z intervalu $\langle 0; 2\pi \rangle$. Rovnice (65) se často označuje jako Z-Y rozklad 1-qubitového hradla. Analogicky se hovoří o Z-X rozkladu, nahradí-li se

$$\hat{R}_y(\beta) = \hat{R}_z(\pi/2) \cdot \hat{R}_x(\beta) \cdot \hat{R}_z(-\pi/2), \quad (66)$$

pak lze po substituci (a náležitém přejmenování nové proměnné na její původní označení :-)) $\alpha \rightarrow \alpha + \pi/2$, $\gamma \rightarrow \gamma - \pi/2$ psát

$$\hat{U} = \hat{U}_{zx}(\alpha, \beta, \gamma, \delta) = e^{i\delta} \hat{R}_z(\alpha) \cdot \hat{R}_x(\beta) \cdot \hat{R}_z(\gamma), \quad (67)$$

dokonce lze ukázat, že libovolné 1-qubitové hradlo lze psát ve tvaru

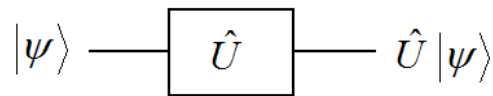
$$\hat{U} = \hat{U}_{\vec{n}\vec{m}}(\alpha, \beta, \gamma, \delta) = e^{i\delta} \hat{R}_{\vec{n}}(\alpha) \cdot \hat{R}_{\vec{m}}(\beta) \cdot \hat{R}_{\vec{n}}(\gamma), \quad (68)^{24}$$

²⁴ V souladu se vztahy (57)-(59) pokládám

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\phi) \equiv \exp\left(-i \frac{\phi}{2} (\vec{n} \cdot \hat{\sigma})\right) = \cos(\phi/2) \cdot \hat{I} - i \sin(\phi/2) \cdot (\vec{n} \cdot \hat{\sigma}), \quad (69)$$

kde \vec{n} a \vec{m} jsou libovolné nerovnoběžné jednotkové vektory v R^3 (tj. libovolné navzájem různé směry). Až na (pro stav nepodstatný) fázový faktor $e^{i\delta}$ mohou být všechna jednoqubitová hradla vnímána jako operátory rotací qubitového stavu (popsaného vektorem \vec{r} , viz obr. 2) na Blochově sféře.

Všechny výše zmiňovaná hradla mají stejné schématické znázornění pomocí obdelníku přes jedinou vodorovnou čáru odpovídající 1-qubitovému registru na který působí (v obdelníku je napsáno označení hradla (viz levá strana (53)-(68)), viz obr. 5.



Obr. 5: Schématické znázornění 1-qubitového hradla \hat{U} namísto symbolu „ U “ zde může být označení libovolného 1-qubitového operátoru (53)-(68).

1.1.3.2.3.2 2-qubitová hradla

2-qubitová hradla lze rozdělit na separabilní a neseperabilní. Separabilní 2-qubitová hradla jsou ta, která lze zapsat jako součin 1-qubitových hradel. Pro účely další diskuze jsou zajímavá pouze neseperabilní 2-qubitová hradla (také lze o nich hovořit jako o „entanglujících hradlech“, neboť jejich působením na vhodné produktové stavy vznikají stavy entanglované).

Velmi obecným hradlem je „*kontrolované* U^x “ nebo také „*podmíněné* U^x “. Působí na dva registry – 1-qubitový „podmínkový“ nebo „kontrolní“ registr c a 1-qubitový registr t „cílový“. Jeho funkci lze popsat tak, že je-li registr c ve stavu „0“ je na registr t aplikována identita, je-li registr c ve stavu „1“ je na registr t aplikována 1-qubitová unitární operace \hat{U} , na registr c je aplikována vždy identita.

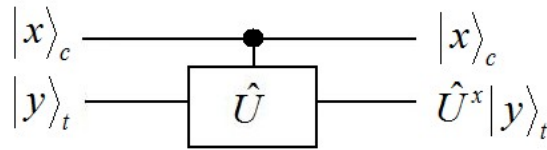
$$\hat{U}_{c,[t,c]}|x\rangle_c \otimes |y\rangle_t = |x\rangle_c \otimes \hat{U}^x |y\rangle_t, \quad x \in \{0;1\}, \quad (70)^{25}$$

kde $\hat{\sigma}$ je vektor Pauliho matic (4).

²⁵ V tomto zápise samozřejmě $x=0 \Rightarrow \hat{U}^x = \hat{I}_2$ a $x=1 \Rightarrow \hat{U}^x = \hat{U}$.

$$\hat{U}_{c,[t,c]} = |0\rangle_c \langle 0|_c \otimes \hat{I}_t + |1\rangle_c \langle 1|_c \otimes \hat{U}, \quad (71)$$

$$\hat{U}_{c,[t,c]} = \hat{I}_2 \oplus \hat{U} = \begin{pmatrix} \hat{I}_2 & 0 \\ 0 & \hat{U} \end{pmatrix} = \begin{array}{cc|cc|c} |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle & \\ \hline \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} |00\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{pmatrix} \\ \hline \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \end{array}, \quad (72)^{26}$$



Obr. 6: Schématické znázornění 2-qubitového hradla „podmíněné \hat{U} “ namísto symbolu „ U^x “ zde může být označení libovolného 1-qubitového operátoru (53)-(68). Uvažujeme-li pro qubit registru c vstup ve tvaru kanonické báze, lze pak výstup snadno formulovat tak jak je uvedeno výše.

Speciálním případem je pak hradlo $\hat{A}(\phi, \alpha, \theta)$ pocházející z prací [17, 18], to je samo o sobě postačující pro konstrukci Deutschova hradla $\hat{D}(\theta)$, parametry ϕ , α a θ jsou uvažovány jako iracionální násobky π a iracionální násobky ostatních parametrů (to umožňuje pomocí skládání operátorů vygenerovat celou řadu hradel pro různé hodnoty parametrů).

$$\hat{A}(\phi, \alpha, \theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\alpha} \cos(\theta) & -e^{i(\alpha-\phi)} \sin(\theta) \\ 0 & 0 & -ie^{i(\alpha+\phi)} \sin(\theta) & e^{i\alpha} \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (73)$$

$$\hat{A}^n(\phi_0, \alpha_0, \theta_0) = \hat{A}(\phi_0, n\alpha_0 \bmod 2\pi, n\theta_0 \bmod 2\pi), \quad (74)$$

²⁶ Červeně jsou vyznačeny případy, kdy je kontrolní registr ve stavu 0 a aplikace hradla neprobíhá, zeleně pak případy, kdy je kontrolní registr (jemu odpovídající index je barevně podtržen) ve stavu 1 a hradlo \hat{U} je aplikováno na cílový registr.

Jiným speciálním případem „podmíněného U “ hradla je $CNOT$ („kontrolované not“, „podmíněná negace“), kde $U = NOT = X$ a tedy jej v kanonické („výpočetní“) 2-qubitové bázi lze zapsat jako (75), kde kvantový registr odpovídající prvnímu qubitů je kontrolní a kvantový registr odpovídající druhému qubitů je cílový.

$$CNOT \equiv XOR \equiv \hat{I}_2 \oplus \hat{X} = \begin{pmatrix} \hat{I}_2 & 0 \\ 0 & \hat{X} \end{pmatrix} = \begin{matrix} \begin{matrix} |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |00\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{matrix} \end{matrix}, (75)$$



Obr. 7: Dvě různá schématická znázornění 2-qubitového hradla $CNOT$. Tradičně se používá spíše to vpravo.

Dalším důležitým 2-qubitovým hradlem je „ $SWAP$ “ hradlo, které, působí-li na dvojici kvantových registrů provede výměnu jejich obsahů (nejen jsou-li v kanonické bázi), tedy splňuje (76), má v kanonické bázi tvar (77) (pro větší přehlednost neuvádím některé nulové elementy matice) a schématicky se znázorňuje dvěma alternativními způsoby uvedenými v obr. 8.

$$SWAP(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in C^2, \quad (76)$$

$$SWAP = |00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11| + |01\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 01| = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & 1 & \\ & 1 & 0 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (77)$$



Obr. 8: Dvě různá schématická znázornění 2-qubitového hradla *SWAP*.

1.1.3.2.3.3 3-qubitová hradla

Za významná 3-qubitová (neseparabilní) hradla lze považovat Deutschovo hradlo $\hat{D}(\theta)$ (80) jehož speciální variantou je Toffoliho hradlo $\hat{T}f$ (81) a podmíněný SWAP (Fredkinovo hradlo) \hat{F} (82).

Bud' $n = j = 1$, pak:

$$\hat{D}(\theta)|n, j, k\rangle = |n, j\rangle \otimes i\hat{R}_x(\theta)|k\rangle = i \cos(\theta/2)|n, j, k\rangle + \sin(\theta/2)|n, j, 1-k\rangle, (78)$$

V jiném případě (n nebo $j = 0$), pak:

$$\hat{D}(\theta)|i, j, k\rangle = |i, j, k\rangle, (79)$$

neboli

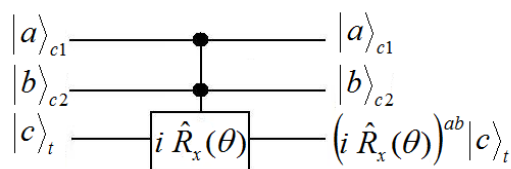
$$\hat{D}(\theta) = |11\rangle_c \langle 11|_c \otimes i\hat{R}_x(\theta) + (1 - |11\rangle_c \langle 11|_c) \otimes \hat{I}, (80)$$

Deutschovo hradlo je jedním z obecnějších podmíněných hradel s 2-qubitovým kontrolním registrem c a 1-qubitovým cílovým registrem. Toffoliho hradlo je pseudoklasickou analogií Toffoliho hradla používaného v klasické boolovské logice a odpovídá mu Deutschovo hradlo pro $\theta = \pi$, tedy

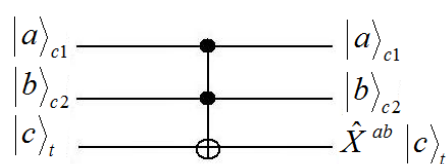
$$\hat{T}f \equiv \hat{D}(\pi) = |11\rangle_c \langle 11|_c \otimes \hat{X} + (1 - |11\rangle_c \langle 11|_c) \otimes \hat{I}, (81)$$

jde tedy o podmíněné NOT-hradlo s 2-qubitovým kontrolním registrem.

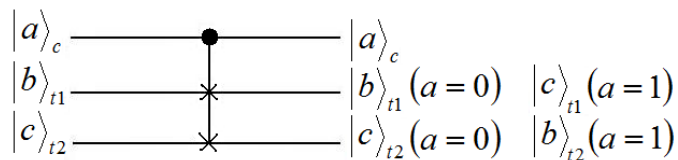
$$\hat{F} = \hat{I}_4 \oplus SWAP = \begin{matrix} & \begin{matrix} |010\rangle & |100\rangle & |110\rangle \\ |000\rangle & |001\rangle & |011\rangle & |101\rangle & |111\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} |000\rangle \\ |001\rangle \\ |010\rangle \\ |011\rangle \\ |100\rangle \\ |101\rangle \\ |110\rangle \\ |111\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} \boxed{1} & & & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & \boxed{1} & & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & \boxed{1} & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & \boxed{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{1} & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & \boxed{0} & \boxed{1} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & \boxed{1} & \boxed{0} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \boxed{1} \end{pmatrix} \end{matrix}, \quad (82)$$



Obr. 9: Deutschovo hradlo $\hat{D}(\theta)$



Obr. 10: Toffoliho hradlo $\hat{T}f$



Obr. 11: Fredkinovo hradlo \hat{F}

1.1.3.2.3.4 n-qubitová hradla

Za významné v této kategorii považují jen produktové hradlo „Hadamardovo n -qubitové hradlo“. Je dáno direktním součinem n 1-qubitových Hadamardových hradel \hat{H} (60), (61)

$$\hat{H}_{[a]} = \otimes_{i=1}^n \hat{H}_{[a[i]]}, \quad (83)$$

$$\hat{H}^{(2)} = \hat{H} \otimes \hat{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} \\ \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} \\ \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} \\ \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} \end{pmatrix}, \quad (84)$$

$$\hat{H}^{(3)} = \hat{H} \otimes \hat{H}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2^3}} \begin{pmatrix} \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} \\ \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} \\ \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} \\ \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} \\ \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} \\ \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} \\ \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} \\ \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} & \boxed{+1} & \boxed{+1} & \boxed{-1} \end{pmatrix}, \quad (85)$$

$$\hat{H}^{(n)} = \otimes_{i=1}^n \hat{H}, \quad (86)$$

$$\hat{H}^{(n)}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} (-1)^{x \bullet y} |y\rangle, \quad (87)$$

kde $x \bullet y$ je násobení dvou binárních rozvoju čísel x a y „jako skalární součin“

$$x \bullet y = \sum_{j=1}^n x_j y_j, \quad (88)$$

kde x_j a y_j jsou j -tá binární cifra čísel x , resp. y (indexované od nejméně významného bitu po nejvíce významný).

1.1.3.2.4 Množiny univerzálních kvantových hradel

Definice 6: Univerzálnost množiny hradel pro výpočty na kvantovém počítači:

Konečná množina unitárních hradel G se nazývá „kvantově výpočetně univerzální“ (KVU), pokud každý kvantový Turingův stroj může být efektivně (v polynomiálním čase vzhledem k délce svého programu) simulován s předem pevně danou (libovolně velkou) přesností pomocí logického kvantového okruhu složeného z hradel výhradně z G .

Číslo příkladu	G	Důkaz, reference
1	$\{\hat{T}f, \hat{H}\}$	Y. Shi in 2002 [19]
2	$\{\hat{A}(\phi, \alpha, \theta)\}$	Barenco [17] ²⁷

Tabulka 1: Příklady KVU množin hradel G

Definice 7: Evolučně univerzální množina (hradel):

Konečná množina unitárních hradel G se nazývá evolučně univerzální (EVU), pokud pro každé unitární hradlo²⁸ $\hat{U} \in C^{2^n}$ a každé $\varepsilon > 0$ existuje posloupnost hradel $\hat{u}_1, \hat{u}_2, \dots, \hat{u}_k \in G$ a pomocný stav $|a\rangle \in C^{2^p}$ tak, aby platilo

$$\max_{\|\psi\rangle=1} \left\| \hat{U}(\psi\rangle) \otimes |a\rangle - \hat{U}_1 \hat{U}_2 \dots \hat{U}_k (\psi\rangle \otimes |a\rangle) \right\| \leq \varepsilon, \quad (89)$$

kde \hat{U}_j je direktní součin hradla \hat{u}_j působícího na cílový (t -qubitový) registr a odpovídajících operátorů identity na zbylých $n + p - t$ qubitů. Po pomocném stavu

²⁷ Deutsch, Barenco a Ekert [18] a Lloyd [20] navíc ukázali, že „téměř jaké-koli“ 2-qubitové hradlo je univerzální.

²⁸ Definice hovoří o nekonečné (konkrétně navíc nespočetné) množině hradel U vzhledem ke všem možným konečným hodnotám počtu qubitů na které působí.

$|a\rangle \in C^{2^p}$ požadujeme, aby byl efektivně (v polynomiálním čase²⁹ vzhledem k p) připravitelný z $|0\rangle = |00\dots 0\rangle \in C^{2^p}$ pomocí hradel z G .

EVU Množiny G se obvykle sestavují z 1-, 2- a/nebo 3-qubitových hradel. 2-qubitová hradla jsou pro konstrukci EVU množiny nezbytná, ale ukazuje se, že vhodné kombinace 1- a 2-qubitových hradel jsou postačující (3-, 4-, ... qubitová hradla nejsou nezbytná).

Číslo příkladu	G_j	Důkaz, reference
1	$\{\hat{D}(\theta)\}$	Deutsch [21]
2	$\{\hat{A}(\phi, \alpha, \theta)\}$	Barenco [22]
3	$\{\hat{T}f, \hat{S}, \hat{H}\}$	Shor [23]
4	$\{C(\hat{S}), \hat{H}\}$	Kitaev [24]
5	$\{CNOT, \hat{H}, \hat{T}\}$	Boykin <i>et. al</i> [25]
6	$\{CNOT, \hat{H}, \hat{T}, \hat{S}\}$	[16]

Jsou dané EVU množiny G složeny z hradel které mohou operovat ve fault-tolerant režimu. Například rotace o iracionální násobky π tuto vlastnost nemají, nicméně, Shor ukázal, že množina G_3 a CSS opravné kódy mohou tolerovat $O(1/\log^c t)$ množství nepřesností a dekoherence na hradlo (c je malá konstanta, t počet hradel) za cenu polylogaritického nárůstu velikosti obvodu [26], [27]. Množiny G_j pro $j > 3$ jsou fault-tolerant také. Zejména důležitá je v tomto ohledu poslední množina, kde byť $\hat{T}^2 = \hat{S}$ je hradlo \hat{S} přidáno nezávisle pro snížení nákladů při implementaci opravných kódů na kvantový šum.

Lze snadno ukázat (pomocí Gaussovy eliminace a Givenových rotací), že libovolné n -qubitové hradlo lze zapsat jako složení ne více jak $O(n^2 4^n)$ 1- a 2-qubitových hradel.

1.1.3.3 Obecná měření v kvantové mechanice

Pro problematiku kvantových počítačů je vhodné zavést obecnější varinatu postulátu o měření v kvantové teorii. Tak, aby tento zahrnoval i situace, kdy jsou měření neopakovatelná (pravděpodobnost změření dané hodnoty na stavu po jejím

²⁹ Tím se myslí s použitím maximálně polynomiálního počtu hradel z G vzhledem k p .

prvním změřením je menší než 1) a kdy kety odpovídající různým změřeným hodnotám dané pozorovatelné nejsou ortogonální (důležité například při řešení otázky rozlišitelnosti neortogonálních stavů).

Postulát 1: O měření

Bud' $|\psi\rangle \in H$ normalizovaný³⁰ ket z hilbertova prostoru H . Bud' $M = \{\hat{M}_m \mid m \in \mu\}$ množina operátorů (lineárních a působících na hilbertově prostoru H) měření pozorovatelné M , jejíž možné (navzájem různé) hodnoty r_m jsou indexovány indexem m probíhajícíím neprázdnou indexovou množinu μ . Požadujeme, aby platilo („relace úplnosti pro operátory měření“)

$$\sum_{m \in \mu} \hat{M}_m^+ \hat{M}_m = \hat{I}, \quad (90)^{31}$$

pak jsou pravděpodobnosti změřením hodnoty r_m dány vztahem

$$p(r_m) = \langle \psi | \hat{M}_m^+ \hat{M}_m | \psi \rangle, \quad (91)$$

systém se po změřením hodnoty r_m odpovídající indexu m nachází ve stavu

$$|\psi_m\rangle = \frac{\hat{M}_m |\psi\rangle}{\sqrt{p(r_m)}}, \quad (92)$$

protože po měření se systém může nacházet jen ve stavech odpovídajících výsledkům měření s nenulovou pravděpodobností, je výraz (92) definován pro všechny případy, kdy má praktické použití.

$$^{30} \langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad (94)$$

³¹ Operátor \hat{I} je identita na prostoru H .

Poznámka 4: Pravděpodobnosti jsou nezáporné a sčítají se do jednotky, neboť platí

$$p(r_m) = \langle \psi | \hat{M}_m^+ \hat{M}_m | \psi \rangle = \|\hat{M}_m | \psi \rangle\|^2, \quad (93)$$

$$\sum_{m \in \mu} p(r_m) = \sum_{m \in \mu} \langle \psi | \hat{M}_m^+ \hat{M}_m | \psi \rangle = \left\langle \psi \left| \sum_{m \in \mu} \hat{M}_m^+ \hat{M}_m \right| \psi \right\rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad (95)$$

Poznámka 5: Stav po měření jsou dle (92) normalizované.

Poznámka 6: Postulát pro stavy popsané operátorem hustoty $\hat{\rho} \in H \otimes H$

($Tr \hat{\rho} = 1$, $\langle \chi | \hat{\rho} | \chi \rangle \geq 0, \forall | \chi \rangle \in H$)³². Pravděpodobnosti $p(r_m)$ jsou nyní dány vztahem (96) a stav po změření hodnoty odpovídající indexu m je dán výrazem (97).

$$\begin{aligned} p(r_m) &= \sum_{i=1}^N p(r_m | i) = \sum_{i=1}^N p_i \langle \psi_i | \hat{M}_m^+ \hat{M}_m | \psi_i \rangle, \\ &= Tr(\hat{M}_m^+ \hat{M}_m \hat{\rho}) = Tr(\hat{M}_m \hat{\rho} \hat{M}_m^+) \end{aligned} \quad (96)$$

$$\hat{\rho}_m = \sum_{i=1}^N p(i|r_m) \hat{M}_m | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \hat{M}_m^+ = \frac{\hat{M}_m \hat{\rho} \hat{M}_m^+}{Tr(\hat{M}_m \hat{\rho} \hat{M}_m^+)}, \quad (97)$$

1.1.3.4 POVM měření

V situacích, kdy pro nás navíc není příliš podstatný stav systému po měření, ale pouze pravděpodobnosti možných výsledků měření lze proces měření definovat pomocí sady pozitivně-definitních (tj. splňujících (98), odtud název „Positive-Operator Valued Measurement, prostor stavů buď hilbertův H) operátorů $\{\hat{E}_m | m \in \mu\}$ takových, že splňují relaci úplnosti POVM-elementů (99).

³² Dále budu uvažovat v odvozeních zápis $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N p_i | \psi_i \rangle \langle \psi_i |$ pro libovolnou bázi diagonalizující $\hat{\rho}$.

$$\langle \chi | \hat{E}_m | \chi \rangle \geq 0, \quad \forall | \chi \rangle \in H, \quad (98)$$

$$\sum_{m \in \mu} \hat{E}_m = \hat{I}, \quad (99)$$

Pak pravděpodobnost změření hodnoty odpovídající indexu m pro stav popsaný normalizovaným ketem $|\psi\rangle \in H$ je dána vztahem (100) a pro stav popsaný pozitivně-semidefinitním operátorem hustoty (s jednotkovou stopou) $\hat{\rho} \in H \otimes H$ dána vztahem (101).

$$p(r_m) = \langle \psi | \hat{E}_m | \psi \rangle, \quad (100)$$

$$p(r_m) = \text{Tr}(\hat{E}_m \hat{\rho}). \quad (101)$$

1.1.3.5 Projektivní měření

Projektivní měření jsou ta měření popsaná postulátem 1, kde operátory \hat{M}_m jsou ortonormální bázi projekčních operátorů na H (proto je budu dále označovat jako \hat{P}_m), tedy splňují

$$\hat{P}_m \hat{P}_n = \delta_{mn} \hat{P}_n, \quad (102)$$

jsou hermitovské, což zjednodušuje relaci (90) na (103) a (91) na (104)

$$\sum_{m \in \mu} \hat{P}_m = \hat{I}, \quad (103)$$

$$p(r_m) = \langle \psi | \hat{P}_m | \psi \rangle, \quad (104)$$

kde $p(r_m)$ je pravděpodobnost, že výsledkem měření pozorovatelné M bude hodnota r_m . Stavů po projektivním měření jsou pro různé hodnoty indexu m na sebe navzájem

kolmé. V souvislosti s projektivními měřeními se zavádí také přímo operátor pozorovatelné \hat{M} , který je hermitovský a má tvar (105), r_m jsou jeho vlastní čísla a projektory \hat{P}_m jsou projektory na jeho charakteristické podprostory.

$$\hat{M} = \sum_{m \in \mu} r_m \hat{P}_m. \quad (105)$$

Pro stavy popsané operátorem hustoty $\hat{\rho}$ (pozitivně-semidefinitní, s jednotkovou stopou, na H) pak platí zjednodušená varianta (96), respektive (97)

$$p(r_m) = \text{Tr}(\hat{P}_m \hat{\rho}), \quad (106)$$

$$\hat{\rho}_m = \frac{\hat{P}_m \hat{\rho} \hat{P}_m^+}{\text{Tr}(\hat{P}_m \hat{\rho})}. \quad (107)$$

1.1.3.6 Vztah projektivních a obecných měření

Snadno se ukáže, že obecná měření popsaná v kapitole „1.1.3.3. *Obecná měření v kvantové mechanice*“ jsou simulovatelná (popsatelná) jako měření prováděná na složeném systému (jeho hilbertův prostor označme H') z původního systému (odpovídající hilbertův prostor buď H) a („pomocném“) subsystému jehož hilbertův prostor H_0 má tu vlastnost, že určitá jeho ortonormální báze má kardinalitu odpovídající kardinalitě množiny μ a lze tedy její elementy přiřadit možným hodnotám indexu m .³³ Před samotným měřením je pak na složeném systému ještě provedena obecná unitární transformace \hat{U} mapující stavy podle vztahu (111)

³³ Tedy platí

$$H' = H \otimes H_0, \quad (108)$$

$$H_0 = \langle \{ |m\rangle \mid m \in \mu \} \rangle, \quad (109)$$

kde $\langle N \rangle$ označuje lineární obal množiny vektorů N .

$$\hat{U}: |\psi\rangle \otimes |0\rangle \rightarrow \sum_{m \in \mu} \hat{M}_m |\psi\rangle \otimes |m\rangle, \quad (111)$$

pak lze ukázat, že projektivní měření na prostoru H_0 charakterizované projektory

$$\hat{P}_m = |m\rangle\langle m|, \quad (112)$$

tedy projektory $\hat{I} \otimes \hat{P}_m$, kde \hat{I} je identitou na prostoru H . Unitární transformace (111) lze také vnímat jako popis interakce měřeného a měřícího systému (jeho stavy jsou pak právě kety $|m\rangle$), respektive této interakci odpovídajícího časového vývoje. Během zmíněného časového vývoje dojde k entanglementu stavů měřeného a měřícího systému a tak měřením na měřícím systému lze získat daný stav měřeného systému.

1.1.3.7 Měření ve výpočetní bázi

1.1.3.7.1 1-qubitový registr

Pozorovatelná přirozeně spojená s qubitem (1)-(3) je „bitová hodnota qubitu“, odpovídá jí pak operátor hermitovský operátor na hilbertově prostoru jednoho qubitu - $\hat{N} \in C^2 \otimes C^2$, jeho maticová reprezentace v kanonické (nebo také „výpočetní“) bázi $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ má tvar

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (113)$$

neboli

$$\hat{N} = 0 \cdot |0\rangle\langle 0| + 1 \cdot |1\rangle\langle 1| = |1\rangle\langle 1|, \quad (114)$$

$$|\psi\rangle \in H, \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad \hat{U}, \hat{M}_m \in H \otimes H, \quad \hat{P}_m \in H_0. \quad (110)$$

vlastní vektory \hat{N} jsou tedy vektory kannonické báze a vlastní čísla odpovídají jejich oznčení – $n = 0$ a $n = 1$. Tato pozorovatelná je úzce svázána s pozorovatelnou dvojnásobku spinu ve směru osy z (popisují-li qubity spinové stavy částice se spinem $1/2$ ve standardní reprezentaci), respetive pozorovatelnou odpovídající třetí Pauliho matici $\hat{\sigma}_z \equiv \hat{\sigma}_3 \equiv \hat{Z}$, která má v kanonické bázi tvar

$$\hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hat{I} - 2\hat{N}, \quad (115)$$

tedy

$$\hat{Z} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|, \quad (116)$$



Obr. 12: Schéma odpovídající modelu kvantového logického obvodu znázorňující vodorovnou linku odpovídající qubitů, následuje měření a z měřící aparatury vychází linka odpovídající bitu klasické informace (jeho hodnota je m)

1.1.3.7.2 *n*-qubitový registr

Uvažujme nyní n -qubitový kvantový registr a . Pak pro něj zavádím pozorovatelnou „bitová hodnota kvantového registru a “ s operátorem $\hat{N}_{[a]} \in H_{[a]} \otimes H_{[a]}$, kde $H_{[a]}$ je hilbertův prostor odpovídající kvantovému registru a (tj. izomorfní C^{2^n}) jejíž vlastní vektory odpovídají vektorům kanonické („výpočetní“) báze registru a , tedy množině vektorů $\{|j_n\rangle \otimes |j_{n-1}\rangle \otimes \dots \otimes |j_1\rangle | j \in \{0;1\}^n\}$, kde $j \equiv (j_n, j_{n-1}, \dots, j_1)$, jk můžeme vnímat jako binární číslice jediného čísla j a pak bázi registru interpretovat jako $\{|j\rangle_a | j \in \{0; 1; \dots; 2^n - 1\}\}$, kde $j = \sum_{k=1}^n 2^{k-1} j_k$, tedy

$$|j\rangle_a \equiv |j_n\rangle \otimes |j_{n-1}\rangle \otimes \dots \otimes |j_1\rangle, \quad (117)$$

Operátor pozorovatelné lze pak psát ve tvaru

$$\hat{N}_{[a]} = \sum_{j=0}^{2^n-1} j \cdot |j\rangle_a \langle j|_a. \quad (118)$$

Přirozeně, na obecném n -qubitovém registru a lze zavést pozorovatelnou odpovídající libovolnému hermitovskému operátoru působícímu na tomto registru. Jeho vlastní vektory mohou odpovídat direktním součinům jiných bázevých vektorů pro jednotlivé qubity (např. vlastní vektory Pauliho matic σ_x nebo σ_y) nebo mohou odpovídat entanglovaným stavům více qubitů (např. Bellova báze, GHZ báze, atd.), apod. V praxi však postačuje provádět měření vzhledem ke kanonické („výpočetní“) bázi a je-li potřeba, před měřením provést unitární transformaci odpovídající žádané změně báze (takto lze nahradit měření vzhledem k libovolné bázi měřením ve výpočetní bázi).

1.1.4 Kvantový algoritmus a klasická část počítače

Úspěšnost kvantových algoritmů spočívá v kombinaci tří důležitých aspektů, kterými se kvantové zpracování kvantové informace liší od klasického zpracování klasické informace:

1. Superpozice
2. Kvantový paralelismus
3. Entanglement
4. Interference

1.1.4.1 Superpozice

Jak již bylo zmíněno v části „1.1.2 Stav kvantového jádra, qubit“, stav kvantového jádra (kvantového počítače) o N qubitech je obecně popsán superpozicí všech možných 2^N binárních rozvoju odpovídajících výpočetní bázi (direktní součiny kanonických bázových vektorů jednotlivých qubitů), to umožňuje exponenciálně větší prostor pro možné zpracování informace (v kvantovém jádře) v porovnání s klasickým počítačem.

1.1.4.2 Kvantový paralelismus

Základem programování je podmíněné větvení. Klasický program si lze představit jako strom (tj. cyklů prostý graf zobrazující možné stavy³⁴ jako vrcholy a přechody mezi nimi jako orientované hrany (směřující od kořene)), zatímco klasický (deterministický) počítač (jehož modelem může být klasický Turingův stroj (TM)) prochází jedinou větví a pravděpodobnostní Turingův stroj (PTM) v podstatě také, kvantový počítač (reprezentovaný Univerzálním kvantovým počítačem, tj. Kvantovým Turingovým strojem (QTM) jako modelem) prochází více (nebo všechny) větve současně. Je to dáno linearitou operátorů v kvantové mechanice. Kvantové n -qubitové hradlo (unitární operátor působící na n -qubitový registr N -qubitového kvantového jádra) \hat{U} tak působí na $|\psi\rangle$ (5) podle vztahů

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^{N-n}-1} \sum_{k=0}^{2^n-1} \alpha_{j,k} |j, k\rangle, \quad (119)$$

$$\hat{U}|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^{N-n}-1} \sum_{k=0}^{2^n-1} \alpha_{j,k} \hat{U}|j, k\rangle = \sum_{j=0}^{2^{N-n}-1} \sum_{k'=0}^{2^n-1} \left(\sum_{k=0}^{2^n-1} \alpha_{j,k} U_{k',k} \right) |j, k'\rangle, \quad (120)$$

kde $|j, k\rangle$ označuje stav výpočetní báze odpovídající n -bitovému registru nesoucímu binární zápis čísla k a $N-n$ -bitovému registru nesoucímu binární zápis čísla j , $U_{k',k} \in \mathbb{C}$ je element matice operátoru \hat{U} ve výpočetní bázi registru na který působí.

³⁴ Je-li tentýž stav navštíven více-krát je přesto zobrazen pokaždé novým vrcholem výpočetního stromu.

Rozdíl oproti klasickému vypočtu se snadno nahlédne, uvážíme-li speciální případ unitárního operátoru \hat{U} a to operátor permutující báze vektory (takový pak implementuje určitou reveribilní³⁵ boolovskou funkci $f: \{0;1\}^n \rightarrow \{0;1\}^n$), ten pak označíme \hat{U}_f :

$$\hat{U}_f: |j, k\rangle \rightarrow |j, f(k)\rangle, \quad (121)$$

restrikce na invertovatelné funkce lze obejít například s využitím registru zbylých $N-n$ qubitů, uvažme $N-n \equiv p$ jako počet bitů proměnné obecné boolovské funkce $g: \{0;1\}^p \rightarrow \{0;1\}^n$, pak lze zavést unitární operátor \hat{U}_g jeho akcí na báze vektorech jako

$$\hat{U}_g: |j, k\rangle \rightarrow |j, k \oplus g(j)\rangle, \quad (122)$$

kde operátor \oplus umístěný mezi dvojicí čísel o n binárních číslicích značí jejich součet modulo 2^n a tedy speciálně platí

$$\hat{U}_g: |j, 0\rangle \rightarrow |j, g(j)\rangle. \quad (123)$$

Působíme-li operátorem \hat{U}_g na jediný báze vektor $|j, 0\rangle$ dojde k vyčíslení funkce g pro jedinou hodnotu proměnné j tak jako v případě klasického algoritmu (a tedy k průchodu jedinou větví výpočetního stromu). Působíme-li ale na superpozici (124) (pro jednoduchost uvažuji v lineární kombinaci jen stavy odpovídající „resetovaném“ stavu $\otimes_{i=1}^n |0\rangle$ „výstupního“ kvantového registru pro \hat{U}_g (dále, v rámci programovacího jazyka QCL také označovaný jako „kvantová funkce“)), obdržíme stav (125)

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^p-1} \alpha_{j,0} |j, 0\rangle, \quad (124)$$

³⁵ Bijektivní, tj. invertovatelnou.

$$\hat{U}_g |\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^p-1} \alpha_{j,0} \hat{U}_g |j, 0\rangle = \sum_{j=0}^{2^p-1} \alpha_{j,0} |j, g(j)\rangle, \quad (125)$$

kde došlo jedinou aplikací hradla \hat{U}_g k „vyčíslení hodnoty“³⁶ funkce g pro všech 2^p možných hodnot její proměnné. Jedná se tak o paralelní průchod 2^p větvemi výpočetního stromu odpovídajícího klasického programu.

Jinou ukázkou kvantového paralelismu je aplikace podmíněných kvantových hradel. Podmíněné hradlo \hat{U}_C působí opět na dva kvantové registry (nesdílející žádný qubit) – kontrolní („control“, budu uvažovat, že má velikost a qubitů a indexovat stavy jeho výpočetní báze indexem $j \in \{0; 1; \dots; 2^a - 1\}$) a cílový („target“, nechť je b -qubitový a indexovaný k). Nejjednodušší varianta hradla \hat{U}_C je definována tak, že právě tehdy když obsahuje kontrolní a -qubitový registr ($a > 0$) samé jedničky (tj. binární zápis $j = 2^a - 1$) je na cílový b -qubitový registr aplikován operátor $\hat{U} : C^{2^b} \rightarrow C^{2^b}$, jinak je na cílový b -qubitový registr aplikována identita, identická operace je v každém případě aplikována na kontrolní registr. Pro podmíněné hradlo \hat{U}_C lze tedy psát

$$\hat{U}_C = \left(\hat{I}_{(a)} - |(1)_a\rangle\langle(1)_a| \right) \otimes \hat{I}_{(b)} + |(1)_a\rangle\langle(1)_a| \otimes \hat{U}, \quad (126)$$

³⁶ Jedno vyhodnocení funkce g v klasickém zpracování informace vede k zjištění funkční hodnoty pro jedinou hodnotu proměnné j , při kvantovém zpracování informace můžeme pomocí jediného vyhodnocení funkce g (jediné aplikace ji odpovídajícího kvantové hradla) vytvořit superpozici stavů odpovídajících vyčíslení funkce g pro více, popřípadě všechny možné hodnoty její proměnné. Uvozovky v textu jsou uvedeny z toho důvodu, že přímočarý přístup ke všem funkčním hodnotám není možný, neboť změřením p -qubitového registru pro proměnnou j , nebo n -qubitového registru pro výstupní proměnnou $g(j)$ získáme vždy jen jedinou funkční hodnotu. Jak však bude ukázáno dále, je možné, díky interferenci amplitud pravděpodobnosti přezásobujících kety $|j, g(j)\rangle$ shromáždit (aplikací nevelkého počtu kvantových hradel) některé informace obsahující v sobě více (popř. „mnoho“) funkčních hodnot g do jediné amplitudy pravděpodobnosti a měřením poté tuto informaci extrahovat.

kde $\hat{I}_{(n)}$ je operátor identity působící na n -qubitový registr a $|1_a\rangle$ je ket odpovídající stavu $j = 2^a - 1$. Pro $|\psi\rangle \in C^{2^{a+b}}$ ve tvaru analogickém (119), tj.

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^a-1} \sum_{k=0}^{2^b-1} \alpha_{j,k} |j\rangle \otimes |k\rangle, \quad (127)$$

lze psát

$$\hat{U}_C |\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^a-1} \sum_{k=0}^{2^b-1} \alpha_{j,k} \hat{U}_C |j\rangle \otimes |k\rangle, \quad (128)$$

$$\hat{U}_C |\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^a-2} \sum_{k=0}^{2^b-1} \alpha_{j,k} |j\rangle \otimes |k\rangle + |2^a-1\rangle \otimes \sum_{k=0}^{2^b-1} \alpha_{2^a-1,k} \hat{U} |k\rangle, \quad (129)$$

odkud je patrné, že narozdíl od klasického algoritmu, kdy je třeba smyčkou procházet postupně různé hodnoty kontrolního registru a podle jeho hodnoty aplikovat nebo neaplikovat hradlo \hat{U} na cílový registr, v případě kvantového algoritmu není smyčky potřeba, neboť aplikace podmíněného hradla na všechny varianty zajišťuje tvar vlnové funkce (127) a linearita operátoru \hat{U}_C .

1.1.4.3 Entanglement

Definice 8: Entanglement subsystémů A a B (čistý stav složeného systému).

Bud' X_{AB} kvantový systém a A a B jeho jediné podsystémy. Hilbertův prostor H_{AB} odpovídající systému X_{AB} bud' separabilní, stejně jako Hilbertovy prostory odpovídající subsystémům A (H_A) a B (H_B). Samozřejmě platí

$$H_{AB} = H_A \otimes H_B, \quad (130)$$

Čistý stav systému X_{AB} (popsaný normalizovaným ketem $|\psi_{AB}\rangle \in H_{AB}$) označím jako *produktový* (nebo také *separabilní*), existují-li stavy subsystémů A a B (popsané normalizovanými kety $|\psi_A\rangle \in H_A$ a $|\psi_B\rangle \in H_B$) tak, že platí:

$$|\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle. \quad (131)$$

Takové stavy systému X_{AB} , které *nejsou produktové* (vzhledem k subsystémům A a B) označím *entanglované*³⁷).

Poznámka 7: Charakterizace produktových/entanglovaných stavů vzhledem ke kanonické (výpočetní) bázi:

Bud' $|\psi_{AB}\rangle \in H_{AB}$ stav složeného systému dvou qubitů A a B . Ten lze vyjádřit pomocí kanonické báze b vzniklé z direktních součinů vektorů kanonické báze subsystémů: $b = \{|0\rangle \otimes |0\rangle; |0\rangle \otimes |1\rangle; |1\rangle \otimes |0\rangle; |1\rangle \otimes |1\rangle\}$,

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{k=0}^1 \sum_{j=0}^1 \alpha_{jk} |j\rangle \otimes |k\rangle, \quad (132)$$

pak je stav $|\psi_{AB}\rangle$ produktový právě když existuje čtveřice komplexních čísel $\beta_0^{(A)}$, $\beta_1^{(A)}$, $\beta_0^{(B)}$, $\beta_1^{(B)}$ taková, že $\alpha_{jk} = \beta_j^{(A)} \beta_k^{(B)}$ pro všechna $(j, k) \in \{0; 1\}^2$.

Poznámka 8: Entanglement jako fyzikální fenomén

Entanglement stavů a více subsystémů daného systému (v rámci nějakého jeho stavu) znamená, že měření na nich prováděná jsou statisticky korelována. To je typický případ v případě, že subsystémy daného systému interagují (hamiltonián vnitřních stupňů volnosti daného systému obsahuje člen závisící současně na proměnných dvou a více subsystémů).

³⁷ Také hovořím o entanglování subsystémů A a B (tj. jedná se nejen o charakterizaci stavu složeného systému X_{AB} , ale také o vztah (stavů) podsystémů A a B v daném stavu X_{AB} ($|\psi_{AB}\rangle$))

Atom heliového typu

Jako příklad složeného systému a jeho entanglovaného stavu uvedu libovolný stacionární stav vnitřních stupňů volnosti atomu heliového typu (dvouelektronového atomu). Tento systém se od systémů použitelných jako kvantové jádro kvantového počítače liší především v tom ohledu, že oba elektrony atomu heliového typu jsou nerozlišitelné, což by znemožňovalo aplikaci kvantových hradel na konkrétní subsystém. Druhou odlišností je, že níže popisované Hilbertovy prostory odpovídající možným stavům subsystémů ($L^2(R^3) \otimes C^2$) jsou nekonečně-rozměrné³⁸ (narozdíl od konečného počtu stavů quditů). Konečně třetí odlišností je poměrně silná interakce subsystémů, která brání dobré vnější kontrole nad stavem systému (což je požadavek přirozený pro kvantové systémy použitelné jako jádra kvantového počítače). Přesto tento příklad ukazuje, že entanglement není nic exotického, ale naopak v přírodě naprosto běžný jev.

Uvažme tvar plně nerelativistického hamiltoniánu vnitřních stupňů volnosti atomu heliového typu v Born-Oppenheimerově přiblížení (133) a tomu odpovídající Stacionární Schrödingerovu rovnici (134),

$$\hat{H} = -\Delta_1 - \Delta_2 - \frac{2Z}{r_1} - \frac{2Z}{r_2} + \frac{2}{r_{12}}, \quad (133)$$

$$\hat{H} \psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_j \psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (134)$$

lze snadno ukázat, že operátory celkové energie \hat{H} , permutace poloh elektronů $\hat{\Pi}$, kvadrátu celkového momentu hybnosti \hat{L}^2 , jeho třetí komponenty \hat{L}_z , kvadrátu celkového spinu³⁹ \hat{S}^2 , jeho třetí komponenty \hat{S}_z a prostorové inverze \hat{P} všechny

³⁸ Teoreticky by však bylo možné zabývat se jen spinovými stavy každého elektronu. Prostor těchto stavů je C^2 pro každý elektron. Použitelnosti pro kvantové počítání však brání nerozlišitelnost a silná vzájemná interakce.

³⁹ Operátor spinu k -té částice do směru i -té osy má v bázi vlastních funkcí z -komponenty spinu tvar poloviny Pauliho matice působící na prostor spinových stavů k -té částice, tj.

navzájem komutují. Rovnici (134) můžeme vnímat jako obecnější rovnici obsahující vlnovou funkci závislou také na spinových proměnných dvou elektronů ($s_1, s_2 \in \{-1/2, +1/2\}$) - $\psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_1, s_2)$ přes tyto proměnné vyintegrovanou⁴⁰.

Na více-částicovou vlnovou funkci závislejší na proměnných více nerozlišitelných částic je třeba ještě klást podmínku (anti)symetrie vzhledem k vzájemné záměně prostorových i spinových souřadnic dvou nerozlišitelných bosonů (fermionů). V tomto případě tedy požadujeme

$$\psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_1, s_2) = -\psi_j(\vec{r}_2, \vec{r}_1, s_2, s_1). \quad (138)$$

Vlnovou funkci požadujeme normalizovanou⁴¹, tj.

$$\langle \psi_j | \psi_j \rangle = \sum_{s_1=-1/2}^{+1/2} \sum_{s_2=-1/2}^{+1/2} \iint_{R^3 R^3} |\psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_1, s_2)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = 1. \quad (139)$$

S ohledem na výše popsanou ÚMKO (Úplnou množinu komutujících operátorů) lze hledat vektory $|\psi_j\rangle \in \text{Antisym}(L^2(R^3) \otimes C^2 \otimes L^2(R^3) \otimes C^2)$ tak, že:

$$\hat{s}_j^{(k)} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_j^{(k)}, \quad [\hat{s}_j^{(n)}, \hat{s}_k^{(m)}] = i \delta_{nm} \varepsilon_{jkl} \hat{s}_l^{(n)}, \quad \hat{S}_j \equiv \hat{s}_j^{(1)} + \hat{s}_j^{(2)}, \quad (137)$$

⁴⁰ Integrace přes diskretní proměnnou probíhá jako součet. Různé hodnoty dvouhodnotové spinové proměnné odpovídají indexům komponent vektoru v C^2 (prostor spinových stupňů volnosti částice se spinem $s = 1/2$).

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{z,1} = s_1, s_{z,2} = s_2 | \psi_j \rangle \equiv \psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_1, s_2), \quad (135)$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \psi_j \rangle = & \psi_j\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_j\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ & + \psi_j\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \psi_j\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (136)$$

⁴¹ což je ekvivalentní podmínka podmínce normalizovatelnosti, tj. konečnosti a nenulovosti normy. Neboť je-li norma nenulová a konečná, lze jejím vydělením získat normalizovanou funkci.

$$\hat{H} |\psi_j\rangle = E_j |\psi_j\rangle, \quad (140)$$

$$\hat{L}^2 |\psi_j\rangle = L_j(L_j+1) |\psi_j\rangle, \quad (141)$$

$$\hat{L}_z |\psi_j\rangle = M_j |\psi_j\rangle, \quad (142)$$

$$\hat{S}^2 |\psi_j\rangle = S_j(S_j+1) |\psi_j\rangle, \quad (143)$$

$$\hat{S}_z |\psi_j\rangle = M_{S,j} |\psi_j\rangle, \quad (144)$$

Snadno nahlédneme, že $S_j = 0$ (pro singletní stavy) nebo $S_j = 1$ (pro tripletní stavy), $M_{S,j} \in \{-S_j; 0; +S_j\}$. Lze ukázat, že vlnovou funkci lze pro případ dvou elektronů a spinově-nezávislého hamiltoniánu (133) psát jako součin prostorové a spinové části (145). S tím souvisí akce operátoru permutace částic, kterého jsou řešení vlastními funkcemi s vlastním číslem +1 (symetrická prostorová část, antisymetrická spinová část, tj. $S_j = 0$, (146)) nebo -1 (antisymetrická prostorová část, symetrická spinová část, tj. $S_j = 1$, (147))⁴².

$$\psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_1, s_2) = \phi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \chi(s_1, s_2), \quad (145)$$

$$S_j = 0 \Rightarrow \hat{\Pi} \phi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_j(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = +\phi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (146)$$

$$S_j = 1 \Rightarrow \hat{\Pi} \phi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_j(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = -\phi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (147)$$

⁴² Pro spinové části se s pomocí komutačních relací pro operátory spinu snadno odvodí:

$$S_j = 0, \quad M_{S,j} = 0 \Rightarrow |\chi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle), \quad (148)$$

$$S_j = 1, \quad M_{S,j} = 0 \Rightarrow |\chi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle), \quad (149)$$

$$S_j = 1, \quad M_{S,j} = -1 \Rightarrow |\chi_j\rangle = |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle, \quad (150)$$

$$S_j = 1, \quad M_{S,j} = +1 \Rightarrow |\chi_j\rangle = |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, \quad (151)$$

ze zápisu těchto spinových částí je patrné, že ty na pravé straně (148) a (149) odpovídají entanglovaným stavům (lze snadno dokázat sporem), kdežto ty na pravé straně (150) a (151) produktovým stavům.

Nyní ukáží, že jak pro tripletní, tak pro singletní stavy platí, že jejich prostorová část je nezbytně entanglovaným stavem vzhledem k podsystémům „elektron 1“ a „elektron 2“ a to kvůli elektron-elektronové repulzi (tj. vzájemné interakci subsystémů).

Lemma 1: Pokud pro prostorovou část dvoučásticové vlnové funkce platí (146) či (147) a (152) a je normalizovanou vlastní funkcí hamiltoniánu (133)

$$\lim_{\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2} \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad \forall \vec{r}_2 \in R^3, \quad (152)$$

pak ϕ není jediným součinem dvou jednočásticových funkcí (tj. produktovým stavem) $\phi_1(\vec{r}_1) \cdot \phi_2(\vec{r}_2)$.

Důkaz: Sporem. Necht' ano, pak z podmínek (146) či (147) a nenulovosti součinu plyne, že ϕ_1 a ϕ_2 by musely být až na multiplikatívni fázový faktor shodné⁴³ a tedy výsledkem limity by byl výraz $[\phi_1(\vec{r}_2)]^2$ (až na fázový faktor), který by byl nulový v celém R^3 . Pak by ovšem byla funkce ϕ_1 nulová v celém R^3 a tedy i ϕ by byla identicky nulová – pak by ovšem nemohla být normalizovanou vlastní funkcí (133).

Pro tripletní stavy plyne splnění předpokladu lemmatu 1 přímo ze vztahu (147) a spojitosti vlnové funkce. Pro singletní stavy je třeba splnění předpokladu lemmatu 1 ukázat dosazením (133) do (134) a diskuzí limity jednotlivých členů vzniklé rovnice pro $\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2$:

$$\left[-\Delta_1 - \frac{2Z}{r_1} \right] \psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \left[-\Delta_2 - \frac{2Z}{r_2} \right] \psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \left[\frac{2}{r_{12}} - E_j \right] \psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0, \quad (153)$$

první a druhý člen budou v této situaci a pro nenulový vektor \vec{r}_2 obecně určité konečné hodnoty závislé na \vec{r}_1 , ale třetí člen je dán součinem výrazu, který v limitě

⁴³ Kuriózní alternativa, že ϕ_1 bude nenulová právě v té části R^3 ve které bude ϕ_2 nulová může být vyloučena s poukazem na symetrii rovnice (134) a oscilační větu.

nabývá hodnoty $+\infty$ a vlnové funkce. Je tedy patrné, že aby rovnice platila i v limitě, je třeba, aby platilo (152) (pro $\phi = \Psi$), tj. byla splněna podmínka lemmatu 1.

Z uvedeného plyne, že všechny stacionární stavy atomu heliového typu odpovídají entanglovaným prostorovým částem vlnové funkce. Entanglement je běžným rysem všech stacionárních stavů v kvantové chemii.

Obecná molekula

Pro nejhrubější ab initio aproximaci vlnové funkce (elektronového problému) se zpravidla uvažuje „neoptimálnější“ antisymetrizovaný produktový stav jednoelektronových funkcí (Hartree-Fockova metoda). Dříve používaná Hartreeho metoda uvažovala pouhý součin jednoelektronových funkcí, tj. přímo produktový stav.

Ukazuje se, že pro zjištění (pro účely praktického výzkumu dostatečně přesné) energie stacionárního stavu (její „absolutní“ hodnoty), ale i řady dalších vlastností (a především pak energetických rozdílů různých geometrií molekuly, nebo soustav molekul) je nezbytné jít za rámec Hartreeho, i Hartree-Fockovy metody a při řešení stacionární Schrödingerovy rovnice se neomezovat na aproximaci vlnové funkce výše popsáním způsobem. Hovoříme o nutnosti zahrnout „elektronovou korelaci“ a rozdíl přesné nerelativistické energie (skutečné hodnoty vlastního čísla (elektronové části) nerelativistického hamiltoniánu molekuly) a energie získané Hartree-Fockovou aproximací říkáme „Korelační energie“.

Entanglement je tedy v kvantové chemii dlouho znám jako jev elektronové korelace a pozorujeme jej u všech studovaných systémů.

Entanglement a kvantové algoritmy

Entanglement je nezbytnou součástí každého kvantového algoritmu využívajícího více než 1 qubit, má-li tento poskytnout nějaké relevantní urychlení výpočtu oproti klasickým algoritmům pro daný problém⁴⁴.

⁴⁴ Práce [16] (str. 40, Lemma 3.2.4.) ukazuje, že kvantový Turingův stroj bez entanglementu může být simulován na klasickém Turingově stroji v lineárním čase (vzhledem k času po který trvá výpočet na kvantovém Turingově stroji).

Entanglement umožňuje distribuci informace uložené v amplitudách pravděpodobnosti mezi jednotlivými subsystemy kvantového jádra kvantového počítače a stojí za exponenciálním množstvím amplitud pravděpodobnosti a jejich sdílení všemi entanglovanými qubity (proto lze danou informaci získat měřením libovolného z dané množiny qubitů). Jak-koli je hlubší výzkum entanglementu teprve v začátcích ([14], [15], [16]), důvody, proč hraje tak velkou roli v kvantové teorii informace jsou (alespoň v hrubších obrysech) snadno intuitivně formulovatelné.

1.1.4.4 Interference

Společně s možností superpozic, kvantového paralelismu a entanglementu je interference zdrojem možného překonání výpočetní efektivity klasických počítačů jejich kvantovými analogy. Interferencí se v této souvislosti rozumí fakt, že součet pravděpodobností, že daná konfigurace (odpovídající v případě kvantového počítače kombinaci stavu kvantového jádra $|\psi\rangle$ kvantového počítače a stavu výpočetního procesu (konkrétní řádce v seznamu instrukcí odpovídajících kvantovému algoritmu)) c_x bude dosažena z různých výpočetních cest l (pro l -tou cestu označím tuto pravděpodobnost $p_x^{(l)} \in \langle 0; 1 \rangle$ (a bude pro ni platit (154), kde $\alpha_x^{(l)} \in C_{\langle 0; 1 \rangle}$) je komplexní amplituda pravděpodobnosti přechodu) je obecně jiný nežli celková pravděpodobnost dané konfigurace v daném okamžiku výpočetního procesu, kterou označím p_x , platí pro ni vztah (155).

$$p_x^{(l)} = |\alpha_x^{(l)}|^2, \quad (154)$$

$$p_x = \left| \sum_l \alpha_x^{(l)} \right|^2. \quad (155)$$

Pokud platí

$$\left| \sum_l \alpha_x^{(l)} \right|^2 \geq \sum_l |\alpha_x^{(l)}|^2, \quad (156)$$

hovoříme o „konstruktivní interferenci“⁴⁵, pokud naopak platí (157), hovoříme o „destruktivní interferenci“.

$$\left| \sum_l \alpha_x^{(l)} \right|^2 < \sum_l |\alpha_x^{(l)}|^2. \quad (157)$$

Jak je poznamenáno v [16], jev konstruktivní interference lze pozorovat i v případě pravděpodobnostních Turingových strojů (pokud přiřadíme jednotlivým pravděpodobnostem jim odpovídající amplitudy rovné odmocninám, obdržíme ve vztahu (156) pro případ pravděpodobnostního Turingova stroje rovnost)). Destruktivní interference je, nicméně, pro kvantové algoritmy (a jim odpovídající kvantové Turingovy stroje) charakteristická a je jedním ze zdrojů potenciálně větší výpočetní „síly“ (schopnosti řešit některé úlohy v dramaticky kratším čase) kvantových počítačů oproti klasickým počítačům.

Ukázkou destruktivní interference může být například dále podrobně studovaný algoritmus Phase Estimation (ve své neiterativní verzi, kdy je destruktivní interference snadněji nahládnutelná, v této práci viz část „Algoritmus PEA I“, přesněji jde o krok „3“), kdy je aplikována kvantová Fourierová transformace na m -qubitový registr a a v případě, že před zahájením algoritmu druhý v algoritmu uvažovaný kvantový registr b (o l qubitech) obsahoval dostatečně přesný odhad vlastního vektoru studované unitární matice $U \in C^{(2^l, 2^l)}$, bude distribuce čtverců absolutních hodnot amplitud v rozvoji m -qubitového registru do výpočetní báze velice úzká, v optimálním případě (kdy se vychází z přesného vlastního vektoru a fáze odpovídající jemu odpovídajícímu vlastnímu číslu je přesně popsateľná ve tvaru $y/2^m$) půjde o „1“ pro jediný vektor výpočetní báze a „0“ pro všechny ostatní).

Další ukázkou destruktivní interference je krok „7“ v kapitole „Deutschův-Jozsův algoritmus“, jak bude popsáno dále. Destruktivní interference umožňuje „shluknutí“ informace z mnoha pravděpodobnostních amplitud do jediné (k čemuž obvykle slouží kvantová varianta (diskrétní) Fourierovy transformace, což přímočaře

⁴⁵ Neostrou nerovnost jsem použil v souladu s [16], pochopitelně, nastává-li ve vztahu (156) rovnost, jde o zvláštní případ, kdy se interference v tom smyslu jak ji vnímáme obvykle ve fyzice nekoná.

vyplývá z vlastností, které Fourierova transformace má), která je v následujícím procesu změřena. Destruktivní interference tedy zchraňuje jinak nepříjemný fakt, že ačkoli kvantové počítače umožňují pracovat na všech větvích výpočetního stromu současně, po provedení měření (což je jediný způsob jak získat výsledek výpočtu) se nevratně přesuneme do jediné z nich. Naštěstí, ještě před námi vynuceným „kolapsem vlnové funkce“ je možné zachránit informaci z ostatních větví vhodnou transformací (v případě Phase Estimation Fourierovou v případě Deutschova-Jozsova Walls-Hadamardovou [28]-[30]) vedoucí k destruktivní interferenci na většině, nebo všech větvích výpočetního stromu.

1.2 Programovací jazyk QCL

Programovací jazyk QCL (Quantum Computing Language) je meta-jazyk strukturou podobný jazyku C++ pro výpočty na klasických počítačích, avšak, navíc (oproti C++) obsahuje instrukce pro práci s kvantovými registry a jejich měření. Lze tedy programy/algoritmy napsané v QCL pro účel simulace kvantových algoritmů na klasických počítačích snadno přepsat do kódu jazyka C++ s tím, že v rámci jazyka C++ vytvoříme objekty a metody odpovídající kvantovým registrům, kvantovým hradlům a měření ve výpočetní bázi. Podobně, QCL může sloužit pro představu jakým způsobem budou programovány univerzální/ější kvantové počítače a jako základ pro tvorbu programovacích jazyků pro tyto zařízení.

Jazyk QCL je podrobně a čitelně popsán v publikaci [31], jak-koli uznávám, že by to bylo vhodné, z technicko-časových důvodů zde podrobnější popis jazyka QCL neuvádím. Nicméně na všech místech v mé práci, kde se vyskytují příkazy z tohoto jazyka jsou zároveň uvedena vysvětlení těchto příkazů ve smyslu kvantové teorie (unitární operátor, měření na kvantovém registru, příprava stava) a matematická formule popisující změnu stavu kvantového jádra, pravděpodobnost získání určitého výsledku, atd. Pro lepší náhled i na konkrétní příkazy (uvedené obvykle **modrým písmem Courier New tučně**) odkazují čtenářstvo této práce na literaturu [8], [31].

1.3 Kvantové algoritmy

1.3.1 Výpočetní modely

Klasický logický obvod

V kapitole „1.1.2.4 *Klasické a kvantové výpočetní modely*“ již byl zmíněn model Turingova stroje. Jemu ekvivalentní a často daleko užitečnější je model logického obvodu. V klasickém případě jsou v tomto modelu bity paměti počítače (odpovídající políčkům na pásce Turingova stroje pro tu jeho variantu, kdy abeceda Σ má 4 znaky – začátek pásky \blacktriangleright , 0, 1 a prázdné políčko b) znázorněny jako vodorovné linky (či „vodiče“) vedoucí z počátečního místa, kde je jim přiřazena vstupní (počáteční) hodnota až do koncového místa, kde lze nalézt výsledek. Mezi těmito místy jsou zakreslena hradla (obdelníky s několika vstupními vodiči a několika výstupními), vodiče jsou vždy navzájem rozlišitelné a nevytváření žádné cykly (nicméně, mohou být větveny operací „Fanout“, nebo naopak spojovány hradly jež mají menší počet výstupních než vstupních vodičů). Lze ukázat, že s pomocí kombinace několika málo univerzálních hradel a vhodného počtu vodičů lze efektivně simulovat běh libovolného Turingova stroje a tedy libovolného klasického algoritmu.

Kvantový logický obvod

Analogicky lze zkonstruovat model kvantového (logického) obvodu. Rozdíl spočívá v tom, že jsou povolena pouze unitární (a tedy invertovatelná) hradla a tak počet výstupních vodičů (reprezentujících tentokrát jednotlivé qubity) musí být shodný s počtem vstupních vodičů. Další odlišnost je v charakteru hradel a nemožnosti větvení vodičů u kvantových obvodů – viz „No cloning theorem“ níže. Kromě reverzibilních hradel je v případě kvantových obvodů přípustná i nereverzibilní operace „měření“, znázorňovaná v kvantových obvodech „budíkem“. Tato operace má však obecně za následek ovlivnění stavu všech qubitů, nikoli pouze toho, který byl přímo změřen. Za vstup do kvantových obvodů lze bez újmy na obecnosti uvažovat N qubitů ve stavu $|0\rangle$, avšak, nelze tento, nebo jiný stav určitému

qubitu během výpočtu znovu „vnutit“. Kvantové obvody, na rozdíl od klasických, nemohou obsahovat „mrtvé konce“.

Protože hradla v kvantových obvodech neodpovídají boolovským funkcím, ale unitárním maticím, existují jiné množiny univerzálních hradel než v klasickém případě.

1.3.2 Příklady kvantových algoritmů

1.3.2.1 Deutschův-Jozsův algoritmus

Je dána n -bitová boolovská funkce $f: \{0; 1\}^n \rightarrow \{0; 1\}$, kterou dokážeme vyčíslit pro každou hodnotu proměnné, ale nic dalšího o ní nevíme, jen to, že může být buďto konstantní, nebo „vyvážená“ (rovna 0 na polovině domény a 1 na doplňku v $\{0; 1\}^n$). Úlohou je rozhodnout mezi těmito dvěma možnostmi. Klasický algoritmus potřebuje $O(2^n)$ kroků, kvantový pouze⁴⁶ $O(1)$.

Úloha může být formulována jazykem obvyklým pro teorii komunikace/kryptografii:

Algoritmus sestává z následujících kroků:

- 1) **Reset:** $|\psi\rangle = |00\dots 0\rangle$
- 2) Alokace n -qubitového registru a a 1-qubitového registru b :

qureg a[n]; qureg b[1]:

$$|\psi\rangle = |00\dots 0\rangle_a \otimes |0\rangle_b$$

- 3) **Not(b):**

$$|\psi\rangle = |00\dots 0\rangle_a \otimes |1\rangle_b$$

- 4) Hadamardovo hradlo na oba registry (**Mix(a); Mix(b)**):

$$|\psi\rangle \rightarrow \left(\otimes_{j=1}^n \hat{H}_{(a[j])}\right) \left(\otimes \hat{H}_b\right) |\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle_a \otimes (|0\rangle - |1\rangle)_b$$

⁴⁶ Těchto $O(1)$ kroků je však vyjádřeno pomocí $O(n)$ elementárních hradel/měření. Počet vyčíslení funkce f samotné (obvykle se považuje za nejvíc náročnou operaci) však je $O(1)$.

5) Výpočet funkce f pomocí „oracle“ (realizace přímého mapování stavů

$$|x\rangle_a |y\rangle_b \rightarrow |x\rangle_a |y \oplus f(x)\rangle_b \quad (\mathbf{f(a, b)})$$

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{U}_f |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle_a \otimes (|f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle)_b$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} |x\rangle_a \otimes (|0\rangle - |1\rangle)_b$$

6) Dealokace registru

b (dále neuváděn)

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} |x\rangle_a$$

7) Hadamardovo hradlo na registr a (**Mix(a)**):⁴⁷

$$|\psi\rangle \rightarrow \otimes_{j=1}^n H_{(a[j])} |\psi\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{y=0}^{2^n-1} \left(\sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x) + (x \bullet y)} \right) |y\rangle_a$$

8) Měření na registru a (**Meas(a, p)**)

Pravděpodobnost změření hodnoty registru $a = 0$ (00...0) je dána výrazem

$$p(0) = \left| \frac{1}{2^n} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} \right|^2, \quad (158)$$

který je roven 1 pro $f(x)$ konstantní⁴⁸ a 0 pro $f(x)$ „vyváženou“⁴⁹. To znamená, je-li výsledek měření roven „ $p = 0$ “ algoritmus rozhodl pro variantu „ f konstantní“,

⁴⁷ Výraz $x \bullet y$ má význam skalárního součinu vektorů binárních (bitových) rozvoju (zápisů)

celých čísel x a y interpretovaných jako vektory. Tedy, buď $x = \sum_{j=1}^n x_j 2^{j-1}$ a $y = \sum_{j=1}^n y_j 2^{j-1}$,

pak $x \bullet y = \sum_{j=1}^n x_j y_j$.

⁴⁸ Sumace obsahuje součet 2^n stejných hodnot (+1 nebo -1) a $p(0)$ je tak druhou mocninou absolutní hodnoty (-1) nebo (+1).

⁴⁹ Sumace obsahuje stejný počet hodnot +1 jako hodnot -1 (2^{n-1} v obou případech) a její výsledek je tak 0.

v opačném případě (je-li výsledek měření jaká-koli nenulová hodnota registru a) algoritmus rozhodl pro variantu „ f “, „vyvážená“.

I na příkladu takto jednoduchého kvantového algoritmu si lze ukázat principy funkce efektivních kvantových algoritmů:

Krok 4 využívající Hadamardovy transformace na $n+1$ qubitů (druh zobecněné diskretní Fourierovy transformace) vytváří superpozici stavů (s koeficienty stejné absolutní hodnoty).

Krok 5 využívá linearity unitárního hradla $\hat{U}_f : C^{2^n} \otimes C^2 \rightarrow C^{2^n} \otimes C^2$ a tedy umožňuje nalézt „globální“ vlastnost funkce f pomocí jediné aplikace kvantového hradla ji odpovídajícího – tomu říkáme „kvantový paralelismus“. Tento krok zajišťuje, že počet volání funkce f je v kvantovém algoritmu $O(1)$, nikoli $O(2^n)$.

Současně je po aplikaci hradla \hat{U}_f stav kvantového jádra v entanglovaném stavu, který umožňuje sdílení informace z kvantového registru b v kvantovém registru a .

Krok 7 využívá destruktivní interference k tomu, aby amplitudy pravděpodobnosti buďto u vektoru $|00\dots 0\rangle_a$ a nebo současně u všech ostatních vektorů výpočetní báze registru a nabyly nulových hodnot. V následujícím kroku je pak měřením zjištěno, která z těchto dvou alternativ nastala.

Jak je patrné, Krok 7 v podstatě provádí *fourierovu analýzu* funkce $2^{-n/2}(-1)^{f(x)}$ a amplituda pravděpodobnosti pro hodnotu registru $a = 0$ tak odpovídá fourierovu koeficientu funkce $2^{-n/2}(-1)^{f(x)}$ stojícímu před konstantní funkcí z abstraktní fourierovy báze $B = \{g_y(x) = 2^{-n/2}(-1)^{x \cdot y} \mid y \in \{0; 1; \dots; 2^n - 1\}\}$ funkcí $h : \{0; 1\}^n \rightarrow R$. Je-li tento roven jedné (tj. „100%“ pro normalizované funkce), pak musí být konstantní funkce $2^{-n/2}(-1)^{f(x)}$, což pro boolovskou funkci f znamená, že musí být sama f konstantní. Je-li výše uváděný fourierovský koeficient nulový, musí se realizovat druhá možnost.

Deutsch-Jozsův algoritmus je tedy algoritmem provádějícím fourierovu analýzu funkce.

1.3.2.2 Kvantová diskretní fourierova transformace

Definice 9: Diskretní Fourierova transformace (DFT) funkce

Bud' zobrazení⁵⁰ $f : \{0; 1; \dots; N-1\} \rightarrow C$, pak diskretní fourierovou transformací f , kterou označíme $F(f)$ nazvu zobrazení $F(f) : \{0; 1; \dots; N-1\} \rightarrow C$ pro které platí:

$$(F(f))_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} f_j \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{N}\right). \quad (159)$$

Poznámka 9: Transformace $f \rightarrow F(f)$ je lineární a zachovává skalární součin (definovaný pro komplexní funkce nad N bodovou množinou jako v prostoru C^N). Lze ji tedy přiřadit unitární matici U_{DFT} tak, že platí $(F(f))_k = (U_{DFT}f)_k$, kde na pravé straně má f význam sloupcového vektoru v C^N s komponentami číslovanými od $k = 0$. Pro elementy matice U_{DFT} platí:

$$(U_{DFT})_{kj} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{N}\right), \quad (160)^{51}$$

S ohledem na unitaritu⁵² U_{DFT} lze pro matici inverzní diskretní Fourierovy transformace psát

⁵⁰ Pro snadnější znázornění analogie s unitární transformací komplexních vektorů budu označovat funkční hodnotu f v bodě $j \in \{0; 1; \dots; N-1\}$ jako f_j a podobně funkční hodnotu $F(f)$ v bodě $k \in \{0; 1; \dots; N-1\}$ jako $(F(f))_k$.

⁵¹ V této souvislosti definují komplexní funkce diskretní proměnné $x \in \{0; 1; \dots; N-1\}$ vztahem (161), kde $N \in Z^+$ je kladné celé číslo a parametr f („frekvence“) je zpravidla racionální číslo tvaru $f = p/N$, kde $p \in \{0; 1; \dots; N-1\}$, popřípadě $f = -p/N$. V některých případech jsou dále použity i funkce tohoto typu s reálným parametrem $f \in <0; 1)$, popřípadě $-f \in (-1; 0>$.

$$\Psi_{N,f}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(2\pi i x \cdot f), \quad (161)$$

⁵² Snadno se nahlédne, že platí

$$(U_{DFT}^{-1})_{kj} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(+2\pi i \frac{jk}{N}\right), \quad (162)$$

Poznámka 10: Pro $N = 2$ odpovídá matice diskrétní Fourierova transformace matici Hadamardově transformace pro jeden qubit.

Definice 10: Kvantová Fourierova transformace (QFT) kvantového registru o n qubitech.

Bud' $|\psi\rangle \in C^{2^n}$ (normalizovaný) stav n -qubitového kvantového registru t . Pak Kvantová Fourierova transformace tohoto registru znamená působení operátoru, jehož maticové elementy odpovídají vztahu (160) pro $N = 2^n$, tedy platí:

$$\hat{U}_{QFT} |x\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} \exp\left(-2\pi i \frac{xy}{2^n}\right) |y\rangle, \quad (163)$$

Poznámka 11: Uvažujme, že platí

$$\sum_{k=0}^{N-1} (U_{DFT})_{kj} \cdot (U_{DFT})_{kl}^* = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \exp\left(-2\pi i \frac{k(j-l)}{N}\right), \quad (164)$$

pokud $j = l$, je výraz roven jedné. Pokud $j \neq l$ použijí vztah pro částečný součet mocninné posloupnosti, tj. (165) a následně fakt, že liší-li se j a l , liší se o celé číslo (jsou to celá čísla). Tedy platí (166)

$$\sum_{k=0}^{N-1} (U_{DFT})_{kj} \cdot (U_{DFT})_{kl}^* \stackrel{j \neq l}{=} \frac{1}{N} \frac{1 - \left[\exp\left(-2\pi i \frac{(j-l)}{N}\right) \right]^N}{1 - \exp\left(-2\pi i \frac{(j-l)}{N}\right)} \stackrel{j-l \in Z}{=} 0, \quad (165)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{N-1} (U_{DFT})_{kj} \cdot (U_{DFT})_{kl}^* \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-2\pi i \frac{kj}{N}\right) \right\} \cdot \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(+2\pi i \frac{kl}{N}\right) \right\} = \delta_{jl}, \end{aligned} \quad (166)$$

$$|\psi\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} f_x |x\rangle_t, \quad (167)$$

pak lze ukázat, že

$$\hat{U}_{QFT} |\psi\rangle = \sum_{y=0}^{2^n-1} (F(f))_y |y\rangle_t, \quad (168)$$

tedy: Kvantová Fourierova transformace znamená diskrétní Fourierovu transformaci vektoru rozvojových koeficientů do výpočetní báze.

Poznámka 12: Součinnový tvar QFT

Jedno z možných vyjádření lineární transformace (163) je tzv. „součinnový tvar“ (175), kdy je výsledek působení unitárního operátoru \hat{U}_{QFT} na bázový vektor $|j\rangle = |j_1, j_2, \dots, j_n\rangle = |j_n\rangle \otimes |j_{n-1}\rangle \otimes \dots \otimes |j_1\rangle$ zapsán ve tvaru direktního součinu stavů n -qubitového registru (Kvantová fourierova transformace není produktové hradlo (vyjádřitelná jako direktní součin k -qubitových hradel pro (obecně) různá $k \leq n$), ale její působení na vektory kanonické báze vede k produktovým, nikoli entanglovaným stavům registru na který působí).

Součinnový tvar se snadno odvodí postupem níže – bázové vektory kanonické báze n -qubitového registru mají tvar (169), působení operátoru *inverzní* kvantové fourierovy transformace \hat{U}_{QFT}^{-1} pak lze psát ve tvaru (170), kde číslo k má binární rozvoj (171) a sumace s označením $k_l \in \{0;1\}^n$ znamená součet přes všechny možné uspořádané n -tice čísel (k_1, k_2, \dots, k_n) z množiny $\{0;1\}$.

$$|j\rangle \equiv |j_1, j_2, \dots, j_n\rangle \equiv |j_1\rangle \otimes |j_2\rangle \otimes \dots \otimes |j_n\rangle = \otimes_{l=1}^n |j_l\rangle \rightarrow \hat{U}_{QFT}^{-1} |j\rangle, \quad (169)$$

$$\hat{U}_{QFT}^{-1} |j\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=0}^{2^n-1} \exp\left(2\pi i \frac{jk}{2^n}\right) |k\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k_l \in \{0;1\}^n} \exp\left(2\pi i j \sum_{l=1}^n k_l 2^{-l}\right) |k\rangle, \quad (170)$$

$$k = \sum_{l=1}^n k_l 2^{n-l} = k_1 k_2 \dots k_n, \quad (171)$$

Sumand v (170) – tedy komplexní číselný prefaktor i vektor kanonické báze lze rozdělit na součin (v případě vektoru direktní) členů pro různá l (označující řád v binárním rozvoji (171)), to vede na vztah (172), který po dosazení do (170) a dosazení obou variant ($k_l = 0$ i $k_l = 1$) ve všech součinitelích má tvar (173). Dále uvážím, že pro hodnotu výrazu $\exp(2\pi i P)$ je podstatná jen zlomková část P (tedy „ P minus celá část P “) a že platí (174), odtud již přímo plyne vztah (175).

$$\exp\left(2\pi i j \sum_{l=1}^n k_l 2^{-l}\right) |k\rangle = \otimes_{l=1}^n \exp(2\pi i j k_l 2^{-l}) |k_l\rangle, \quad (172)$$

$$\hat{U}_{QFT}^{-1} |j\rangle = \otimes_{l=1}^n (|0\rangle + \exp(2\pi i j \cdot 2^{-l}) |1\rangle), \quad (173)$$

$$\begin{aligned} j \cdot 2^{-1} &= j_1 j_2 \dots j_{n-2} j_{n-1} \cdot j_n \\ j \cdot 2^{-2} &= j_1 j_2 \dots j_{n-2} \cdot j_{n-1} j_n \\ &\vdots \\ j \cdot 2^{-k} &= j_1 j_2 \dots j_{n-k} \cdot j_{n-k+1} \dots j_{n-1} j_n \\ &\vdots \\ j \cdot 2^{-n} &= 0 \cdot j_1 j_2 \dots j_{n-2} j_{n-1} j_n \end{aligned} \quad (174)$$

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, \dots, j_n\rangle &\rightarrow 2^{-n/2} (|0\rangle + \exp(2\pi i 0 \cdot j_n) |1\rangle) \otimes (|0\rangle + \exp(2\pi i 0 \cdot j_{n-1} j_n) |1\rangle) \otimes \dots \\ &\otimes (|0\rangle + \exp(2\pi i 0 \cdot j_1 j_2 \dots j_n) |1\rangle) \end{aligned} \quad (175)$$

Poznámka 13: Kvantový algoritmus implementující QFT a jeho realizace pomocí jazyka QCL. Kvantový logický obvod odpovídající QFT.

Ze součinnového tvaru QFT (175) se snadno odvodí potřebná sekvence 1- a 2-qubitových hradel jednoduchého tvaru (tj. Hadamardovo 1-qubitové hradlo, kontrolované rotace okolo osy z a SWAP operátor). Je zřejmé, že při konstrukci této sekvence (resp. jejího vyjádření v podobě kvantového logického okruhu) je třeba nejprve „začít odzadu“ (a pak sérií ne více jak $n/2$ SWAP operací prohodit pořadí

qubitů), tj. od posledního qubitu napravo (175), který se tak vytváří aplikací hradel na vstupní qubit $|j_1\rangle$. Ten se nejprve uvede do superpozice pomocí Hadamardova hradla, (uvážíme-li, že platí (61), je dílčí transformace (176)).

$$|j_1, j_2, \dots, j_n\rangle \rightarrow \hat{H}_{[1]}|j_1, j_2, \dots, j_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_1)|1\rangle)|j_2, j_3, \dots, j_n\rangle, \quad (176)$$

Nyní zavedu hradlo \hat{R}_k ($\forall k \in \{2, 3, \dots, n\}$) vztahem

$$\hat{R}_k \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(2\pi i / 2^k) \end{pmatrix} = \hat{R}_z(\omega_k) = \hat{R}_z(\pi \cdot 2^{-k+1}). \quad (177)$$

Tato unitární transformace odpovídá rotaci o $2\pi \cdot 2^{-k}$ radiánů okolo osy z (na Blochově sféře) v kladném smyslu. Aplikace kontrolovaných \hat{R}_k pro $k = 2, 3, \dots, n$ na stav (176) (kontrolní registry jsou 1-qubitové a to po řadě 2., 3. až n -tý qubit n -qubitového registru na který uvažujeme aplikaci QFT).

$$\hat{H}_{[1]} \hat{R}_{2,[1,2]} \hat{R}_{3,[1,3]} \dots \hat{R}_{n-1,[1,n-1]} \hat{R}_{n,[1,n]} |j_1, j_2, \dots, j_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_1 j_2 \dots j_n)|1\rangle)|j_2, \dots, j_n\rangle, \quad (178)$$

Podobným způsobem na místě 2.qubitu vytvořím superpozici $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_2 \dots j_n)|1\rangle)$ (Pro odvození na levé straně (178) pouze změním cílové registry z „1“ na „2“ a kontrolní registry posunu o jednotku k vyšším hodnotám), neboli

$$\hat{H}_{[2]} \hat{R}_{2,[2,3]} \hat{R}_{3,[2,4]} \dots \hat{R}_{n-2,[2,n-1]} \hat{R}_{n-1,[2,n]} |X, j_2, j_3, \dots, j_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |X\rangle \otimes (|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_2 j_3 \dots j_n)|1\rangle)|j_3, \dots, j_n\rangle, \quad (179)$$

kde X zastupuje libovolný stav 1.qubitu včetně superpozic (stavů kanonické báze). Na místě k -tého ($k < n$)⁵³ qubitu pak vytvořím superpozici $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_k j_{k+1} \dots j_n)|1\rangle)$ pomocí posloupnosti hradel

$$\hat{H}_{[k]} \hat{R}_{2,[k,k+1]} \hat{R}_{3,[k,k+2]} \dots \hat{R}_{n-k,[k,n-1]} \hat{R}_{n-k+1,[k,n]} |\vec{X}, j_k, j_{k+1}, \dots, j_n\rangle = \frac{1}{2^{1/2}} |\vec{X}\rangle \otimes (|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_k j_{k+1} \dots j_n)|1\rangle) |j_{k+1}, \dots, j_n\rangle, \quad (180)$$

\vec{X} zastupuje libovolný produktový stav prvních $k-1$ qubitů. Zajímavé pozorování je, že operace vykonávané na k -tém qubitu nezávisí na operacích ani hodnotách předchozích qubitů (naopak ale ano). Na n -tý qubit se aplikuje pouze Hadamardovo hradlo pro vytvoření superpozice $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_n)|1\rangle)$, tedy

$$\hat{H}_{[n]} |\vec{X}, j_n\rangle = \frac{1}{2^{1/2}} |\vec{X}\rangle \otimes (|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_n)|1\rangle), \quad (181)$$

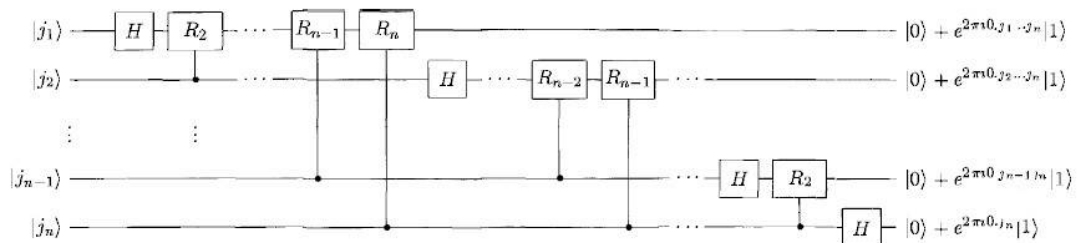
kde \vec{X} zastupuje libovolný produktový stav prvních $n-1$ qubitů. Výsledkem popsané posloupnosti hradel tedy je

$$\prod_{k=1}^n \hat{H}_{[k]} \hat{R}_{2,[k,k+1]} \hat{R}_{3,[k,k+2]} \dots \hat{R}_{n-k,[k,n-1]} \hat{R}_{n-k+1,[k,n]} |j_1, j_2, \dots, j_n\rangle = 2^{-n/2} (|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_1 j_2 \dots j_n)|1\rangle) \otimes (|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_2 \dots j_n)|1\rangle) \otimes \dots \otimes (|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_{n-1} j_n)|1\rangle) \otimes (|0\rangle + \exp(2\pi i \cdot 0 \cdot j_n)|1\rangle) \quad (182)$$

K vytvoření požadovaného stavu (175) je nyní zapotřebí ještě invertovat pořadí qubitů v celém registru. To lze nejsnáze realizovat posloupností (komutujících) SWAP operací na registry $[1, n]$, $[2, n-1]$, ... je-li n sudé, končí tato posloupnost $[n/2, n/2+1]$, je-li n liché, končí $[(n-1)/2, (n+3)/2]$ ponechávajíc střed n -qubitového registru (tj. qubit pořadového čísla $(n+1)/2$) na místě (bez aplikace

⁵³ Ve všech vztazích platí, že je-li index kontrolního registru větší než n , nebo dolní index k u operátoru \hat{R}_k menší než 2.

SWAP hradla). Celkový počet hradel tedy nepřekračuje⁵⁴ $n(n+2)/2$, odtud vyplývá časová složitost QFT rovna $\Theta(n^2)$. Pro porovnání – provedení Rychlé fourierovy transformace 2^n -složkového komplexního vektoru na klasickém počítači je potřeba $\Theta(n \cdot 2^n)$ hradel. Tím kvantový algoritmus poskytuje exponenciální urychlení (za cenu nemožnosti dosáhnout v jediném měření zjištění všech komplexních amplitud přímo – to však v řadě aplikací diskrétní fourierovy transformace není zapotřebí, jak bude ukázáno v kapitole o diagonalizačním algoritmu)



Obr. 13: Kvantový logický obvod reprezentující \hat{U}_{QFT}^{-1} až na inverzi pořadí qubitů registru na konci algoritmu. Ilustrace převzata z [14]

Odpovídající QCL kód⁵⁵ pak má tvar

```
operator invqft(quireg q) {
    const n=#q;           // n = velikost q-registru
    int i; int j;         // iterační indexy
    for i=0 to n-1 {     // přes všechny qubity "i"56
        Mix(q[i]);       // Hadamard
        for j=i+1 to n-1 {
            CPhase(2*pi/2^(i-j+1), q[i]&q[j]);
        }
    }
}
```

⁵⁴ Uvážíme-li, že 1-qubitová hradla jsou „levná“, popř. máme k dispozici libovolné 1-qubitové hradlo a CNOT pro doplnění na univerzální množinu hradel (1 SWAP lze získat složením 3 CNOTů), pak opět vychází asymptotická složitost $\Theta(n^2)$. Výraz u lineárního členu v neasymptotické složitosti se může podle způsobu výpočtu časové složitosti/náročnosti lišit, ale asymptotická složitost je nezávisle na něm $\Theta(n^2)$.

⁵⁵ Struktura programu byla převzata z [8], ale obsah kódu byl pozměněn tak, aby odpovídal algoritmu z [14].

⁵⁶ Qubity jsou číslovány od 0.

```

    } // CPhase(phi,creq) je "podmíněný
fázový posun" a tedy aplikuje Rz(phi) na jeden z qubitů
creq, jsou-li všechny (ostatní) qubity creq |1>57

}
flip(q); // Operátor prohazující pořadí
qubitů
}

```

Poznámka 14: Kvantová Fourierova transformace využívající méně qubitů – (inverzní) mQFT

Motivace: Je-li to možné, je výhodné řadu „jednoduchých“ početních operací vykonávat pomocí klasické části počítače a redukovat nezbytný počet qubitů účastnících se výpočtů kvantového jádra (s ohledem na „nákladnost“ kvantových zdrojů je tento přístup pochopitelný). V následujícím bude uvedeno schéma umožňující redukovat počet qubitů nezbytných pro provedení kvantové fourierovy transformace až na jeden jediný.

⁵⁷ Neboli: $CPhase(\phi,[c])$ je operátor $\hat{V}_{[c]}(\phi)$ splňující

$$\hat{V}_{[c]}(\phi)|11\dots 1\rangle_c = e^{i\phi}|11\dots 1\rangle_c, \quad (183)$$

$$\hat{V}_{[c]}(\phi)|\psi\rangle_c = |\psi\rangle_c. \quad (184)$$

kde c je kontrolní kvantový registr, $|11\dots 1\rangle_c$ je jeho stav odpovídající direktnímu součinu vektorů $|1\rangle$ pro všechny qubity registru a $|\psi\rangle_c$ je libovolný stav ortogonální k $|11\dots 1\rangle_c$. Formulace operátoru $\hat{V}_{[c]}(\phi)$ ukazuje, že tento má 0-qubitový cílový registr a přesto ovlivňuje tvar vlnové funkce – fázový posun, který vytváří je totiž podmíněn stavem kontrolního registru c , jehož stav může být entanglován s ostatními qubity kvantového jádra kvantového počítače. $CPhase(\phi,[a\&b])$ (kde a, b jsou 1-qubitové registry a $a\&b$ je jejich spojení) je tak ekvivalentní jak operátoru $\hat{R}_{z,[a,b]}(\phi)$ (tj. rotaci qubitového registru a podmíněné stavem registru b okolo osy z), tak operátoru $\hat{R}_{z,[b,a]}(\phi)$, kde jsou role cílového a kontrolního registru prohozeny.

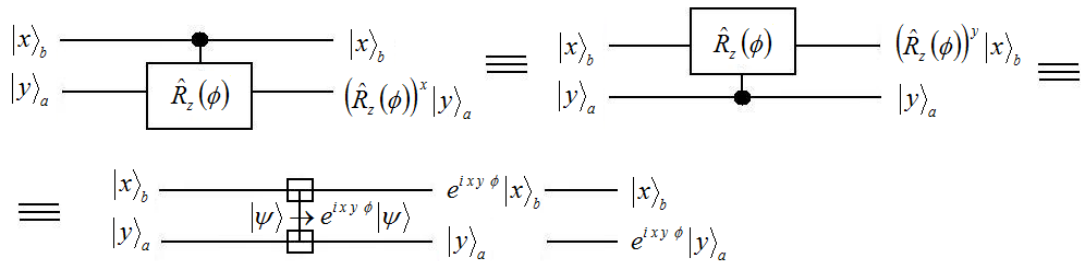
Jak bylo uvedeno v předchozí poznámce 13, respektive v poznámce pod čarou 57 výše, lze v případě podmíněných rotací $\hat{R}_{z,[a,b]}(\phi)$ okolo osy z o libovolný úhel ϕ volně zaměnit qubit cílového registru a za libovolný qubit kontrolního registru b , nebo celou operaci ekvivalentně považovat za podmíněný fázový posun $\hat{V}_{[a\&b]}(\phi)$ s kontrolním registrem ve tvaru sjednocení registrů a a b . Buďte a i b 1-qubitové registry, pak platí:

$$\hat{R}_{z,[a,b]}(\phi) = \hat{V}_{[a\&b]}(\phi) = \hat{R}_{z,[b,a]}(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(i\phi) \end{pmatrix}, \quad (185)$$

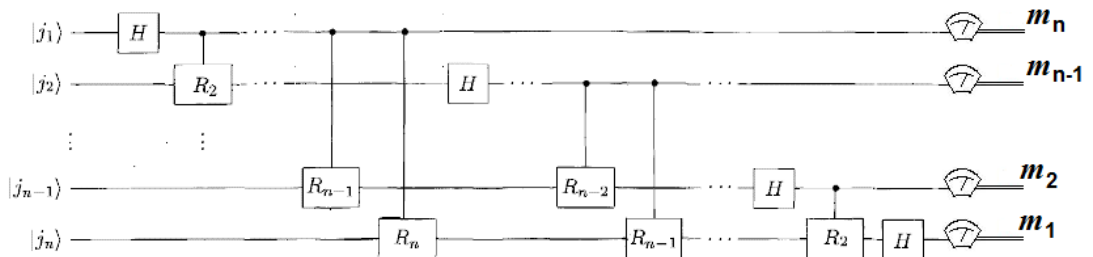
tedy speciálně pro operátory $\hat{R}_{k,[a,b]}$ z poznámky 13:

$$\hat{R}_{k,[a,b]} = \hat{R}_{k,[b,a]}. \quad (186)$$

Vztahy (185), respektive (186) umožňují schéma na obr. 13 efektivně nahradit schématem z obr. 15, na obr. 14 je pak ukázána ekvivalence hradel (185)-(186).



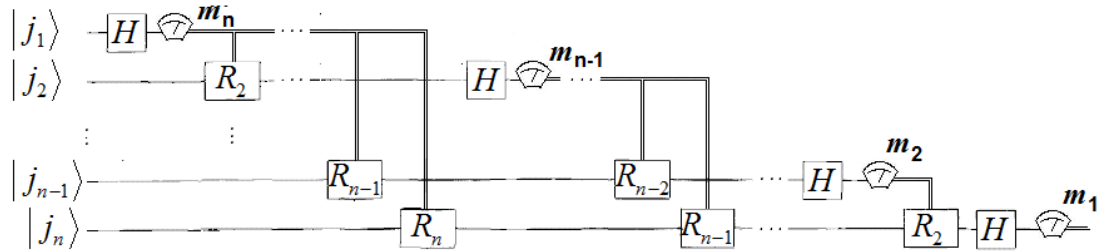
Obr. 14: Ekvivalence hradel (185), různá alternativní označení v rámci kvantových logických obvodů.



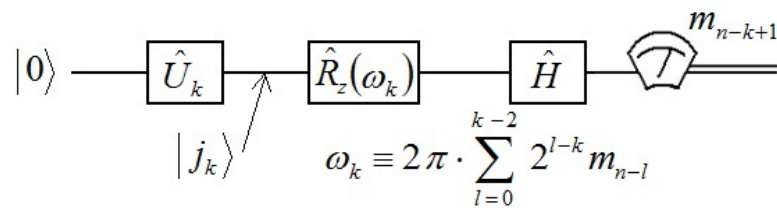
Obr. 15: Soubor jednoduchých 1- a 2-qubitových hradel k provedení kvantové fourierovy transformace. Ekvivalentní náhrada schématu z obr. 13 podle vztahu

(186), namísto SWAP operací je zařazeno měření s interpretací výsledků měření v obráceném pořadí.

Článek zabývající se „semiklasickou“ QFT je založen na stejné úvaze s tím, že dále využívá ekvivalentní náhrady části kvantového „vodiče“ kontrolujícího rotace jiných qubitů za operaci měření zařazenou ihned za Hadamardovo hradlo a kontrolu hradel klasickými signály – viz obr. 16, což naznačuje možnost provedení celé kvantové fourierovy transformace za pomoci jediného qubitu, jsou-li vstupní stavy qubitů $|j_1\rangle, |j_2\rangle, \dots, |j_{n-1}\rangle, |j_n\rangle$ připravené nezávisle na sobě právě na místě zmiňovaného jediného qubitu (uvažujme, že transformaci $|0\rangle \rightarrow |j_k\rangle$ provádí „orákulum“ \hat{U}_k) – viz obr. 17.



Obr. 16: Upravené schéma inverzní⁵⁸ kvantové fourierovy transformace spojené s měřením výsledného stavu (výsledek měření je $m_1 m_2 \dots m_n$, tedy $m = 2^{n-1} m_1 + 2^{n-2} m_2 + \dots + 2^0 m_n$).



Obr. 17: Schéma inverzní kvantové fourierovy transformace spojené s následným měřením stavu n -qubitového registru využívající jediný qubit a informaci z předcházejících $k-1$ měření k výpočtu úhlu ω_k o který se provádí rotace okolo osy z . Platí $k \in \{1, 2, \dots, n-1, n\}$, $\omega_k = \omega_k(m_n, m_{n-1}, \dots, m_{n-k+2})$.

⁵⁸ Dopředné kvantové fourierově transformaci odpovídá vztah pro ω_k s opačným zmanénkem.

1.3.2.3 Diagonalizační algoritmus

1.3.2.3.1 Algoritmus Phase Estimation

Algoritmy používané pro diagonalizaci matic jsou založeny na různých variantách algoritmu označovaném jako „Algoritmus odhadu fáze“ (*Phase Estimation Algorithm, PEA*).

Jeho úlohou je pro zadanou unitární matici U (realizovanou operátorem („oracle“) působícím přímo na prostor n -qubitového registru t) a její zadaný vlastní vektor $|\psi\rangle \in C^{2^n}$ nalézt (racionální) odhad „fáze“ $f \in \langle 0; 1 \rangle$ vlastního čísla $\lambda = \exp(2\pi i f)$. Jak bude dále ukázáno, použitým algoritmům postačuje na vstupu odhad vlastního vektoru pro hledané vlastní číslo $|\psi_0\rangle$ alespoň tak dobrý, aby

platilo $|\langle \psi | \psi_0 \rangle|^2 \geq \frac{1}{2} \cdot \frac{\pi^2}{8} \approx 0.62$. Popisované algoritmy jsou

pravděpodobnostní a tak „správný výsledek“ (nejpřesnější racionální aproximaci fáze pro daný počet binárních cifer) neposkytují s jistotou, ale s určitou hodnotou pravděpodobnosti (větší než $1/2$ za podmínky výše). Zpřesnění výsledku pak lze dosáhnout opakováním algoritmu. Jedna z možných alternativ diagonalizačního algoritmu navíc ponechává kvantové jádro ve stavu odpovídajícím poněkud zpřesněnému odhadu vlastního vektoru $|\psi\rangle$ (ale za cenu udržení koherence v systému po celou dobu výpočtu). Druhá alternativa naopak umožňuje pracovat v každé elementární iteraci se znovu připraveným odhadem $|\psi_0\rangle$ a tak je vhodná i pro případ malých dekoherenčních časů (za cenu nezpřesnění odhadu vlastního vektoru). Odhad vlastního vektoru přímo vyextrahovat z kvantového počítače nelze (tak jako nikdy nelze jediným měřením systému ve stavu $|\psi\rangle \in C^{2^n}$ zjistit všech 2^n komplexních amplitud), ale existuje celá řada prací zabývajících se dalším zpracováním tohoto stavu ke získání informací užitečných v kvantové chemii i jinde.

Užitečnost algoritmů „odhadu fáze“ pro kvantovou chemii vylývá z faktu, že pro časově explicitně nezávislý hamiltonián (studovaného kvantově-chemického

systemu) \hat{H} tento hamiltonián komutuje s evolučním operátorem⁵⁹ \hat{U} pro libovolnou dvojici časů t_0 a t (187), respektive libovolný rozdíl Δt (188) mezi nimi. Ze tvaru (187) je dokonce patrné (evoluční operátor je až na konstantní faktor $\Delta t/\hbar$ dán imaginární exponenciálou z hamiltoniánu), že platí: vektor $|\psi\rangle$ je vlastním vektorem \hat{H} právě když je vlastním vektorem \hat{U} a navíc platí, že všechna vlastní čísla operátoru \hat{U} (k -té z nich označím jako λ_k) lze vyjádřit ve tvaru (189), kde E_k je odpovídající vlastní číslo operátoru \hat{H} .

$$\hat{U} = \exp\left(-i \frac{\hat{H} \cdot (t - t_0)}{\hbar}\right), \quad (187)$$

$$\Delta t \equiv t - t_0, \quad (188)$$

$$\lambda_k = \exp\left(-i \frac{E_k \Delta t}{\hbar}\right), \quad (189)$$

V kvantové chemii na klasických počítačích je diagonalizován přímo hamiltonián \hat{H} , protože je jednak zpravidla jednodušší jej zkonstruovat (ať už explicitně, nebo jeho akci na daný vektor) a navíc klasické algoritmy pro diagonalizaci hermitovské/symetrické matice jsou srovnatelně dobře, ne-li lépe propracovány nežli klasické algoritmy pro diagonalizaci unitární matice. V kvantové

⁵⁹ Evoluční operátor je unitární operátorová funkce dvou reálných proměnných (časů) $-t_0$ a t , té vlastnosti (190), (191), že aplikujeme-li ji na stavový vektor (z hilbertova prostoru H) daného systému v čase t_0 , bude výsledkem stavový vektor daného systému v čase t (192). Popisuje tedy vývoj („evolution“) stavového vektoru v čase. Analogicky jej lze aplikovat na popis vývoje operátoru hustoty ρ v čase, kdy platí rovnice (193)

$$\hat{U} : R^2 \rightarrow H \otimes H, \quad (190)$$

$$\hat{U} : (t_0, t) \mapsto \hat{U}(t_0, t), \quad (191)$$

$$\hat{U}(t_0, t)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle, \quad (192)$$

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t_0, t)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t_0, t). \quad (193)$$

chemii na kvantových počítačích však potřebujeme na Hilbertově prostoru kvantového jádra počítače pracovat pomocí unitárních hradel a tak jako jedno z nich v algoritmu použijeme právě vhodnou aproximaci (v konečné bázi a pro daný model hamiltoniánu) evolučního operátoru (187) studovaného systému (pro jednoduchost v jeho zápise opět použijeme atomové jednotky, kde $\hbar = 1$ (194))

$$\hat{U} = \exp(-i \hat{H} \Delta t), \quad (194)^{60}$$

Volba časového intervalu je na nás a tedy je rozumné jej zvolit tak, aby možné hodnoty „fáze“ $f \in \langle 0; 1 \rangle$ odpovídaly celému intervalu energií ve kterém očekáváme, že bude nalezena energie hledaného stavu.

Lze snadno ukázat, že tomu odpovídá buďto volba V1, kde Δt navrhuji ve tvaru (195) a úpravu hamiltoniánu ve tvaru⁶¹ (196), respektive tomu odpovídající úprava operátoru \hat{U} ve tvaru (198). Pak platí mezi fází f a hledaným odhadem vlastního čísla E vztah (199).

$$\Delta t_{V1} = - \frac{2\pi}{E_{\max} - E_{\min}}, \quad (195)$$

$$\hat{H}'_{V1} = \hat{H} - E_{\min} \cdot \hat{I}, \quad (196)$$

⁶⁰ Alternativně je možné vycházet z operátoru hermitovskly sduženého k \hat{U} (194) tj. z operátoru

$$\hat{U}^+ = \exp(i \hat{H} \Delta t), \quad (197)$$

pouze je potřeba poté použít v algoritmech PEA (resp. IPEA) dopřednou kvantovou fourierovou transformaci namísto inverzní kvantové fourierovy transformace (resp. mQFT namísto inverzní mQFT). Dopředná mQFT má ve vztazích pro ω_k opačné znaménko než je uvedeno ve vztazích (246)-(252) a vztahu z obr. 16.

⁶¹ Kde \hat{I} je operátor identity působící na hilbertově prostoru H ve kterém hledáme vlastní vektor operátoru \hat{H} .

$$\hat{U}'_{V1} = \exp(i E_{\min} \Delta t) \hat{U}, \quad (198)$$

$$E_{V1} = E_{\min} + f(E_{\max} - E_{\min}). \quad (199)$$

Alternativní volbě V2 odpovídá Δt ve tvaru (200), tedy předúprava operátoru \hat{U} ve tvaru (201). Pak platí vztah mezi fází f a hledaným odhadem vlastního čísla E vztah (202).

$$\Delta t_{V2} = \frac{2\pi}{E_{\max} - E_{\min}}, \quad (200)$$

$$\hat{U}'_{V2} = \exp(i E_{\max} \Delta t) \hat{U}, \quad (201)$$

$$E_{V2} = E_{\max} - f(E_{\max} - E_{\min}). \quad (202)$$

Algoritmus PEA I:

Jak-koli bude v práci provedených simulacích použita výhradně iterativní verze PEA (IPEA) (respektive její různé varianty), uvádím níže schéma její neiterativní verze, neboť přibližuje ideu algoritmu PEA a je na ni lépe patrná souvislost s QFT.

1) Příprava stavu

1.1) Resetování stavu kvantového jádra

$$\text{Reset: } |\psi\rangle = |00\dots 0\rangle, \quad (203)$$

1.2) Alokace kvantových registrů a , b a c :

kvantový registr a (m qubitů) ... určený k extrakci informace o hledaném vlastním čísle matice U . Chyba v určení „fáze“ f parametrizující vlastní číslo klesá jako $O(2^{-m})$

kvantový registr b (l qubitů) ... slouží k uložení informace o diagonalizované unitární matici (rozměru ne většího ⁶² než 2^l), respektive působení jejích mocnin na vektor z prostoru C^{2^l} (2^l rozměrný Hilbertův prostor)

kvantový registr c (w qubitů)⁶³ ... pomocný registr pro QFT a další dílčí operace

qureg a[m]; qureg b[1]; qureg c[w];

$$|\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes |0\rangle_b, \quad (204)$$

- 1.3) Příprava počátečního odhadu vlastního vektoru \hat{U} odpovídajícího hledanému vlastnímu číslu ($|\psi_0\rangle$) v kvantovém registru b

operator U0 (qureg b0) {...};⁶⁴

U0 (b) ;

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{U}_0[b]|\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes \hat{U}_0|0\rangle_b, \quad (205)$$

$$|\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes |\psi_0\rangle_b, \quad (206)$$

- 1.4) Vytvoření „vyváženě“ (a se stejnou fází) superpozice v kvantovém registru a pomocí aplikace Hamadarova hradla na každý qubit registru a

$$\mathbf{Mix}(\mathbf{a}) ;: |\psi\rangle \rightarrow \otimes_{j=1}^m \hat{H}_{a[j]} |\psi\rangle, \quad (207)$$

⁶² Algoritmus diagonalizuje pouze operátory působící na qubitových registrech, tedy unitární matice rozměru 2^l pro nějaké l . Je-li však úlohou diagonalizovat unitární matici, jejíž rozměr nelze vyjádřit jako mocninu 2, pak je možné matici doplnit direktním součtem s jednotkovou maticí příslušného rozměru tak, aby výsledná matice měla původní matici za submatici, její rozměr již byl vyjádřitelný jako 2^l a byla ve třídě takovýchto matic s nejmenším možným rozměrem (tj. 2^l , kde $l = \lceil \log_2(p) \rceil$)

⁶³ V zápisech stavového vektoru registr c neuvádím, protože se s ním manipuluje nanejvýš uvnitř rutin, které zde zastupuje jediný symbol, nebo řádka kódu QCL.

⁶⁴ Odhad vlastního vektoru \hat{U} odpovídajícího hledanému vlastnímu číslu ($|\psi_0\rangle$) obvykle odpovídá projekci na hilbertův podprostor C^{2^l} nízké dimenze generovaný částí kanonické báze C^{2^l} a lze jej tak získat z vektoru $|00\dots 0\rangle_b$ pomocí nevelkého počtu 1- a 2-qubitových hradel (CNOT a podmíněné rotace okolo osy z , nejčastěji).

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^m}} \left(\sum_{x=0}^{2^m-1} |x\rangle_a \right) \otimes |\psi_0\rangle_b, \quad (208)$$

2) Podmíněná aplikace mocnin \hat{U}

for z=0 to m-1 {U(z) (b, a[z+1])};

kde $\mathbf{U}(\mathbf{z})(\mathbf{b}, \mathbf{y})$ provede podmíněnou aplikaci operátoru \hat{U}^{2^z} (tj. 2^z -té mocniny operátoru \hat{U}) na kvantový registr y ($a[k]$ je k -tý qubit registru a ,

vícequbitové stavy registru a mají index $a = \sum_{k=1}^m j_k 2^{k-1}$, kde j_k je index k -

tého qubitů). Tedy transformaci: $|y\rangle_{a[k]} \otimes |\phi\rangle_b \rightarrow |y\rangle_{a[k]} \otimes \hat{U}^{y \cdot 2^{k-1}} |\phi\rangle_a$.

Výsledkem for-cyklu je pak stav

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^m}} \sum_{x=0}^{2^m-1} |x\rangle_a \otimes \hat{U}^x |\psi_0\rangle_b, \quad (209)$$

3) QFT na m -qubitový registr b

Kvantová Fourierova transformace provedená na registr a

$$\mathbf{qft}(a); \quad |\psi\rangle \rightarrow \hat{U}_{QFT,a} |\psi\rangle, \quad (210)$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^m}} \sum_{x=0}^{2^m-1} \hat{U}_{QFT} |x\rangle_a \otimes \hat{U}^x |\psi_0\rangle_b, \quad (211)$$

Po rozepsání akce operátoru \hat{U}_{QFT} :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^m} \sum_{x=0}^{2^m-1} \sum_{y=0}^{2^m-1} \exp\left(-2\pi i \frac{x \cdot y}{2^m}\right) |y\rangle_a \otimes \hat{U}^x |\psi_0\rangle_b, \quad (212)$$

4) Měření (ve výpočetní bázi) na m -qubitovém registru a

$$\mathbf{Meas}(a, p); \quad |\psi\rangle \rightarrow |p\rangle_a \otimes |\psi_1\rangle_b, \quad (213)$$

(Racionální) aproximace fáze je nyní dána vztahem (214) a stav registru b odpovídá zpřesněnému odhadu vlastního vektoru operátoru \hat{U} odpovídajícího hledanému vlastnímu číslu.

$$\tilde{f}_{0,ap}(p) = \frac{p}{2^m} = \sum_{k=1}^m j_k \cdot 2^{k-m-1} = 0 \cdot j_m j_{m-1} j_{m-2} \dots j_2 j_1, \quad (214)$$

Abychom nahlédli proč (a za jakých podmínek) může algoritmus fungovat uvážíme rozvoj odhadu vlastního vektoru $|\psi_0\rangle \in C^{2^l}$ operátoru $\hat{U} \in C^{2^l} \otimes C^{2^l}$ do báze (přesných) vlastních vektorů tohoto operátoru (215). Rozvojové koeficienty označím $c_k \equiv \langle \phi_k | \psi_0 \rangle$, kde $|\phi_k\rangle$ je k -tý vlastní vektor operátoru \hat{U} (spektrální rozvoj a rovnice pro vlastní čísla viz (216), respektive (217)⁶⁵).

$$|\psi_0\rangle = \sum_{k=0}^{2^l-1} c_k |\phi_k\rangle, \quad (215)$$

$$\hat{U} = \sum_{k=0}^{2^l-1} \exp(2\pi i \tilde{f}_k) |\phi_k\rangle \langle \phi_k|, \quad (216)$$

$$\hat{U} |\phi_k\rangle = \exp(2\pi i \tilde{f}_k) |\phi_k\rangle, \quad (217)$$

Po dosazení (215) do (212) lze psát

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^m} \sum_{x=0}^{2^m-1} \sum_{y=0}^{2^m-1} \exp\left(-2\pi i \frac{x \cdot y}{2^m}\right) |y\rangle_a \otimes \hat{U}^x \left(\sum_{k=0}^{2^l-1} c_k |\phi_k\rangle_b \right), \quad (218)$$

nyní využijeme linearitu operátoru \hat{U} (219) a znalosti rovnice pro jeho vlastní čísla ve vhodné parametrizaci (217), což vede na vztah (220),

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^m} \sum_{x=0}^{2^m-1} \sum_{y=0}^{2^m-1} \exp\left(-2\pi i \frac{x \cdot y}{2^m}\right) |y\rangle_a \otimes \left(\sum_{k=0}^{2^l-1} c_k \hat{U}^x |\phi_k\rangle_b \right), \quad (219)$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^m} \sum_{x=0}^{2^m-1} \sum_{y=0}^{2^m-1} \exp\left(-2\pi i \frac{x \cdot y}{2^m}\right) |y\rangle_a \otimes \left(\sum_{k=0}^{2^l-1} c_k \exp(2\pi i x \cdot \tilde{f}_k) |\phi_k\rangle_b \right). \quad (220)$$

⁶⁵ Fáze byly opatřeny vlnovkami, aby byly odlišeny různé hodnoty fází odpovídajících různým vlastním číslům \hat{U} od různých cifer binárního rozvoje hledané fáze \tilde{f}_0 .

Vztah (220) ukazuje následující:

Zatímco *krok 1.4* zajistil *superpozici* v registru a ,

krok 2 vytvořil v registru b pro každé k superpozici stavů s komplexními amplitudami odpovídajícími různým (dle různých hodnot indexu x) diskretním funkčním hodnotám imaginární exponenciály⁶⁶ $\Psi_{2^m, \tilde{f}_k}(x)$ s frekvencí \tilde{f}_k , v tomto kroku jsou registry a a b *entanglované*.

Krok 3 pak provádí fourierovu analýzu funkce $\Psi_{2^m, \tilde{f}_k}(x)$, tj. diskretní fourierovou transformací této funkce. Nemělo by nás mást, že tato analýza je prováděna operátorem působícím na registru a , protože díky entanglementu oba registry sdílí informaci obsaženou v komplexních amplitudách (a operátor \hat{U}_{QFT} provádí diskretní fourierovu transformaci na komplexní amplitudy stavového vektoru, jak bylo ukázáno v (...)). Díky sčítání přes index x (211), (212), (218)-(220) pak dojde k *destruktivní interferenci* u většiny komplexních amplitud (vzhledem k indexování podle obsahu registru a) a pouze u ne více jak dvou komplexních amplitud odpovídajících dobře hodnotě hledané fáze se uchová dostatečně vysoká hodnota. Tento fakt vyplývá ze vztahu diskretní fourierovy transformace k funkcím typu (221), jejíž funkční hodnoty vytvořil *krok 2*.

Úpravou vztahu (220) tedy obdržíme

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^m} \sum_{x=0}^{2^m-1} \sum_{y=0}^{2^m-1} \exp\left(-2\pi i \frac{x \cdot y}{2^m}\right) |y\rangle_a \otimes \left(\sum_{k=0}^{2^l-1} c_k \exp(2\pi i x \cdot \tilde{f}_k) |\phi_k\rangle_b \right), \quad (222)$$

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{2^l-1} c_k \sum_{y=0}^{2^m-1} \left(\frac{1}{2^m} \sum_{x=0}^{2^m-1} \exp\left(2\pi i x \cdot \left(\tilde{f}_k - \frac{y}{2^m}\right)\right) \right) |y\rangle_a \otimes |\phi_k\rangle_b, \quad (223)$$

uvažujme, že námi hledaným vlastním číslem je to, které odpovídá indexu $k = 0$ a podle toho byl připraven i vstupní vektor (tedy c_0 velikostí převažuje⁶⁷). Pak lze

⁶⁶ Tedy hodnotám zobrazení: $x \mapsto \Psi_{2^m, \tilde{f}_k}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2^m}} \exp(2\pi i x \cdot \tilde{f}_k)$,

(221) definovaného na množině $x \in \{0; 1; \dots; 2^m - 1\}$.

⁶⁷ Přesněji řečeno splňuje $c_0 \geq 0.62$.

ukázat, že je-li \tilde{f}_0 přímo racionální tvaru $0.f_m f_{m-1} \dots f_2 f_1$, pak existuje y_S dané vztahem

$$y_S = \sum_{k=1}^m f_k 2^{k-1}, \quad (224)$$

tak, že

$$\frac{1}{2^m} \sum_{x=0}^{2^m-1} \exp\left(2\pi i x \cdot \left(\tilde{f}_0 - \frac{y}{2^m}\right)\right) = 1 \quad \Leftrightarrow \quad y = y_S, \quad (225)$$

$$\frac{1}{2^m} \sum_{x=0}^{2^m-1} \exp\left(2\pi i x \cdot \left(\tilde{f}_0 - \frac{y}{2^m}\right)\right) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad y \neq y_S. \quad (226)$$

Uvedené (225)-(226) plyne ze vztahů pro exponenciální funkce (221). Není-li \tilde{f}_0 tvaru $0.f_m f_{m-1} \dots f_2 f_1$, tj. má-li $2^m \tilde{f}_0$ nenulovou zlomkovou část (dále ji budu označovat jako δ), pak zavedu číslo \bar{f}_0 (dolní m -bitová aproximace \tilde{f}_0) vztahem (228) a číslo f_0^\uparrow (horní m -bitová aproximace \tilde{f}_0) vztahem (229)

$$\tilde{f}_0 = \bar{f}_0 + \delta \cdot 2^{-m}, \quad (228)$$

$$f_0^\uparrow = \bar{f}_0 + 2^{-m}, \quad (229)$$

$$\bar{f}_0 = 0.f_m f_{m-1} \dots f_2 f_1, \quad (230)$$

Číslo δ ($0 \leq \delta < 1$) určuje součet pravděpodobností pro zjištění jedné z fází (227)-(228).

Uvažujme dále zjednodušený případ, kdy $c_0 = 1$. Pak poslední krok algoritmu – měření na m -qubitovém kvantovém registru a vede ke stanovení binárního rozvoje „ y “, který odpovídá binárnímu rozvoji odhadu fáze \tilde{f}_0 . Níže uvedu vztahy pro výpočet pravděpodobnosti pro očekávané hodnoty y odpovídající dolní i horní m -

bitové aproximaci \tilde{f}_0 . Pravděpodobnost změření hodnoty „y“ na m -qubitovém kvantovém registru a je

$$p_y \equiv \left\| \langle y |_a | \psi \rangle \right\|^2 = \frac{1}{2^{2m}} \left| \sum_{x=0}^{2^m-1} \exp \left(2\pi i x \cdot \left(\tilde{f}_0 - \frac{y}{2^m} \right) \right) \right|^2 = \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2 \left(\pi \left(2^m \tilde{f}_0 - y \right) \right)}{\sin^2 \left(\pi \left(\tilde{f}_0 - y / 2^m \right) \right)} \quad (231)$$

což speciálně pro $1 > \delta > 0$ poskytuje vztah (231) pro y odpovídající dolnímu odhadu fáze, tj. $y_\downarrow = 2^m \tilde{f}_0$ hodnotu p_\downarrow (232) a pro y odpovídající hornímu odhadu fáze, tj. $y_\uparrow = y_\downarrow + 1$ hodnotu p_\uparrow (233). Obě tyto pravděpodobnosti i jejich součet $p_m(\delta)$ jako funkce δ jsou zobrazeny v grafu 1.

$$p_\downarrow \equiv p_{y_\downarrow} = \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2 \left(\pi \left(2^m \tilde{f}_0 - y_\downarrow \right) \right)}{\sin^2 \left(\pi \left(\tilde{f}_0 - y_\downarrow / 2^m \right) \right)} = \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2 \left(\pi \delta \right)}{\sin^2 \left(\pi \delta / 2^m \right)}, \quad (232)$$

$$p_\uparrow \equiv p_{y_\uparrow} = \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2 \left(\pi \left(2^m \tilde{f}_0 - y_\uparrow \right) \right)}{\sin^2 \left(\pi \left(\tilde{f}_0 - y_\uparrow / 2^m \right) \right)} = \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2 \left(\pi (1 - \delta) \right)}{\sin^2 \left(\pi (1 - \delta) / 2^m \right)}, \quad (233)$$

Lze snadno ukázat, že $p_m(\delta)$ je zdola omezená svým minimem pro $\delta = 1/2$. A toto minimum je zdola omezené hodnotou, kterou nabývá pro $m \rightarrow \infty$, tedy

$$p_m(\delta) \equiv p_\downarrow + p_\uparrow \geq p_m(1/2) > \lim_{m \rightarrow +\infty} p_m(1/2) = \frac{8}{\pi^2}. \quad (234)$$

V obecnějším případě, kdy $|c_0|^2 \leq 1$ lze (na základě vztahu (223)) psát analogicky k (231) pro distribuci pravděpodobností měření hodnot proměnné y :

$$p_y = \sum_{k=0}^{2^l-1} |c_k|^2 \cdot \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2 \left(\pi \left(2^m \tilde{f}_k - y \right) \right)}{\sin^2 \left(\pi \left(\tilde{f}_k - y / 2^m \right) \right)}, \quad (235)$$

konkrétně pro hodnoty y_\uparrow a y_\downarrow pak

$$p_{\downarrow} \equiv p_{y_{\downarrow}} = |c_0|^2 \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2(\pi \delta)}{\sin^2(\pi \delta / 2^m)} + \sum_{k=1}^{2^l-1} |c_k|^2 \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2\left(\pi \left(2^m \tilde{f}_k - y_{\downarrow}\right)\right)}{\sin^2\left(\pi \left(\tilde{f}_k - y_{\downarrow} / 2^m\right)\right)}, \quad (236)$$

$$p_{\uparrow} \equiv p_{y_{\uparrow}} = |c_0|^2 \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2(\pi(1-\delta))}{\sin^2(\pi(1-\delta)/2^m)} + \sum_{k=1}^{2^l-1} |c_k|^2 \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sin^2\left(\pi \left(2^m \tilde{f}_k - y_{\uparrow}\right)\right)}{\sin^2\left(\pi \left(\tilde{f}_k - y_{\uparrow} / 2^m\right)\right)}, \quad (237)$$

Členy odpovídající sumám ve vztazích (236) a (237) obvykle k hodnotám pravděpodobností přispívají zcela zanedbatelně (nicméně vždy nezáporně), pokud nejsou binární reprezentace ostatních vlastních čísel (než je studované) velmi podobné, či shodé a tak je lze v dalším ignorovat. Podobně jako v případě kdy $|c_0| = 1$ budu definovat funkci $p_m(\delta)$ proměnné $\delta \in \langle 0; 1 \rangle$ s parametrem $m \in \{1; 2; \dots\}$ vztahem

$$p_m(\delta) \equiv p_{\downarrow} + p_{\uparrow}, \quad (238)$$

platí

$$p_m(\delta) \geq |c_0|^2 \cdot \frac{1}{2^{2m}} \left(\frac{\sin^2(\pi \delta)}{\sin^2(\pi \delta / 2^m)} + \frac{\sin^2(\pi(1-\delta))}{\sin^2(\pi(1-\delta)/2^m)} \right), \quad (239)$$

s využitím předchozí analýzy průběhu funkce $p_m(\delta)$ pro případ $|c_0| = 1$ lze následně odvodit pro dolní mez k pravděpodobnosti p_{LB} nezávislou na δ i m vztah

$$p_m(\delta) \geq p_{LB} = \frac{8}{\pi^2} \cdot |c_0|^2, \quad (240)$$

snadno se nahlédne, že horní mez k výrazu na pravé straně (239) (označme ji p_{UE}) je dána vztahem

$$p_{UE} = |c_0|^2. \quad (241)$$

Jak již bylo zmíněno v odstavci pod vztahem (237), dolní mez v (239) je v drtivé většině případů velmi dobrá (tedy nezakládá v drtivé většině případů na velké naděje, že by skutečné hodnoty $p_m(\delta)$ mohly být vyšší), je proto realistické psát

$$p_m(\delta) \in \langle p_{LB}; p_{UE} \rangle, \quad (242)$$

neboli

$$p_m(\delta) \in \left\langle \frac{8}{\pi^2} \cdot |c_0|^2; |c_0|^2 \right\rangle, \quad (243)$$

což ve spojení s požadavkem, aby při praktické aplikaci algoritmu platilo⁶⁸

$$p_m(\delta) > \frac{1}{2}, \quad (244)$$

vede na požadavek na hodnotu kvadrátu absolutní hodnoty sklárního součinu⁶⁹ vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ vlastního vektoru s hledaným vlastním vektorem $|\phi_0\rangle$ uvedený v druhém odstavci této kapitoly („Algoritmus Phase Estimation“)

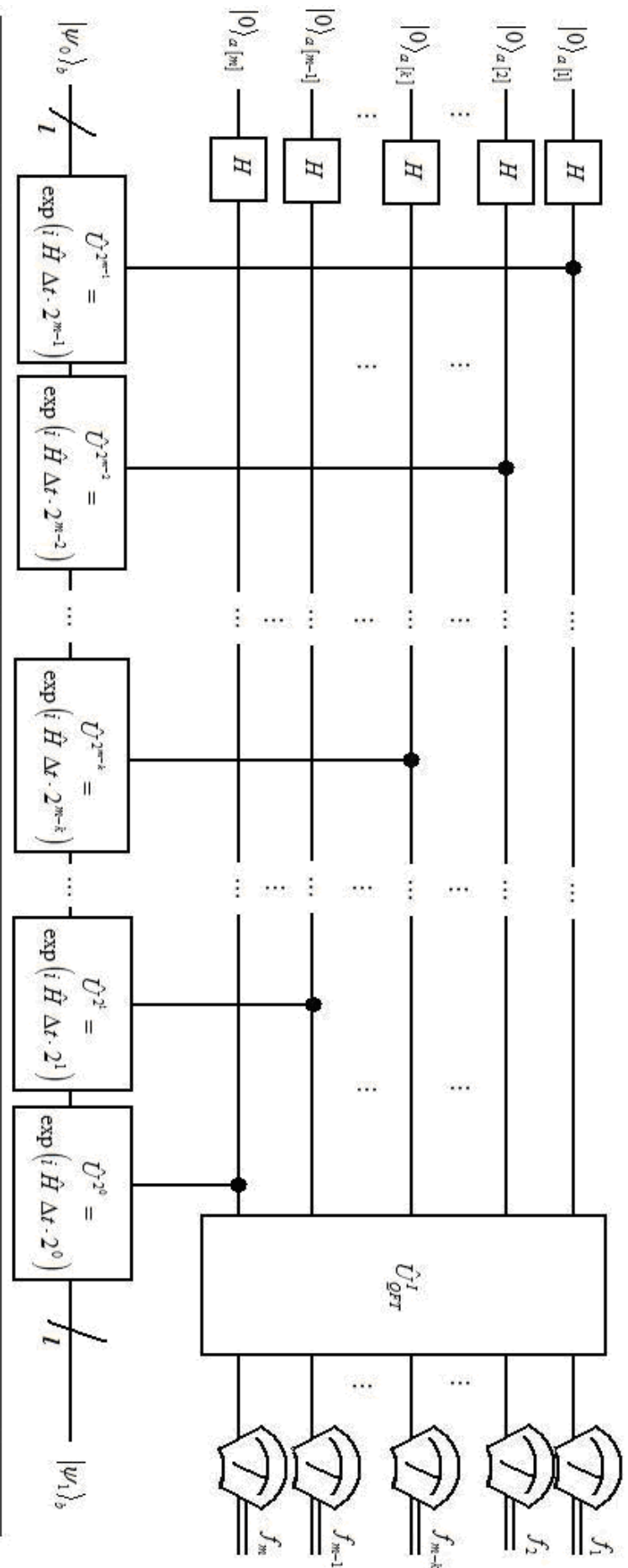
$$|\langle \psi_0 | \phi_0 \rangle|^2 \geq \frac{1}{2} \cdot \frac{\pi^2}{8} \approx 0.62, \quad (245)$$

V kapitole 3 zabývající se praktickou simulací kvantových výpočtů, konkrétně na případě numerické simulace algoritmu IPEA A na úlohu studia energetické separace stavů $X 0^+$ a $A 1$ molekuly SbH pro různé mezijaderné

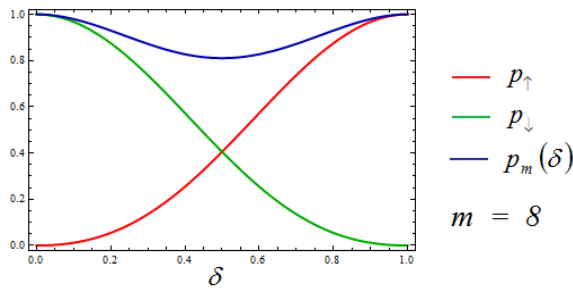
⁶⁸ Algoritmus založený na P opakování algoritmu jehož pravděpodobnost úspěchu (poskytnutí správného výsledku) je větší než 50% má sám pravděpodobnost úspěchu $1 - \varepsilon$, kde volbou dostatečně velkého P lze učinit ε libovolně malé.

⁶⁹ V technickém slangu kvantové chemie tedy „překryvu“ (popřípadě kvadrátu (absolutní hodnoty) „překryvu“).

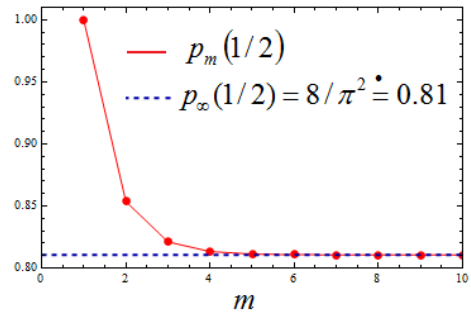
vzdálenosti R pro zkoumání splnitelnosti této podmínky uvádím závislosti „překryvu“ definovaného levou stranou (245) na mezijaderné vzdálenosti R a pro různé metodiky stanovení vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ studuji (kritickou) mezijadernou vzdálenost R_{krit} nad kterou již podmínka (245) splněna není.



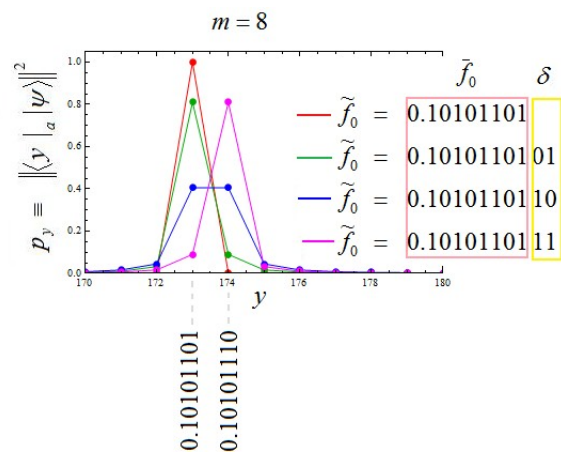
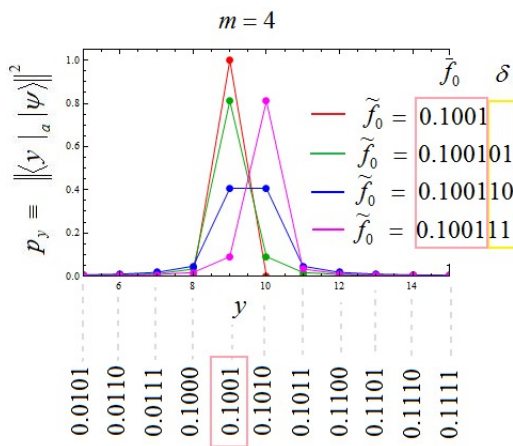
Obr. 18: Logický kvantový obvod pro metodu PEA. Šikmé přeškrtnutí dolního vodiče a písmeno „ f “ označují, že tento vodič odpovídá l -qubitovému kvantovému registru b , nikoli pouze jedinému qubitů. H označuje 1-qubitové Hadamardovo hradlo, \hat{H} hamiltonián, který je v úloze diagonalizován (nebo obecně jakoukoli hermitovskou maticí), \hat{U}_{GPT}^j označuje m -qubitové hradlo odpovídající kvantové fourierově transformaci bez posledních $m/2$ (popř. $(m-1)/2$ v případě lichého m) SWAP operací (ty jsou nahrazeny interpretací výsledků měření na m -qubitovém registru a v obráceném pořadí, tedy $f = 0.f_m f_{m-1} \dots f_2 f_1$. Bit f_m se často označuje MSB (Most Significant Bit), f_1 pak jako LSB (Least Significant Bit).



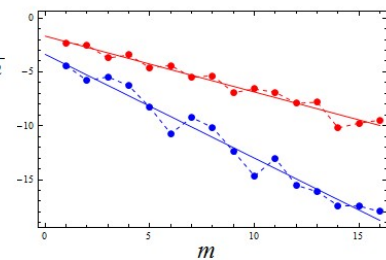
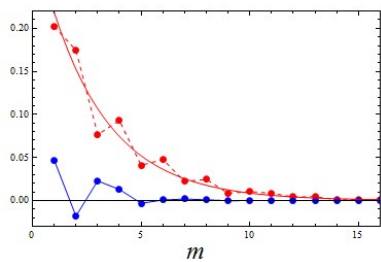
Graf 1: Závislost pravděpodobností p_\downarrow , p_\uparrow a $p_m(\delta) = p_\downarrow + p_\uparrow$ na δ



Graf 2: Závislost minima součtu pravděpodobností $p_m(\delta)$ na m



Graf 3, 4: Distribuce možných výsledků měření na kvantovém registru a pro $m = 4$ a různé hodnoty \tilde{f}_0 ($y_S = 1 + 2^3 = 9$) a pro $m = 8$ a různé hodnoty ($y_S = 173$).



$$\tilde{f}_0 = 0.01011001100100111010011100010110011$$

$$\tilde{f}_0 = 0.34990925117745064$$

$$\log_2(|\langle f_0 \rangle - f_0|) \stackrel{\cdot}{=} -3.36 - 0.96 m$$

$$\frac{1}{2} \log_2(\langle f_0^2 \rangle - \langle f_0 \rangle^2) \stackrel{\cdot}{=} -1.68 - 0.518 m$$

Graf 5, 6: Závislost absolutní chyby $\langle f_0 \rangle - f_0$ a odmocniny z variance $\sigma(f_0) = \sqrt{\langle f_0^2 \rangle - \langle f_0 \rangle^2}$ na počtu (m) qubitů registru a . Pro dostatečně velké m klesají obě veličiny na logaritmické škále lineárně (viz legenda ke grafu 6).

Algoritmus IPEA (Iterative Phase Estimation Algorithm):

Možnost provést kvantovou fourierovu transformaci za použití jediného qubitu (mQFT) naznačená v poznámce 14 nastiňuje možnost snížit počet qubitů kvantové registru a z algoritmu PEA (optimálně až na jeden jediný) – odvození je následující: Budu vycházet z logického kvantového obvodu pro metodu PEA ve kterém je explicitně rozloženo hradlo $(\hat{U}_{QFT}^l)^{-1}$ až na 1- a 2-qubitová hradla a to dle schématu pro poloklasickou kvantovou fourierovu transformaci (viz obr. 16), tento obvod je znázorněn na obr. 18. Ze kterého je patrné, že působení jednotlivých hradel na qubity registru a je nezávislé až na „klasickou provázanost“ spočívající v tom, že parametr ω_k 1-qubitového hradla $\hat{R}_z(\omega_k)$ působícího na k -tý qubit závisí na hodnotách měření na všech předchozích $k-1$ qubitech vztahy (respektive vztahem (249) jehož jsou všechny vztahy (246)-(251) zvláštními případy)

$$\omega_1 = 0, \quad (246)$$

$$\omega_2 = \omega_2(f_1) = \pi \cdot 2^{-1} f_1 = 2\pi \cdot 0.0 f_1, \quad (247)$$

$$\omega_3 = \omega_3(f_1, f_2) = \pi \cdot (2^{-2} f_1 + 2^{-1} f_2) = 2\pi \cdot 0.0 f_2 f_1, \quad (248)$$

$$\omega_k = \omega_k(f_1, f_2, \dots, f_{k-1}) = \pi \cdot \sum_{l=1}^{k-1} 2^{l-k} f_l = 2\pi \cdot 0.0 f_{k-1} f_{k-2} \dots f_1, \quad (249)$$

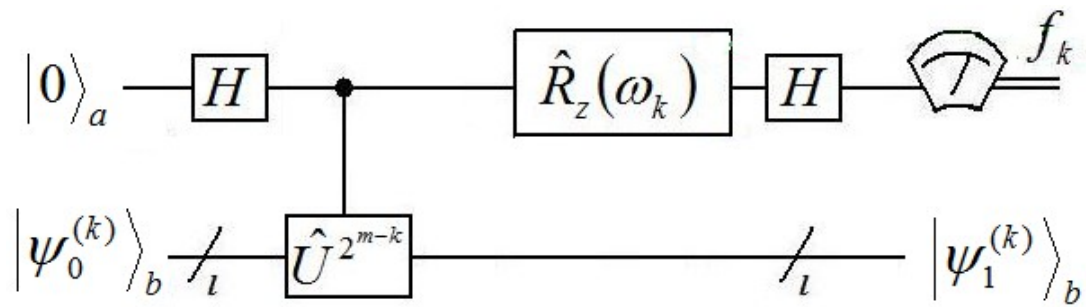
$$\omega_{m-1} = \omega_{m-1}(f_1, f_2, \dots, f_{m-2}) = \pi \cdot \sum_{l=1}^{m-2} 2^{l-m+1} f_l = 2\pi \cdot 0.0 f_{m-2} f_{m-3} \dots f_1, \quad (250)$$

$$\omega_m = \omega_m(f_1, f_2, \dots, f_{m-1}) = \pi \cdot \sum_{l=1}^{m-1} 2^{l-m} f_l = 2\pi \cdot 0.0 f_{m-1} f_{m-2} \dots f_1, \quad (251)$$

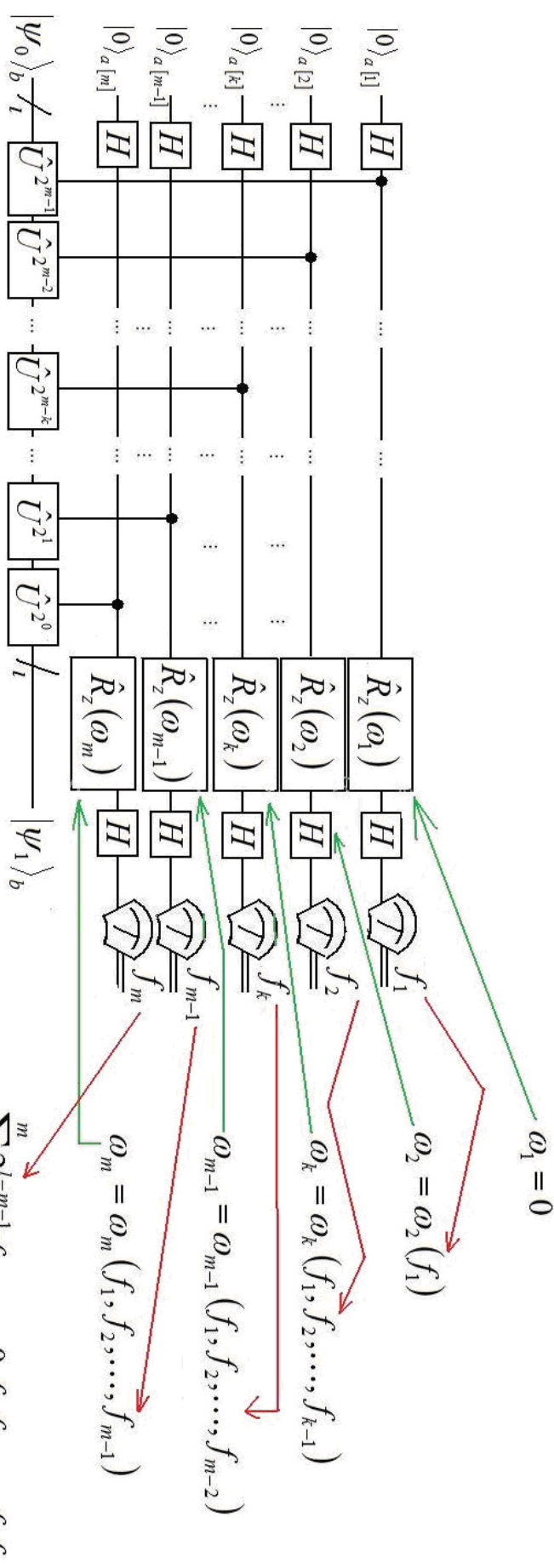
Výsledný odhad fáze f je pak dán vztahem

$$f = \sum_{l=1}^m 2^{l-m} f_l = 0.f_m f_{m-1} \dots f_2 f_1. \quad (252)$$

To naznačuje možnost „oddělení“ jednotlivých kvantových vodičů v obvodu z obr. 18 a použití jediného 1-qubitového kvantového registru a zastupujícího role jednotlivých qubitů původního m -qubitového registru postupně shora dolů tak jak jsou uvedeny v obvodu z obr. 18 – viz kvantový logický obvod metody IPEA (Iterative Phase Estimation Algorithm) znázorněný na obr. 19.



Obr. 19: Kvantový logický obvod odpovídající algoritmu IPEA (Iterative Phase Estimation Algorithm, iterativní odhad fáze), respektive jeho k -tému kroku (k -té iteraci). Algoritmus postupuje pro $k \in \{1, 2, \dots, m\}$ a na konci každé iterace se měřením stanoví hodnota k -tého nejméně významného bitu binárního m -bitového zápisu odhadu fáze f (viz vztah (252), tj. algoritmus určuje bity binárního rozvoje fáze „odzadu“). Hodnoty parametru ω_k jsou dány vztahem (249). Kvantový stav l -qubitového registru b bude diskutován níže v textu (za obr, 18).



Obr. 20 : Logický kvantový obvod odpovídající přechodu mezi PEa a IPEa (ř. odpovídá poloklasické fourierově transformace) Šikmé přeškrtnutí doleho vodiče a písmeno „f“ označují, že tento vodič odpovídá l -qubitovému kvantovému registru b , nikoli pouze jedinému qubitů. H označuje 1-qubitové Hadamardovo hradlo, parametr ω_k hradla $\hat{R}_z(\omega_k)$ působícího na k -tý qubit závisí na hodnotách měření předchozích $k-1$ qubitů (od kvantového „vodiče“ nejvýše (odpovídá LSB)) $f = 0 f_m f_{m-1} \dots f_2 f_1$.

Přes značnou nenáročnost algoritmu IPEA (vyžaduje pouze $l+1$ qubitů, nikoli $l+m$ a přesto pro dostatečně velký počet iterací může poskytnout přesnost v určení fáze/vlastního čísla odpovídající libovolně velkému m (tj. chyba v určení fáze/vlastního čísla řádu $O(2^{-m})$)) je třeba si uvědomit, že stav kvantového jádra kvantového počítače není možné udržet koherentní (tj. neentanglovaný s okolím) libovolně dlouhou dobu a že proces dekoherence (entanglement s okolím, ztráta schopnosti nést a zpracovávat kvantovou informaci) probíhá kontinuálně. To v praxi omezuje hodnotu m . Navíc fakt, že zjišťujeme bity binárního rozvoje odhadu fáze f „odzadu“ způsobuje, že nejdůležitější část informace je zjišťována nejpozději a tedy zatížena největší chybou v důsledku nepřesností a dekoherence. Podobnou roli pak při simulacích kvantového zoracování informace na klasických počítačích hraje akumulovaná zaokrouhlovací chyba, která pro m větší než několik málo desítek způsobí i při výpočtech v „dvojitě přesnosti“ (double precision), že nejdůležitější bity hledaného výsledku budou zatíženy chybou natolik velkou, že jejich vypočtené hodnoty budou bezcenné (už velké mocniny maticové reprezentace hradla \hat{U} mohou představovat velký výpočetní problém). Proto jsem se ve své práci ve výpočtech omezil na přesnost $m = 20$, což odpovídá 20 bitům binárního rozvoje fáze f a tedy zhruba 6 číslicím desetinného rozvoje.

V kvantovém logickém obvodu na obr. 19 je jako vstupní stav kvantového registru b uveden $|\psi_0^{(k)}\rangle_b$, což naznačuje závislost na iteraci (při přesném přepisu algoritmu PEA by mělo platit (254), tedy výstupní stav $|\psi_1^{(k-1)}\rangle_b$ ($k-1$)-té iterace je vstupem od k -té. Vstup do iterace $k = 1$ pak odpovídá původnímu vstupu do algoritmu PEA (označovaném $|\psi_0\rangle_b$) (253) a naopak výstup z poslední iterace $k = m$ odpovídá výstupnímu stavu kvantového registru b (označovaném v případě PEA jako $|\psi_1\rangle_b$) (255).

$$|\psi_0^{(1)}\rangle_b = |\psi_0\rangle_b, \quad (253)$$

$$|\psi_0^{(k)}\rangle_b = |\psi_1^{(k-1)}\rangle_b, \quad \forall k \in \{2, 3, \dots, m\}, \quad (254)$$

$$|\psi_1^{(m)}\rangle_b = |\psi_1\rangle_b. \quad (255)$$

Existuje však alternativa umožňující částečně se vypořádat s problémem poklesu koherence v průběhu iterací algoritmu IPEA – vstupní stav $|\psi_0^{(k)}\rangle_b$ se pro každou iteraci připravuje zvlášť. V nejjednodušším případě pak jako stále tentýž odhad vlastního vektoru $|\psi_0\rangle_b$ (256). Nevýhodou tohoto postupu jsou (většinou nepatrně) nižší pravděpodobnosti měření pro správnou hodnotu odhadu fáze f než v předchozím případě, kdy platilo (253)-(255).

$$|\psi_0^{(k)}\rangle_b = |\psi_0\rangle_b, \quad \forall k \in \{1, 2, \dots, m\}, \quad (256)$$

Alternativu definovanou vztahy (253)-(255) budu v dalším označovat jako „IPEA A“, alternativu definovanou vztahem (256) pak „IPEA B“.

Vztahy pro výpočet pravděpodobností změření jedné ze dvou nejvíce přesných m -bitových aproximací fáze f (232)-(234) (a samozřejmě také jejich součet) jsou pro případ $|c_0|^2 \equiv |\langle \psi_0 | \psi \rangle|^2 = 1$ ⁷⁰ stejné pro IPEA A, IPEA B i PEA.

Je-li projekce $(1 - |\psi\rangle\langle\psi|)|\psi_0\rangle$ nenulovým vektorem, je třeba vztahy pro výpočty pravděpodobností změření správné hodnoty odhadu fáze (232)-(234) upravit. Je zřejmé, že úprava, která bude použita pro metodu PEA bude použitelná (v identickém tvaru) i pro metodu IPEA A (ta z ní vznikla ekvivalentními náhradami v kvantových logických obvodech), ale pro metodu IPEA B si vyžádá drobné úpravy (mezi jednotlivými iteracemi IPEA B se mění neunitárním způsobem stav kvantového registru b – viz (256)).

⁷⁰ Ket $|\psi\rangle$ označuje vlastní vektor $\hat{U} : C^{2^l} \rightarrow C^{2^l}$ odpovídající hledanému vlastnímu číslu $2\pi i f$, respektive jeho fázi f , ket $|\psi_0\rangle$ pak jeho odhad vstupující do algoritmu odhadu fáze. Oba kety předpokládáme normalizované.

Algoritmus IPEA⁷¹

(QCL kód)

```
procedure ipeaiter(qureg a, qureg b, boolean fvec[], int
k, int m) {
    real freq; real omega; int l;
    freq=0;
    for l = 1 to k-1 {f = f + fvec[l]*(2**(l-k))}
    omega=2*pi()*freq;
    reset a;
    Mix(a);
    CU(b,a,m-k);
    CPhase(omega,a);
    Mix(a);
    measure a,fvec[k]; }
```

```
procedure ipea(qureg a, qureg b, int m, real phase,
boolean ver) {
    phase=0; boolean fvec[m];
    for k=1 to m {
        ipeaiter(a,b,fvec,k,m);
        if ver {prepsi0(b)}
```

⁷¹ Algoritmus je popsán procedurou „ipea“, jejíž čtvrtý parametr „ver“ je boolovská proměnná. Má-li hodnotu „true“, provádí procedura algoritmus „IPEA B“, má-li „ver“ hodnotu „false“, provádí procedura algoritmus „IPEA A“. Odhad $|\psi_0\rangle$ vlastního vektoru operátoru $\hat{U} : C^{2^l} \rightarrow C^{2^l}$ vytváří v kvantovém registru b procedura „prepsi0“, v dalším popisu této proceduře odpovídá působení operátoru \hat{U}_0 na stav „00..0“ kvantového registru b , tedy

$$|\psi_0\rangle_b = \hat{U}_0|0\rangle_b, \quad (257)$$

Procedura však registr b nejprve resetuje a tím dokáže připravit stav $|\psi_0\rangle$ z libovolného předchozího stavu kvantového registru b . Stav celého kvantového jádra je před voláním procedury „prepsi0“ vždy produktovým stavem kvantových registrů a a b , takže tato operace dává smysl.

```

}
for k=1 to m {phase=phase+fvec[k]*2**(k-m-1)} }

```

1) Příprava stavu

1.1) Resetování stavu kvantového jádra

$$\text{Reset: } |\psi\rangle = |00\dots 0\rangle, \quad (258)$$

1.2) Alokace kvantových registrů a , b :

kvantový registr a (1 qubit) ... určený k extrakci informace o hledaném vlastním čísle matice U . Chyba v určení „fáze“ f parametrizující vlastní číslo klesá jako $O(2^{-m})$, kde m je počet iterací IPEA.

kvantový registr b (l qubitů) ... slouží k uložení informace o diagonalizované unitární matici (rozměru ne většího než 2^l), respektive působení jejích mocnin na vektor z prostoru C^{2^l} (2^l rozměrný Hilbertův prostor)

```
qureg a[1]; qureg b[1];
```

$$|\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes |0\rangle_b, \quad (259)$$

1.3) Příprava počátečního odhadu vlastního vektoru \hat{U} odpovídajícího hledanému vlastnímu číslu ($|\psi_0\rangle$) v kvantovém registru b

```
prepsi0(qureg b0) {...};
```

```
prepsi0(b);
```

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{U}_0[b]|\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes \hat{U}_0|0\rangle_b, \quad (260)$$

$$|\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes |\psi_0\rangle_b, \quad (261)$$

2) Cyklus iterací IPEA

```

phase=0; boolean fvec[m]; // phase ... fáze „f“
                        // fvec ... vektor binárních
cifer „f“, tj. f = 0.fmfm-1...f2f1.
for k=1 to m { // projde k=1 iteraci, pak k=2,
... pak k=m-1 až k=m.

```

```

ipeaiter(a,b,fvec,k,m); //vlastní iterace
if ver {prepsi0(b)} // ver=true => IPEA B,
// před vstupem do další iterace znovu připraví původní
vstupní stav. Ver=false => IPEA A
}
for k=1 to m {phase=phase+fvec[k]*2**(k-m-1)}
} //závěrečný výpočet odhadnuté fáze

```

3) k-tá iterace

```

procedure ipeaiter(qureg a, qureg b, boolean fvec[], int
k, int m) {

```

```

    real freq; real omega; int l;

```

```

    freq=0;

```

```

    for l = 1 to k-1 {f = f + fvec[l]*(2**(l-k))}

```

```

    omega=2*pi()*freq;

```

```

reset a;  $|0\rangle_a$ , (262)

```

```

Mix(a);  $|0\rangle_a \rightarrow H|0\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_a + |1\rangle_a)$ , (263)

```

```

CU(b,a,m-k);  $\hat{U}^{2^{m-k}}|\phi\rangle_a \otimes |\psi_0^{(k)}\rangle_b = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_a|\psi_0^{(k)}\rangle_b + |1\rangle_a\hat{U}^{2^{m-k}}|\psi_0^{(k)}\rangle_b)$ , (264)

```

```

CPhase(omega,a);

```

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{R}_{z,a}(\omega_k)|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_a|\psi_0^{(k)}\rangle_b + e^{i\omega_k}|1\rangle_a\hat{U}^{2^{m-k}}|\psi_0^{(k)}\rangle_b), \quad (265)$$

```

Mix(a);

```

$$|\psi\rangle \rightarrow H|\psi\rangle \rightarrow \frac{1}{2} \left((1 + e^{i\omega_k}\hat{U}^{2^{m-k}})|0\rangle_a|\psi_0^{(k)}\rangle_b + (1 - e^{i\omega_k}\hat{U}^{2^{m-k}})|1\rangle_a|\psi_0^{(k)}\rangle_b \right), \quad (266)$$

```

measure a,fvec[k]; }

```

Pravděpodobnost, že výsledkem měření na konci k -té iterace bude $a = 0$ označím $p_k^{(0)}$, podobně doplňkovou pravděpodobnost, že výsledkem měření bude $a = 1$ označím $p_k^{(1)}$. Snadno se nahlédne, že platí

$$p_k^{(0)} = \frac{1}{4} \langle \psi_0^{(k)} | (1 + e^{-i\omega_k} \hat{U}^{-2^{m-k}}) (1 + e^{i\omega_k} \hat{U}^{2^{m-k}}) | \psi_0^{(k)} \rangle, \quad (267)$$

$$p_k^{(1)} = \frac{1}{4} \langle \psi_0^{(k)} | (1 - e^{-i\omega_k} \hat{U}^{-2^{m-k}}) (1 - e^{i\omega_k} \hat{U}^{2^{m-k}}) | \psi_0^{(k)} \rangle, \quad (268)$$

s využitím spektrálního rozkladu pro operátor $\hat{U}^{2^{m-k}}$

$$\hat{U}^{2^{m-k}} = \sum_{n=0}^{2^l-1} \exp(2\pi i \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k}) |\phi_n\rangle \langle \phi_n|, \quad (269)$$

lze dále (267) a (268) upravit na

$$p_k^{(0)} = \sum_{n=0}^{2^l-1} |c_n^{(k)}|^2 \cdot \cos^2 \left(\pi \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k} + \frac{1}{2} \omega_k \right), \quad (270)$$

$$p_k^{(1)} = \sum_{n=0}^{2^l-1} |c_n^{(k)}|^2 \cdot \sin^2 \left(\pi \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k} + \frac{1}{2} \omega_k \right), \quad (271)$$

kde $c_n^{(k)}$ jsou rozvojové koeficienty pro rozvoj ketu $|\psi_0^{(k)}\rangle_b$ vstupujícího do k -té iterace do báze vlastních vektorů operátoru \hat{U} (konkrétně $c_n^{(k)}$ odpovídá n -tému vlastnímu vektoru $|\phi_n\rangle$, jemuž odpovídající „fáze“ je označována jako \tilde{f}_n). Stav kvantového registru b je po měření na kvantovém registru a vykonaném na konci k -té iterace je dán vzorcem (272), je-li výsledkem měření $a = 0$, nebo vzorcem (273), je-li výsledkem měření $a = 1$.

$$|\psi^{(k,a=0)}\rangle_b = \sum_{n=0}^{2^l-1} c_n^{(k)} \cdot \frac{1}{2} \left(1 + \exp(i(2\pi \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k} + \omega_k)) \right) |\phi_n\rangle_b, \quad (272)$$

$$|\psi^{(k,a=1)}\rangle_b = \sum_{n=0}^{2^l-1} c_n^{(k)} \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \exp\left(i\left(2\pi \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k} + \omega_k\right)\right) \right) |\phi_n\rangle_b, \quad (273)$$

IPEA B

Vztah pro $|\psi^{(k,a=0)}\rangle_b$ a $|\psi^{(k,a=1)}\rangle_b$ pro případ metody IPEA B, kde lze s ohledem na platnost (256) psát

$$c_n^{(k)} = c_n \quad \forall k \in \{1, 2, \dots, m\}, \quad (274)$$

lze upravit na (275), respektive (276)

$$|\psi^{(k,a=0)}\rangle_b = \sum_{n=0}^{2^l-1} c_n \cdot \frac{1}{2} \left(1 + \exp\left(i\left(2\pi \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k} + \omega_k\right)\right) \right) |\phi_n\rangle_b, \quad (275)$$

$$|\psi^{(k,a=1)}\rangle_b = \sum_{n=0}^{2^l-1} c_n \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \exp\left(i\left(2\pi \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k} + \omega_k\right)\right) \right) |\phi_n\rangle_b, \quad (276)$$

Pro pravděpodobností distribuci výsledků měření v kvantovém registru a ze všech iterací algoritmu (tento soubor výsledků budu dále označovat $\vec{a} = (a_1, a_2, \dots, a_m) \in \{0; 1\}^m$, kde dolní index k u veličiny a_k odpovídá číslu iterace a dle popisu algoritmu soubor výsledků \vec{a} odpovídá binárnímu rozvoji „odhadu fáze“ směrem od nejméně významné (binární) číslice k nejvíce významné, tedy „odhad fáze“ je reprezentován rozvojem (277)) platí vztah (278), kde pravděpodobnosti výsledků dílčích měření dané vztahy (269) a (270) mohou být upraveny pro případ, kdy hodnota a_k odpovídá hodnotě k -té nejméně významné binární číslici fáze $\vec{f}_0 = 0.f_m f_{m-1} \dots f_2 f_1$ (viz vztah (252) a vztahy (228)-(230), tj.⁷² $a_k = f_k$)

$$\vec{a} = 0.a_m a_{m-1} \dots a_2 a_1, \quad (277)$$

⁷² Respektive kdy $a_p = f_p \quad \forall p \leq k$, tj. měření na všech nejméně významných k číslicích binárního rozvoje fáze \vec{f}_0 poskytla jejich očekávanou hodnotu.

$$p(\tilde{a}) = \prod_{k=1}^m p_k^{(a_k)}, \quad (278)$$

$$p_k^{(a_k=0, a_p=f_p \forall p \leq k)} = |c_0|^2 \cos^2(\pi \delta \cdot 2^{-k}) + \sum_{n=1}^{2^l-1} |c_n^{(k)}|^2 \cos^2\left(\pi \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k} + \frac{1}{2} \omega_k\right), \quad (279)$$

$$p_k^{(a_k=1, a_p=f_p \forall p \leq k)} = |c_0|^2 \cos^2(\pi \delta \cdot 2^{-k}) + \sum_{n=1}^{2^l-1} |c_n^{(k)}|^2 \sin^2\left(\pi \tilde{f}_n \cdot 2^{m-k} + \frac{1}{2} \omega_k\right), \quad (280)$$

kde bylo za ω_k dosazeno ze vztahů (246)-(251), ovšem s obráceným znaménkem odpovídajícím dopředné mQFT transformaci. Kombinací vztahů (278)-(280) lze psát

$$p(\tilde{a} = \tilde{f}_0) = |c_0|^{2m} \prod_{k=1}^m \cos^2(\pi \delta \cdot 2^{-k}) + \dots, \quad (281)$$

Teoretické srovnání metod IPEA A a IPEA B, opakování měření během iterací metody IPEA B (parametr r)

Metoda IPEA B, narozdíl od metody IPEA A sestává z m v principu nezávislých běhů kvantového počítače mezi kterými může být stav kvantového jádra kompletně restartován. To znamená, že ji postačuje m -krát kratší dekoherenční čas než metodě IPEA A.

Způsobem a zároveň i cenou jak je toho dosahováno je opakovaná inicializace kvantového registru b do stavu $|\psi_0\rangle_b$ na začátku každé iterace. Díky tomu je pravděpodobnost získání správné hodnoty fáze (resp. alespoň jedné ze dvou nejbližších racionálních aproximací, „pravděpodobnost úspěchu p_m “) pomocí IPEA B ve výše popsaném uspořádání obvykle výrazně nižší než u metody IPEA A (ukazuje se (viz např. mé výpočty na str. 172-175), že p_m v takovém případě

exponenciálně klesá jako $|c_0|^m$ (což nápadně připomíná první člen rozvoje na pravé straně (281), viz pozn. pod čarou 117).

Naštěstí, oddělení jednotlivých iterací v metodě IPEA B umožňuje zvyšovat pravděpodobnost změření správné hodnoty bitového rozvoje fáze f u každé bitové číslice zvlášť – tedy opakováním běhu každé iterace metody IPEA B r -krát a „většinovou volbou“ (r se zvolí liché a ta bitová hodnota, která při r -opakováních měření převažuje se považuje za změřený výsledek). Lze teoreticky i simulací skutečného kvantového výpočtu ukázat, že za podmínek spíše slabších, než silnějších než jsou ty pro aplikovatelnost IPEA A lze volbou dostatečně velkého počtu r opakování měření v každé iteraci dosáhnout nárůstu pravděpodobnosti úspěchu IPEA B nad p_m pro IPEA A (a pro ještě větší r pak dosáhnout až konvergence p_m k jedné).

Hodnota r pro kterou se pro dané m dosahuje v případě metody IPEA B pravděpodobností úspěchu p_m dané pevné hodnoty ($0,99, 1 - 10^{-4}, \dots$) a/nebo hodnoty odpovídající metodě IPEA A by měla být předmětem dalšího výzkumu.

V případě metody IPEA A lze také výpočet „restartovat“ – po provedení m iterací (tj. zjištění/změření m bitů (od nejméně významného po nejvýznamnější)) získané dvě nejpravděpodobnější hodnoty energie - $E_{\downarrow} < E_{\uparrow}$ (odpovídající fázím f_{\downarrow} a f_{\uparrow} (v (228)-(230) označovaných jako \bar{f}_0 a f_0^{\uparrow})) by měly, za podmínek dostatečného překryvu vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ vlastního vektoru $|\phi\rangle$ studovaného hamiltoniánu \hat{H} (a tedy i jemu odpovídajícího evolučního operátoru (194)), tedy $|\langle\psi_0|\phi\rangle|^2 \geq \pi^2/16 \approx 0.62$ poskytovat dolní, respektive horní mez k hodnotě energie a mělo by být možné jich použít k volbě $E_{max} = E_{\uparrow}$, $E_{min} = E_{\downarrow}$ (a tomu odpovídající volbě $\Delta\tau$ ((195), popř. (200)), tedy

$$\Delta\tau = \frac{2\pi}{\Delta E}, \quad (282)$$

kde $\Delta E = E_{max} - E_{min}$. Pak po dalších m iteracích metody IPEA (A) s touto volbou $\Delta\tau$ (282) pro evoluční operátor (194) (popř. (197)) získáme s nejvyšší pravděpodobností horní a dolní odhad energie E_{\uparrow} a E_{\downarrow} pro jejichž rozdíl δE bude platit (přesněji řečeno, tento rozdíl bude rozdílem dvou nejbližších, navzájem rozlišitelných hodnot energie, otázka hodnoty součtu pravděpodobností bude řešena dále v textu)

$$\delta E' = E_{\uparrow}' - E_{\downarrow}' = 2^{-m} \Delta E, \quad (283)$$

opakujeme-li celý postup znovu – použití nově získaných E_{\uparrow}' a E_{\downarrow}' jako volbu E_{min}' a E_{max}' pro další opakování algoritmu IPEA (A) (výstupy z ní bych pak značil dvěma čárkami) a takto znovu, získáme pro rozlišení (rozdíl větší a menší z nejvíce pravděpodobných hodnot energie) k -tého opakování algoritmu IPEA (A) $\delta E^{(k-1)}$ vztah

$$\delta E^{(k-1)} = 2^{-mk} \Delta E_0, \quad (284)$$

kde ΔE_0 je rozdíl $E_{max} - E_{min}$ před provedením algoritmu IPEA (A) poprvé. Tímto způsobem lze získat rozlišení odpovídající mk bitům, tedy k -krát více než v jediném běhu s tím, že je použito nejvýše 2^{m-1} -té mocniny evolučního operátoru \hat{U} ((194), popř. (197)), což podstatně snižuje nutný počet kvantových hradel, zkracuje čas potřebný k výpočtu (a poradí si s kratším dekoherenčním časem) a v případě simulací na klasickém počítači umožňuje snižovat akumulovanou zaokrouhlovací chybu. Nevýhodou je však pokles pravděpodobnosti úspěchu p_m celé sekvence k -opakování IPEA (A) s hodnotou k . Tento pokles je zjevně exponenciální (v případě nejhoršího scénáře odpovídá vztahu (285))

$$p_m = \left(\frac{8}{\pi^2} |\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2 \right)^k. \quad (285)$$

Záchranu situace umožňuje, podobně jako v případě metody IPEA B, opakování běhu algoritmu IPEA A pro každý z k kroků r -krát, kde r je dostatečně velké a majoritní volbou dvou nejbližších hodnot energie (pochopitelně, pokud by nebyl algoritmus simulovaný, nebylo by možné pro $r = 1$ výše popsany postup vůbec provést, protože při měření v praxi nezískáme hodnoty pravděpodobností, ale jen jednotlivé výsledky a k obdržení dvou nejbližších nejpravděpodobnějších hodnot fáze (energie) je třeba provést nutně více než 1 měření). Tím lze získat analogii metody IPEA B úpravou metody IPEA A. Další možná vylepšení mohou být

založená na současné kvantové tomografii na kvantovém registru b s cílem zjistit odhady rozvojových koeficientů výstupního odhadu vlastního vektoru evolučního operátoru (194) (k tomu lze využít faktu, že jak během IPEA B(r), tak během výše popsané „opakované IPEA A“ se provádí r opakovaných měření téhož stavu) a ty využít buďto ke kvantově-chemické analýze studovaného systému (obecněji zaznamenání a studiu vlastního vektoru), nebo pro konstrukci vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ vlastního vektoru evolučního operátoru \hat{U} pro další opakování IPEA A, opět zvyšujíc celkovou pravděpodobnost úspěchu p_m složeného algoritmu.

1.3.2.3.2 Způsob implementace „orákula“ pro aplikaci U jako hradla

Mapping Hilbertových prostorů

Při diagonalizaci hamiltoniánu \hat{H} systému X pomocí kvantového počítače s l qubity pro reprezentaci vlastního vektoru tohoto hamiltoniánu vytváříme mapping (přřazení) mezi stavy v Hilbertově prostoru H na kterém je definován \hat{H} (respektive jeho restrikce na podprostoru H_0 generovaném vektory báze použité v numerických výpočtech) a stavy prostoru l -qubitů (C^{2^l}) na kterém působí reprezentace evolučního operátoru $\hat{U} = \exp(i \hat{H} \Delta t)$ (197) (popřípadě (194), použije-li se zpětná Fourierova transformace (respektive její diskretní a kvantová verze - zpětná mQFT) v následujících krocích algoritmu IPEA). Dále se v této práci zabývám dvěma typy mappingu pro případ diagonalizace hamiltoniánů (odpovídajících metodě konfigurační interakce) v kvantové chemii:

1. *Direct mapping*

Je založen na obsazovacích číslech pro jedntolivé (molekulové, ortonormální) spinorbitaly v rámci daného Slaterova determinantu. Pro popis vlnové funkce studované molekuly uvažujeme tři množiny spinorbitalů – obsazené ve všech Slaterových determinantech výpočetní báze (množina F), neobsazené ve všech Slaterových

determinantech výpočetní báze (množina V) a konečně zbývající spinorbitaly (množina S), které jsou v některých Slaterových determinantech obsazené, v jiných ne. Buď množina S právě l -prvková. Pak vektor kanonické báze C^{2^l} ve tvaru $|01101\dots10\rangle$ obsahuje na k -tém místě 0 nebo 1 právě když k -tý spinorbital množiny S je v jemu odpovídajícím Slaterově determinantu neobsazen („0“) nebo obsazen („1“).

Jak bude ukázáno v následujícím – tento mapping umožňuje snadné odvození výrazů pro rozklad působení evolučního operátoru \hat{U} na elementární hradla. Jeho podstatnou nevýhodou je, že je značně nešetrný – pro kódování nevelkých více-částicových bází může vyžadovat velké množství qubitů (tj. velké l). Celá řada vektorů kanonické báze C^{2^l} je nevyužita, neboť odpovídá systému s jiným počtem částic (elektronů), jinou z -komponentou celkového spinu (v nerelativistické kvantové chemii v nepřítomnosti vnějších polí integrál pohybu), nebo zjevně jinou symetrií (jim pak mohou odpovídat identicky nulové bloky reprezentace hamiltoniánu v C^{2^l} a tedy bloky rovné jednotkovému operátoru v případě reprezentace evolučního operátoru v C^{2^l}). V případě např. CISD výpočtu na systému s 20 prvkovou množinou S bychom minimálně $2^{20} - 190 = 106$ (cca 99.98% z celkových 2^{20}) vektorů kanonické báze ponechali nevyužitými. Dokonce i v případě FCI pro systém s 6 elektrony a 20 spinorbitaly ze stejné množiny S se z celkového počtu vektorů kanonické báze nevyužije více než 3,6 %.

2. Compact mapping

Opačný přístup, než v případě Direct mappingu – matice hamiltoniánu ve výpočetní bázi (obvykle mnohočásticová báze Slaterových determinantů) je do C^{2^l} přenesena „co nejúsporněji“. Má-li tedy rozměr h , pak je zapotřebí $l = \lceil \log_2(h) \rceil$. Nevýhodou je obecně těžší reprezentace excitačních operátorů pomocí posloupnosti 1- a 2-qubitových hradel a s tím související nárůst časové složitosti při

implementaci akce $\hat{U}^{2^{m-k}}$ na l -qubitový registr. Časová složitost by však stále měla zůstat nejvýše polynomiální vzhledem k l .

V některých případech je výhodnější Direct mapping v jiných Compact mapping, což závisí na posuzovaném kritériu (snadnost implementace, paměťové nároky, časové nároky, ...), velikosti a charakteru použité výpočetní báze, konkrétním systému (konkrétní molekule) a v neposlední řadě na zvolené metodě/aproximaci (jiné bude posouzení situace pro nerelativistickou CI, jiné pro relativistickou CI v rámci No-pair aproximace a jiné pro CI i s explicitním zahrnutím QED efektů).

Jak bylo ukázáno výše, samotná diagonalizace vyžaduje pouze $O(m)$ elementárních hradel za předpokladu, že \hat{U}^x počítáme jako jediné („elementární“) hradlo. O časové komplexitě tak rozhoduje především skutečný způsob realizace aplikace (c -té mocniny) podmíněného operátoru $\hat{U}^{2^{m-k}}$. O technice jak odvodit vztahy pro rozklad l -qubitového operátoru $\hat{U}^{2^{m-k}}$ na 1- a 2-qubitová kvantová hradla (potažmo elementární kvantová hradla, pro případ ***direct mappingu***) tak, aby počet těchto hradel byl polynomiálně omezený vzhledem k velikosti problému (který odpovídá diagonalizaci maticové reprezentace hamiltoniánu vícečásticového kvantového systému, tzn. velikostí zde může být např. mohutnost jednočásticové báze⁷³ M) pojednají následující čtyři odstavce – *Trotterův-Suzukiho rozvoj*, *Druhé kvantování*, *Jordan-Wignerova transformace* a *Rozklad evolučního operátoru*.

Trotterův-Suzukiho rozvoj

Pro další úvahy uvedu Trotterovu formuli ([14], [32], [33]), která má v nejjednodušším vyjádření tvar

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\exp(i \hat{A} / n) \cdot \exp(i \hat{B} / n) \right)^n = \exp(i (\hat{A} + \hat{B})), \quad (286)$$

⁷³ V případě Compact-mappingu a FCI pak platí $M = l$.

kde \hat{A} a \hat{B} jsou operátory na prostoru L^2 , nebo jeho podprostoru takové, že operace uvedené v (286) mají smysl (v dalším bude studován případ, kdy \hat{A} a \hat{B} jsou hermitovské se zdola omezeným spektrem). Jiné vyjádření Trotterovy formule („rozvoj do prvního řádu“) má tvar

$$\exp(i(\hat{A} + \hat{B})\Delta t) = \exp(i\hat{A}\Delta t) \cdot \exp(i\hat{B}\Delta t) + O(\Delta t^2), \quad (287)$$

kde Δt je malý reálný parametr, podobně lze uvést vztah pro „rozvoj do druhého řádu“ (v Δt) (288)-(289), případně do vyšších řádů ([34], [35], [36], (293))

$$\exp(i(\hat{A} + \hat{B})\Delta t) = \exp(i\hat{A}\Delta t/2) \cdot \exp(i\hat{B}\Delta t) \cdot \exp(i\hat{A}\Delta t/2) + O(\Delta t^3), \quad (288)$$

$$\exp(i(\hat{A} + \hat{B})\Delta t) = \exp(i\hat{A}\Delta t) \cdot \exp(i\hat{B}\Delta t) \cdot \exp\left(\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\Delta t^2\right) + O(\Delta t^3). \quad (289)$$

Platnost výše uvedených vztahů se snadno nahlédne, pokud dosadíme za exponenciály odpovídající Taylorovy rozvoje. Vztah (289), označovaný také jako Campbell-Baker-Hausdorfova formule je příbuzný Hausdorfově formuli (290), která je všeobecně v kvantové chemii (metoda vázaných klastrů) i kvantové teorii obecně velmi užitečná.

$$\begin{aligned} e^{i\hat{A}} \hat{B} e^{-i\hat{A}} &= \hat{B} + i[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{i^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \\ &\dots + \frac{i^n}{n!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\dots [\hat{A}, \hat{B}]\dots]]] + \dots \end{aligned} \quad (290)$$

Rozvoje (287), (288) i případná zobecnění pro vyšší řády (v Δt) existují i pro $N > 2$ hermitovských operátorů. Lze tedy psát (291), respektive (292).

$$\exp(i \hat{H} \Delta t) = \exp(i \hat{H}_1 \Delta t) \cdot \exp(i \hat{H}_2 \Delta t) \cdot \dots \cdot \exp(i \hat{H}_N \Delta t) + O(\Delta t^2), \quad (291)$$

$$\exp(i \hat{H} \Delta t) = \left(\prod_{k=1}^N \exp\left(i \hat{H}_k \frac{\Delta t}{2}\right) \right) \cdot \left(\prod_{p=1}^N \exp\left(i \hat{H}_{N+1-p} \frac{\Delta t}{2}\right) \right) + O(\Delta t^3), \quad (292)$$

$$\exp(i \hat{H} \Delta t) = \prod_{k=1}^{2N\eta} \exp\left(i \hat{H}_{p(k)} \theta_{k,p(k)} \Delta t\right) + O(\Delta t^\eta), \quad (293)^{74}$$

kde

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \hat{H}_k, \quad (294)$$

což naznačuje i další použití formulí (291), (292), případně analogických rozvoju do vyšších řádů v Δt – pro vyjádření evolučního operátoru ((194), popřípadě (197), který je obecně l -qubitovým hradlem, kde l je velikost celého kvantového registru pro metodu IPEA (aplikovanou na maticovou reprezentaci FCI hamiltoniánu)) pomocí 1-qubitových a 2-qubitových hradel.

Δt ve vyjádření evolučního operátoru (194) (popřípadě $\Delta \tau$ ve vyjádření (417)) je pak ve vztahu (293) rozděleno na q dílků $\Delta t_\varepsilon = \Delta t/q$ a pro ty je použita formule typu (293). Čím menší Δt_ε jsou tím je formule (293) přesnější, ale tím je také větší počet kvantových hradel, která jsou potřeba pro aplikaci evolučního operátoru (194), respektive všech jeho mocnin použitých v diagonalizačním algoritmu IPEA. Volba příliš malého Δt_ε navíc nemusí nezbytně vést k přesnějším výsledkům, neboť s počtem kvantových hradel (úměrným ηq) současně roste (akumulovaná, výpočetní) chyba způsobená nepřesností v aplikaci každého elementárního hradla. Současně může s časem docházet k nárůstu chyby způsobené postupnou dekoherencí stavu

⁷⁴ kde přirozeně $\sum_k \theta_{k,p} = 1$, $\theta_{k,p}$ jsou reálné a $p(k)$ celočíselné parametry daného rozvoje,

$\eta \in \mathbb{N}$, $\eta > 3$ je řád rozvoje.

kvantového jádra a díky dalším jevům. Proto je třeba Δt_ε (nebo ekvivalentně – počet dílků q_0), ale také řád Trotterova rozvoje η volit s ohledem na všechny kvantový výpočet ovlivňující faktory tak, aby celková chyba $Er = Er(q, \eta)$ (daná jak diskretizační chybou ve formuli (293), tak chybou způsobenou akumulovanou nepřesností v aplikaci hradel, dekoherencí a dalšími procesy) byla minimální, nebo alespoň, aby byla „dostatečně optimální“ a počet použitých kvantových hradel byl, přirozeně, spíše menší než optimální, než větší.

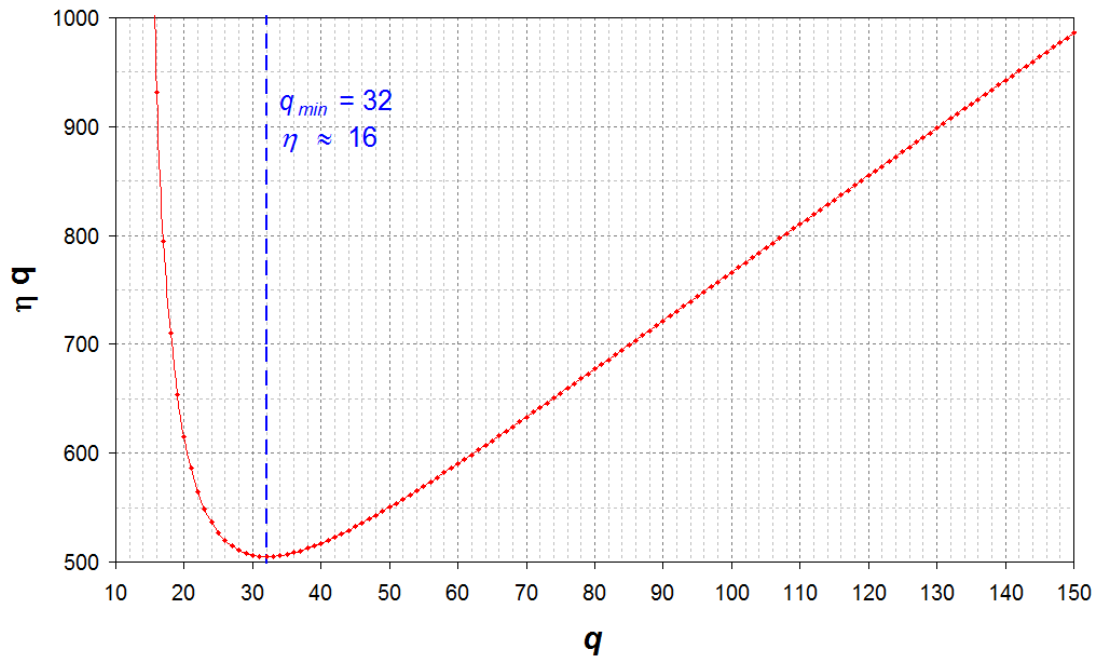
V práci [37] je uveden vztah popisující minimální η nezbytné pro dosažení celkové chyby v aproximaci evolučního operátoru (194) pomocí součinů q výrazů typu pravé strany (293) menší než ε . Odvození patrně vychází z úvahy, že v přiblížení prvního řádu je ε dáno součtem chyb z jednotlivých q aproximací a tyto jsou tedy rovné ε/q , pak je-li druhý člen v součtu na levé straně (293) roven přímo $\Delta t_\varepsilon^\eta$ (multiplikativní prefaktor lze zahrnout do ε) a $\Delta t_\varepsilon = \Delta t/q$, pak je třeba, aby platilo

$$\left(\frac{\Delta t}{q}\right)^\eta \leq \frac{\varepsilon}{q}, \quad (295)$$

tedy

$$\eta \geq \frac{\ln(\varepsilon/q)}{\ln(\Delta t/q)}, \quad (296)$$

Pro tuto hodnotu η je třeba hledat q tak, aby ηq bylo minimální (ηq určuje počet exponenciálních faktorů daných součinem levých stran výrazů (293) používaných k aproximaci evolučního operátoru). Závislost ηq na q pro případ $\Delta t = 2\pi/0,5$ (odpovídající v této práci provedeným simulacím algoritmu IPEA pro diagonalizaci KRCI hamiltoniánů molekuly SbH) a $\varepsilon = 10^{-6} \Delta t$ (odpovídající řádově rozlišení pro tyto simulace) uvádím v grafu 7.



Graf 7: Závislost množství expoenciálních faktorů ηq (a tedy i (až na multiplikativní násobek závislý na simulovaném systému a požadovaném počtu bitů výsledku, ale nezávislý na volbě Trotterova rozvoje (293)) počtu kvantových hradel) napočtu dílků q na které je rozdělen časový interval Δt parametrizující evoluční operátor (194). Pro $\varepsilon = 10^{-6} \Delta t$ a $\Delta t = 2\pi/0,5$ (odpovídá simulacím provedeným v této práci) se ukazuje jako optimální $q_{min} = 32$ a $\eta = 26$.⁷⁵

Studii zabývající se vlivem velikosti Δt_ε (resp. hodnoty q) na (ne)přesnost algoritmem IPEA zjištěné energie lze nalézt například v [7] (obrázek S2, graf a)), kde ovšem není současně studován vliv nepřesností v aplikaci hradel, nebo dalších faktorů díky nimž výpočetní chyba naopak roste s počtem hradel (a tedy $q\eta$).

⁷⁵ V této práci bylo ale „orákulum“ v metodě IPEA – evoluční operátor (194) aplikováno jako jediné l -qubitové hradlo, aniž by byl řešen jeho rozvoj do elementárních jedno a dvouqubitových hradel. To souvisí s faktem, že jsem vycházel z hospodárnějšího direct-mappingu při reprezentaci evolučního operátoru a jemu odpovídajícího kvantového registru b a studoval jiné aspekty algoritmů IPEA A a IPEA B (především závislost pravděpodobnosti úspěchu p_m na charakteru vstupního odhadu vlastního vektoru). Také je třeba zdůraznit, že graf 7 nezahrnuje vliv dekoherence, šumu a nepřesností hradel, jim odpovídající příspěvky (resp. jejich závislost na q) je třeba přičíst k chybě vnesené na ose y , vzniklé minimum se pak posune k nižším hodnotám q .

Druhé kvantování

V dalším uvažuji hamiltonián \hat{H} posaný formalismem druhého kvantování [38] ve tvaru

$$\hat{H} = \sum_{pq} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} V_{pqsr} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s, \quad (297)$$

kde p, q, r, s indexují jednočasticovou bázi stavů (v nerelativistickém případě spinorbitaly – obsazené i virtuální, v relativistickém bispinory – v závislosti na zvolené aproximaci buďto ryze elektronické (NPA), nebo případně i pozitronické). V případě numerických kvantově-chemických výpočtů je báze jednočasticových stavů konečná (její mohutnost označme M). h_{pq} a V_{pqsr} jsou obecně komplexní koeficienty (splňující (298)-(300)) – v případě nerelativistických výpočtů elektronových stavů molekuly v rámci BOA aproximace⁷⁶ pak má h_{pq} význam elementu matice jednoelektronových integrálů a platí pro něj vztah (301), kde \hat{T}_e je operátor kinetické energie elektronu a \hat{V}_{eN} operátor potenciální energie elektronu v poli pevně uložených jader (Coulombický atrakční operátor, tzn. zahrnuje pouze interakci jediného elektronu se všemi jádry). Podobně V_{pqsr} má v rámci nr-BOA popisu význam maticového elementu operátoru elektron-elektronové repulze, tedy pro něj platí (302).

$$h_{pq}^* = h_{qp}, \quad (298)$$

$$V_{pqsr}^* = V_{srpq}, \quad (299)$$

$$V_{pqsr} = V_{sqpr} = V_{prsq}, \quad (300)$$

⁷⁶ V dalším budu tento fyzikální model (plně nerelativistický a Born-Oppenheimerovský) označovat jako nr-BOA.

$$h_{pq} = \langle p | \hat{h} | q \rangle = \delta_{sz(p),sz(q)} \int_{R^3} \psi_p^*(\vec{r}) (\hat{T}_e + \hat{V}_{eN}) \psi_q(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (301)^{77,78}$$

$$V_{pqsr} = \langle pq | sr \rangle = \delta_{sz(p),sz(s)} \delta_{sz(q),sz(r)} \int_{R^3} \int_{R^3} \psi_p^*(\vec{r}_1) \cdot \psi_q^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_s(\vec{r}_1) \psi_r(\vec{r}_2) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2, \quad (302)$$

Operátor \hat{a}_p^+ představuje kreační operátor pro p -tý spinorbital (resp. obecně jednočásticový stav), \hat{a}_q pak anihilační operátor pro q -tý spinorbital (resp. obecně jednočásticový stav). V případě, že studujeme nerozlišitelné fermiony (např. elektrony) je třeba požadovat, aby pro každou dvojici $p, q \in \{1, 2, \dots, M\}$ platily antikomutační relace

$$\{\hat{a}_p^+, \hat{a}_q\} = \delta_{pq}, \quad (303)$$

$$\{\hat{a}_p, \hat{a}_q\} = 0, \quad (304)$$

$$\{\hat{a}_p^+, \hat{a}_q^+\} = 0, \quad (305)$$

Následující úvahy lze samozřejmě učinit pro zcela obecný operátor tvaru (297), kde koeficienty h_{pq} a V_{pqsr} splňují (298)-(300), bez ohledu na to, zda-li jde o hamiltonián elektronových stavů molekuly v rámci nr-BOA aproximace, Dirac-Coulombův hamiltonián molekuly v rámci BOA aproximace, popřípadě jiný operátor. Úvahy níže lze také snadno zobecnit i na příklad operátoru obsahujícího tří- a vícečásticové členy (počet kvantových hradel, které je třeba použít pro konstrukci

⁷⁷ kde $sz(p)$ je index spinové části spinorbitalu p , tedy $sz(p) \in \{\alpha, \beta\}$, $\psi_q(\vec{r}) \in L^2(R^3)$ je prostorovou částí q -tého molekulového spinorbitalu v bodě $\vec{r} \in R^3$, ψ_p^* je komplexně sdružená funkce k funkci ψ_p .

⁷⁸ Zobecnění výrazů (301) a (302) pro relativistický popis není náročné, druhá rovnost v těchto vztazích by byla nahrazena integrací přes prostorové i spinové proměnné (resp. sumací přes spinové proměnné) bispinorů a operátory kinetické, resp. potenciální energie nahrazeny svými relativistickými variantami.

odpovídajícího evolučního operátoru vystupujícího v metodě IPEA zůstane polynomiální, pouze se zvýší mocnina ve výrazu pro asymptotickou složitost vzhledem k počtu kvantových hradel).

Jordan-Wignerova transformace

Jordan-Wignerova transformace je zobrazení mezi algebrou A_Q Pauliho matic na prostoru $H_Q \cong C^{2^l}$ rozlišitelných⁷⁹ qubitů (uvažujme dále prostor l (rozlišitelných) qubitů, tedy algebra A_Q je generována⁸⁰ množinou (306)-(311))

$$1_2^{[1]} \otimes 1_2^{[2]} \otimes 1_2^{[3]} \otimes \dots \otimes 1_2^{[l]}, \quad (306)$$

$$\sigma_x^{[1]} \otimes 1_2^{[2]} \otimes 1_2^{[3]} \otimes \dots \otimes 1_2^{[l]}, \quad (307)$$

$$\sigma_y^{[1]} \otimes 1_2^{[2]} \otimes 1_2^{[3]} \otimes \dots \otimes 1_2^{[l]}, \quad (308)$$

$$\sigma_z^{[1]} \otimes 1_2^{[2]} \otimes 1_2^{[3]} \otimes \dots \otimes 1_2^{[l]}, \quad (309)$$

$$1_2^{[1]} \otimes \sigma_x^{[2]} \otimes 1_2^{[3]} \otimes \dots \otimes 1_2^{[l]}, \quad (310)$$

...

$$1_2^{[1]} \otimes 1_2^{[2]} \otimes 1_2^{[3]} \otimes \dots \otimes \sigma_z^{[l]}. \quad (311)$$

⁷⁹ V teorii kvantové informace jsou qubity uvažovány prakticky bez výjimky jako rozlišitelné (aby byl jejich stav adresně kontrolovatelný), v tomto odstavci je rozlišitelnost qubitů zdůrazněna, aby vynikl kontrast s nerozlišitelností částic, pro které uvažujeme diagonalizaci hamiltoniánu.

⁸⁰ Všechny prvky A_Q lze získat jako lineární kombinace součinů prvků z této množiny. Níže uváděná množina není minimální této vlastnosti, ale byla zvolena tak, aby obsahovala všechny „význačné“ prvky. Prvky A_Q jsou tedy (lineární kombinace) direktních součinů Pauliho matic působících na prostory jednotlivých qubitů.

a algebrou kreačních a anihilačních operátorů na Fockově prostoru $H_M \cong C^{2^l}$. Bázové vektory prostoru H_M necht' jsou indexovány l -bitovými řetězci udávajícími obsazovací čísla pro l různých jednočásticových stavů.

Jako příklad prostoru H_M uvedu Fockův prostor v případě popisu elektronových stavů molekuly H_2 v rámci nr-BOA přiblížení a pro $l = 4$ spinorbitaly ($[1] \cong 1\sigma_g\alpha$, $[2] \cong 1\sigma_g\beta$, $[3] \cong 1\sigma_u\alpha$, $[4] \cong 1\sigma_u\beta$) – pak je H_M izomorfní $C^{2^4} = C^{16}$ vektory kanonické báze tohoto prostoru mají interpretaci⁸¹ uvedenou vztahy (312)-(317),

$$|0011\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_1) \alpha(s_1) & \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_1) \beta(s_1) \\ \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_2) \alpha(s_2) & \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_2) \beta(s_2) \end{pmatrix} \cong |1\sigma_g^2 1\sigma_u^0\rangle, \quad (312)$$

$$|0101\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_1) \alpha(s_1) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_1) \alpha(s_1) \\ \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_2) \alpha(s_2) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_2) \alpha(s_2) \end{pmatrix} \cong |1\sigma_g^\alpha 1\sigma_u^\alpha\rangle, \quad (313)$$

$$|0110\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_1) \beta(s_1) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_1) \alpha(s_1) \\ \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_2) \beta(s_2) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_2) \alpha(s_2) \end{pmatrix} \cong |1\sigma_g^\beta 1\sigma_u^\alpha\rangle, \quad (314)$$

$$|1001\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_1) \alpha(s_1) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_1) \beta(s_1) \\ \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_2) \alpha(s_2) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_2) \beta(s_2) \end{pmatrix} \cong |1\sigma_g^\alpha 1\sigma_u^\beta\rangle, \quad (315)$$

⁸¹ Aby měly maticové reprezentace Pauliho operátorů v dalším textu obvyklý tvar, je nezbytné uvažovat ztotožnění

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (ZZ24a)$$

které je ovšem přesně opačné tomu, které se obvykle používá v teoretických pracech o kvantové teorii informace a kvantových počítačích a které je také použito na začátku této diplomové práce. Alternativou je označovat zaplněný spinorbital stavem $|0\rangle$ a vakantní stavem $|1\rangle$, nebo uvažovat jiný tvar Jordan-Wignerovy transformace.

$$|1010\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_1) \beta(s_1) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_1) \beta(s_1) \\ \psi_{1\sigma_g}(\vec{r}_2) \beta(s_2) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_2) \beta(s_2) \end{pmatrix} \cong |1\sigma_g^\beta 1\sigma_u^\beta\rangle, (316)$$

$$|1100\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_1) \alpha(s_1) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_1) \beta(s_1) \\ \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_2) \alpha(s_2) & \psi_{1\sigma_u}(\vec{r}_2) \beta(s_2) \end{pmatrix} \cong |1\sigma_g^0 1\sigma_u^2\rangle, (317)$$

Fockův prostor v rámci výše uvedených čtyř spinorbitalů ještě obsahuje vícečasticové stavy s jiným počtem částic než 2 – od vakuového stavu $|0000\rangle$ (319) přes čtyři stavy odpovídající popisu H_2^+ pomocí molekulových spinorbitalů H_2 (320)-(323), čtyři stavy odpovídající naopak popisu H_2^- pomocí molekulových spinorbitalů H_2 (324)-(327) až po ne vazebný stav odpovídající (van der Waalsovské) molekule H_2^{2-} $|1111\rangle$ (328).

$$|0000\rangle \cong |1\sigma_g^0 1\sigma_u^0\rangle, (319)$$

$$|0001\rangle \cong |1\sigma_g^\alpha 1\sigma_u^0\rangle, (320)$$

$$|0010\rangle \cong |1\sigma_g^\beta 1\sigma_u^0\rangle, (321)$$

$$|0100\rangle \cong |1\sigma_g^0 1\sigma_u^\alpha\rangle, (322)$$

$$|0100\rangle \cong |1\sigma_g^0 1\sigma_u^\alpha\rangle, (323)$$

$$|1110\rangle \cong |1\sigma_g^\beta 1\sigma_u^2\rangle, (324)$$

$$|1101\rangle \cong |1\sigma_g^\alpha 1\sigma_u^2\rangle, (325)$$

$$|1011\rangle \cong |1\sigma_g^2 1\sigma_u^\beta\rangle, (326)$$

$$|0111\rangle \cong |1\sigma_g^2 1\sigma_u^\alpha\rangle, (327)$$

$$|1111\rangle \cong |1\sigma_g^2 1\sigma_u^2\rangle, (328)$$

Hamiltonián (297) komutuje s operátorem počtu elektronů (329) a proto stavy odpovídající H_2^{2+} , H_2^+ , H_2 , H_2^- a H_2^{2-} budou tvořit 5 různých diagonálních bloků (pořadě s) dimenzí 1, 4, 6, 4 a 1. S ohledem na to, že koeficienty h_{pq} a V_{pqsr} uvažujeme jako integrály v bázi molekulových spinorbitalů pro molekulu H_2 , budou bloky odpovídající jinému počtu částic aproximativní (a zejména pro vyšší počet částic) až nefyzikální (reprezentací hamiltoniánu pro energeticky nejnižší elektronové stavy daných systémů).

$$\hat{n} = \sum_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p, \quad (329)$$

Akce kreačního operátoru \hat{a}_p^+ na vektor kanonické báze $|j_1 j_2 j_3 j_4\rangle$ prostoru H_M ((312)-(328)) má za následek buď nulový vektor (je-li $j_p = 1$, (330)), nebo (je-li $j_p = 0$) vektor, který je popsán stejnou kombinací j_q pro $q \neq p$, pouze s $j_p = 1$ (331).

$$\hat{a}_p^+ |j_1 j_2 \dots j_{p-1} 1 j_{p+1} \dots j_M\rangle = 0, \quad (330)$$

$$\hat{a}_p^+ |j_1 j_2 \dots j_{p-1} 0 j_{p+1} \dots j_M\rangle = |j_1 j_2 \dots j_{p-1} 1 j_{p+1} \dots j_M\rangle, \quad (331)$$

Podobně, akce anihilačního operátoru \hat{a}_p na vektor kanonické báze $|j_1 j_2 j_3 j_4\rangle$ prostoru H_M ((312)-(328)) má za následek buď nulový vektor (pokud $j_p = 0$) nebo vektor lišící se od původního pouze v indexu j_p (původně $j_p = 1$, po působení anihilačního operátoru $j_p = 0$).

$$\hat{a}_p |j_1 j_2 \dots j_{p-1} 0 j_{p+1} \dots j_M\rangle = 0, \quad (332)$$

$$\hat{a}_p |j_1 j_2 \dots j_{p-1} 1 j_{p+1} \dots j_M\rangle = |j_1 j_2 \dots j_{p-1} 0 j_{p+1} \dots j_M\rangle, \quad (333)$$

Uvážíme-li, že tyto relace ((330)-(333)) splňují (na prostoru qubitů $H_Q \cong C^{2^M}$) „šplhací“ („ladder“) operátory vytvořené z Pauliho matic dle předpisů

$$\hat{\sigma}_+^{[k]} \equiv \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x^{[k]} + i \hat{\sigma}_y^{[k]}), \quad (334)$$

$$\hat{\sigma}_-^{[k]} \equiv \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x^{[k]} - i \hat{\sigma}_y^{[k]}), \quad (335)$$

je zřejmé, že konstrukce reprezentace kreačního operátoru pro k -tý spinorbital (nebo obecněji k -tý jednočásticový stav) v kvantovém počítači bude vycházet z hradla $\hat{\sigma}_+^{[k]}$ a podobně, konstrukce anihilačního operátoru pro k -tý spinorbital bude vycházet z hradla $\hat{\sigma}_-^{[k]}$. Pro splnění antikomutačních relací (303)-(305) je třeba hledat vhodné „doplnění“ těchto hradel. Jednu z možností představuje práce [39], která vychází z Bauerovy-Weylovy konstrukce. Kreační operátor \hat{a}_p^+ pro p -tý jednočásticový stav je v ní reprezentován pomocí vztahu (337) a podobně anihilační operátor \hat{a}_p pomocí vztahu (338).

$$\phi: A_M \rightarrow A_Q, \quad (336)$$

$$\phi(\hat{a}_p^+) = \left(\prod_{k=1}^{p-1} (-\hat{\sigma}_z^{[k]}) \right) \hat{\sigma}_+^{[k]} = (-1)^{p-1} \hat{\sigma}_z^{[1]} \hat{\sigma}_z^{[2]} \dots \hat{\sigma}_z^{[p-1]} \hat{\sigma}_+^{[p]}, \quad (337)$$

$$\phi(\hat{a}_p) = \left(\prod_{k=1}^{p-1} (-\hat{\sigma}_z^{[k]}) \right) \hat{\sigma}_-^{[k]} = (-1)^{p-1} \hat{\sigma}_z^{[1]} \hat{\sigma}_z^{[2]} \dots \hat{\sigma}_z^{[p-1]} \hat{\sigma}_-^{[p]}, \quad (338)$$

Zobrazení ϕ je *-isomorfismus algeber. Tedy speciálně platí

$$\phi(c_1 \hat{A} + c_2 \hat{B}) = c_1 \phi(\hat{A}) + c_2 \phi(\hat{B}), \quad (339)$$

$$\phi(\hat{A} \cdot \hat{B}) = \phi(\hat{A}) \cdot \phi(\hat{B}), \quad (340)$$

kde \cdot označuje operaci skládání operátorů (jinde v textu je tečka vynechávána). Pro odvození vztahu pro reprezentaci hamiltoniánu (297) a evolučního operátoru (194) nejprve naznačíme, co jakých výrazů bude rozvinut $\phi(\hat{H})$, pokud $p \leq q - 2$

$$\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q) = (-1)^{p+q} \hat{\sigma}_+^{[p]} \hat{\sigma}_z^{[p]} \hat{\sigma}_z^{[p+1]} \dots \hat{\sigma}_z^{[q-1]} \hat{\sigma}_-^{[q]}, \quad (341)$$

$$\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q) = (-1)^{p+q+1} \hat{\sigma}_+^{[p]} \hat{\sigma}_z^{[p+1]} \dots \hat{\sigma}_z^{[q-1]} \hat{\sigma}_-^{[q]}, \quad (342)^{82}$$

kde tři tečky nahrazují (případný) řetězec Pauliho matic „z“ působících na qubity s indexem rostoucím postupně z hodnoty $p+2$ k hodnotě $q-2$. Pokud $p = q - 1$, pak

$$\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q) = - \hat{\sigma}_+^{[p]} \hat{\sigma}_z^{[p]} \hat{\sigma}_-^{[q]} = \hat{\sigma}_+^{[p]} \hat{\sigma}_-^{[q]}, \quad (343)$$

a pro $p = q$

$$\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_p) = \hat{\sigma}_+^{[p]} \hat{\sigma}_-^{[p]} = \frac{1}{2} (\hat{1}_2^{[p]} + \hat{\sigma}_z^{[p]}), \quad (344)$$

Konečně, podobně pro $p = q + 1$ platí

$$\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q) = - \hat{\sigma}_z^{[p-1]} \hat{\sigma}_+^{[p]} \hat{\sigma}_-^{[p-1]} = - \hat{\sigma}_z^{[p-1]} \hat{\sigma}_-^{[p-1]} \hat{\sigma}_+^{[p]} = \hat{\sigma}_-^{[q]} \hat{\sigma}_+^{[p]}, \quad (345)$$

a pro $p \geq q + 2$ platí

$$\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q) = (-1)^{p+q} \hat{\sigma}_z^{[q]} \hat{\sigma}_-^{[q]} \hat{\sigma}_z^{[q+1]} \dots \hat{\sigma}_z^{[p-1]} \hat{\sigma}_+^{[p]}, \quad (346)$$

$$\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q) = (-1)^{p+q+1} \hat{\sigma}_-^{[q]} \hat{\sigma}_z^{[q+1]} \dots \hat{\sigma}_z^{[p-1]} \hat{\sigma}_+^{[p]}, \quad (347)$$

Na základě úvahy o vytknutí h_{pq} (jsou-li tyto koeficienty reálné) ve výrazu (297) se lze oprávněně zabývat následujícím vztahem (kde bylo použito definic (334) a (335))

⁸² Neboť pro Pauliho matice platí

$$\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_+ = \hat{\sigma}_+ = - \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_z, \quad (348)$$

$$\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_- = - \hat{\sigma}_- = - \hat{\sigma}_- \hat{\sigma}_z, \quad (349)$$

$$\begin{aligned}
2 \cdot \phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q + \hat{a}_q^+ \hat{a}_p) &= (-1)^{p+q+1} \hat{\sigma}_x^{[p]} \hat{\sigma}_z^{[p+1]} \dots \hat{\sigma}_z^{[q-1]} \hat{\sigma}_x^{[q]} + \\
&+ (-1)^{p+q+1} \hat{\sigma}_y^{[p]} \hat{\sigma}_z^{[p+1]} \dots \hat{\sigma}_z^{[q-1]} \hat{\sigma}_y^{[q]}
\end{aligned} \quad (350)$$

Podobně, pro transformaci součinu kreačních a anihilačních operátorů $\hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_r \hat{a}_s$ odpovídajících dvoučásticovým členům v hamiltoniánu (297) lze odvodit vztah (pro $p > q > r > s$)

$$\begin{aligned}
\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_r \hat{a}_s) &= (-1)^{p+q+r+s} \hat{\sigma}_z^{[s]} \hat{\sigma}_-^{[s]} \hat{\sigma}_z^{[s+1]} \hat{\sigma}_z^{[s+2]} \dots \hat{\sigma}_z^{[r-1]} \hat{\sigma}_-^{[r]} \times \\
&\times \hat{\sigma}_z^{[q]} \hat{\sigma}_+^{[q]} \hat{\sigma}_z^{[q+1]} \dots \hat{\sigma}_z^{[p-1]} \hat{\sigma}_+^{[p]}
\end{aligned} \quad (351)$$

$$\begin{aligned}
\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_r \hat{a}_s) &= (-1)^{p+q+r+s+1} \hat{\sigma}_-^{[s]} \hat{\sigma}_z^{[s+1]} \hat{\sigma}_z^{[s+2]} \dots \hat{\sigma}_z^{[r-1]} \hat{\sigma}_-^{[r]} \times \\
&\times \hat{\sigma}_+^{[q]} \hat{\sigma}_z^{[q+1]} \dots \hat{\sigma}_z^{[p-1]} \hat{\sigma}_+^{[p]}
\end{aligned} \quad (352)$$

$$\phi(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_r \hat{a}_s) = (-1)^{p+q+r+s+1} \hat{\sigma}_-^{[s]} \left(\prod_{k=s+1}^{r-1} \hat{\sigma}_z^{[k]} \right) \hat{\sigma}_-^{[r]} \hat{\sigma}_+^{[q]} \left(\prod_{k=q+1}^{p-1} \hat{\sigma}_z^{[k]} \right) \hat{\sigma}_+^{[p]}. \quad (353)$$

Podrobnější úpravy výrazu (353) a klasifikace vzniklých členů jsou podrobně popsány v [40], proto zde uvedu, že v dalším bude třeba se zabývat výrazy (které vzniknou dosazením (334) a (335) do (353) a případným přesčítáním přes indexy p, q, r, s s ohledem na symetrie ve výrazech V_{pqsr} v hamiltoniánu (297)) tvaru operátoru na prostoru qubitů H_Q

$$\hat{A}_{a,b,c,d}^{s_\alpha, s_\beta, s_\gamma, s_\delta} = \hat{\sigma}_a^{[s_\alpha]} \left(\prod_{k=s_\alpha+1}^{s_\beta-1} \hat{\sigma}_z^{[k]} \right) \hat{\sigma}_b^{[s_\beta]} \times \hat{\sigma}_c^{[s_\gamma]} \left(\prod_{k=s_\gamma+1}^{s_\delta-1} \hat{\sigma}_z^{[k]} \right) \hat{\sigma}_d^{[s_\delta]}, \quad (354)$$

kde horní index v zápisu operátoru na levé straně ($s_\alpha, s_\beta, s_\gamma, s_\delta$) představuje dle velikosti uspořádanou čtveřici různých celočíselných indexů $0 < s_\alpha < s_\beta < s_\gamma < s_\delta < 1$ a dolní index (a, b, c, d) představuje čtveřici indexů, každý z dvouprvkové množiny $\{x, y\}$. Snadno se nahlédne (a v tom smyslu je i zapsána pravá strana (354)), že výrazy (354) je účelné uvažovat jako součiny operátorů tvaru

$$\hat{A}_{a,b}^{s_\alpha, s_\beta} = \hat{\sigma}_a^{[s_\alpha]} \left(\prod_{k=s_\alpha+1}^{s_\beta-1} \hat{\sigma}_z^{[k]} \right) \hat{\sigma}_b^{[s_\beta]}, \quad (355)$$

tedy

$$\hat{A}_{a,b,c,d}^{s_\alpha, s_\beta, s_\gamma, s_\delta} = \hat{A}_{a,b}^{s_\alpha, s_\beta} \times \hat{A}_{c,d}^{s_\gamma, s_\delta}, \quad (356)$$

Pro další úpravy jsou klíčové identity popisující násobení Pauliho matic (operátorů) (357), z něj plynoucí (použitím Taylorova rozvoje exponenciály) imaginární exponenciálu z Pauliho matic (358) a z direktního součinu Pauliho matic (359)

$$\hat{\sigma}_\mu \hat{\sigma}_\nu = \delta_{\mu\nu} \hat{1}_2 + i \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{\sigma}_\lambda, \quad (357)$$

$$\exp(i\theta \hat{\sigma}_\mu) = \cos(\theta) \cdot \hat{1}_2 + i \sin(\theta) \cdot \hat{\sigma}_\mu, \quad (358)$$

$$\exp(i\theta \otimes_{k=1}^n \sigma_{\mu(k)}^{[k]}) = \cos(\theta) \cdot \hat{1}_2 + i \sin(\theta) \cdot \otimes_{k=1}^n \sigma_{\mu(k)}^{[k]}. \quad (359)$$

Pomocí Taylorova rozvoje exponenciály taky můžeme ověřit platnost vztahu

$$\hat{U}^+ \exp(i\tau \hat{A}) \hat{U} = \exp(i\tau \hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}), \quad (360)$$

kde $\tau \in R$ bude v dalším výraz typu $v\Delta\tau$, kde v je podíl malých celých čísel vyplývající z algebraických úprav a $\Delta\tau$ pochází z vyjádření evolučního operátoru (194), \hat{A} je hermitovský operátor, v našem případě Pauliho matice (obvykle), nebo direktní součin Pauliho matic, \hat{U} je unitární operátor, v našem případě součin jedno- a dvouqubitových hradel (obvykle ve tvaru (370), (377), (378), (371), ...) a \hat{U}^+ označuje hermitovsky sdružený operátor k \hat{U} . Dle vztahu (360) lze také psát

$$\hat{V}^+ \hat{U}^+ \exp(i\tau \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha]} \hat{\sigma}_z^{[s_\gamma]}) \hat{U} \hat{V} = \exp(i\tau \hat{V}^+ \hat{U}^+ \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha]} \hat{\sigma}_z^{[s_\gamma]} \hat{U} \hat{V}), \quad (361)$$

kde \hat{U} budu volit tak, aby platilo (362) (konstrukčně ukáži, s pomocí (357)-(359), že je to možné) a \hat{V} je tedy možné konstruovat podobně, aby platilo (363)

$$\hat{U}^+ \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha]} \hat{U} = \hat{\sigma}_a^{[s_\alpha]} \left(\prod_{k=s_\alpha+1}^{s_\beta-1} \hat{\sigma}_z^{[k]} \right) \hat{\sigma}_b^{[s_\beta]} = \hat{\sigma}_a^{[s_\alpha]} \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha+1]} \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha+2]} \dots \hat{\sigma}_z^{[s_\beta-1]} \hat{\sigma}_b^{[s_\beta]}, \quad (362)$$

$$\hat{V}^+ \hat{\sigma}_z^{[s_\gamma]} \hat{V} = \hat{\sigma}_c^{[s_\gamma]} \left(\prod_{k=s_\gamma+1}^{s_\delta-1} \hat{\sigma}_z^{[k]} \right) \hat{\sigma}_d^{[s_\delta]} = \hat{\sigma}_c^{[s_\gamma]} \hat{\sigma}_z^{[s_\gamma+1]} \hat{\sigma}_z^{[s_\gamma+2]} \dots \hat{\sigma}_z^{[s_\delta-1]} \hat{\sigma}_d^{[s_\delta]}, \quad (363)$$

takovým postupem vzniká na pravé straně (361) výraz, který je exponenciálou imaginárního násobku výrazu (354) a postupnou aplikací hradel odpovídajících těmto výrazům (ve vhodném pořadí a mnohokrát) lze získat (libovolně přesnou) aproximaci evolučního operátoru pro metody IPEA (nebo obecně simulace kvantových systémů). Vycházejíc z identit (364)-(367) lze ukázat, že operátory \hat{U} a \hat{V} lze vytvořit jako součiny $O(l)$ jedno a dvouqubitových operátorů,

$$\exp(-i\theta \hat{\sigma}_\mu) \hat{\sigma}_\nu \exp(i\theta \hat{\sigma}_\mu) = \cos(2\theta) \cdot \hat{\sigma}_\nu + \sin(2\theta) \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{\sigma}_\lambda, \quad (364)^{83}$$

speciálně pro $\theta = \pi/4$ pak

$$\exp\left(-i \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_\mu\right) \hat{\sigma}_\nu \exp\left(i \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_\mu\right) = \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{\sigma}_\lambda, \quad (365)$$

a pro $\theta = -\pi/4$ analogicky

$$\exp\left(i \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_\mu\right) \hat{\sigma}_\nu \exp\left(-i \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_\mu\right) = -\varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{\sigma}_\lambda, \quad (366)$$

Nyní uvažujme případ $\mu \neq \nu$, $\lambda \in \{x, y, z\}$ (v libovolném vztahu k μ a ν), pro dva libovolné indexy qubitů k a n platí

⁸³ Ve vztahu (364) $\mu, \nu, \lambda \in \{x, y, z\}$ a $\mu \neq \nu$. Pokud $\mu = \nu$, byla by na pravé straně (364) opět sn, neboť každá hermitovská matice komutuje se svoji exponenciálou.

$$\exp\left(-i \Sigma \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_\mu^{[k]} \hat{\sigma}_\lambda^{[n]}\right) \hat{\sigma}_\nu^{[k]} \exp\left(i \Sigma \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_\mu^{[k]} \hat{\sigma}_\lambda^{[n]}\right) = \Sigma \varepsilon_{\mu\nu\omega} \hat{\sigma}_\omega^{[k]} \hat{\sigma}_\lambda^{[n]}. \quad (367)^{84}$$

Nyní, postup konstrukce \hat{U} je zřejmý – uvažuji případ, kdy konstruuji \hat{U} odpovídající řetězci začínajícímu i končícímu Pauliho maticí s dolním indexem „x“, případ pro y se získá jednoduchou záměnou $x \leftrightarrow y$ a případnou odpovídající záměnou znamének, je-li $s_\beta - s_\alpha - 1$ (tj. počet operátorů typu $\hat{\sigma}_z^{[k]}$ ve výrazu (362)) liché, pak:

1. Vycházím z operátoru $\hat{B}_0 = \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha]}$. (368)

2. $\hat{B}_1 = \hat{U}_1^+ \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha]} \hat{U}_1 = \hat{\sigma}_x^{[s_\alpha]}$, (369)

$$\text{kde } \hat{U}_1 = \exp\left(i \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_y^{[s_\alpha]}\right). \quad (370)$$

3. Opakuji $(s_\beta - s_\alpha - 1)$ krát (pro k od $k_{min} = 2$ do $k_{max} = s_\beta - s_\alpha$) (označím

$$\hat{U}_k = \exp\left(i (-1)^k \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha]} \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha+k-1]}\right), \quad (371)$$

$$\hat{B}_k = \hat{U}_k^+ \hat{B}_{k-1} \hat{U}_k. \quad (372)$$

4. Aplikuji operátor $\hat{U}_{s_\beta-s_\alpha+1} = \exp\left(i \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha]} \hat{\sigma}_x^{[s_\beta]}\right)$, (373)

$$\hat{B}_{s_\beta-s_\alpha+1} = \hat{U}_{s_\beta-s_\alpha+1}^+ \hat{B}_{s_\beta-s_\alpha} \hat{U}_{s_\beta-s_\alpha+1}, \quad (374)$$

5. Dle identit (364)-(367) platí

$$\hat{B}_{s_\beta-s_\alpha+1} = \hat{\sigma}_x^{[s_\alpha]} \left(\prod_{k=s_\alpha+1}^{s_\beta-1} \hat{\sigma}_z^{[k]} \right) \hat{\sigma}_x^{[s_\beta]}, \quad (375)$$

$$\hat{U} = \hat{U}_1 \hat{U}_2 \cdots \hat{U}_{s_\beta-s_\alpha+1}, \quad (376)^{85}$$

⁸⁴ Kde $\Sigma \in \{-1; +1\}$ je znaménko volené obvykle tak, aby $\Sigma \varepsilon_{\mu\nu\omega} = +1$, tedy „fáze“ před součinem operátorů na pravé straně v (367) byla kladná (pak tedy $\Sigma = \varepsilon_{\mu\nu\omega}$).

⁸⁵ Je třeba upozornit na fakt, že na qubitové registry budou operátory (kvantová hradla) \hat{U}_k aplikovány v pořadí zprava doleva, tedy pro k jdoucí od $k_{min} = s_\beta - s_\alpha + 1$ po $k_{max} = 1$ (následně hradlo

Je-li $s_\beta - s_\alpha - 1$ sudé aplikuje se v druhém kroku postupu výše namísto operátoru \hat{U}_1 ve tvaru (370) operátor

$$\hat{U}_1 = \exp\left(-i \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_x^{[s_\alpha]}\right). \quad (377)$$

A ve čtvrtém kroku pak operátor

$$\hat{U}_{s_\beta - s_\alpha + 1} = \exp\left(-i \frac{\pi}{4} \hat{\sigma}_z^{[s_\alpha]} \hat{\sigma}_x^{[s_\beta]}\right). \quad (378)$$

Rozklad evolučního operátoru

Způsob impelentace „orákula“ v podobě evolučního operátoru \hat{U} (194) (popř. (197)) na prostoru H_Q (tedy reprezentace operátoru působícího na H_M uvnitř kvantového počítače, jehož kvantové jádro je popsáno Hilbertovým prostorem H_Q) je tedy založen na postupné aplikaci hradel \hat{U}_k , \hat{V}_k , $\exp(i \tau_n \hat{\sigma}_z^{[s]})$, \hat{U}_k^+ a \hat{V}_k^+ pro jednotlivé členy výrazu (297) tak jak bylo odvozeno v předchozích odstavcích. Protože se vychází při tomto „rozdělení na jednotlivé členy“ z Trotterova-Suzukiho aproximativního rozvoje do η -tého řádu, je třeba tuto aplikaci provést přibližně 2η -krát (resp. právě tolikrát, kolik determinuje konkrétní formule pro Trotterův rozvoj do η -tého řádu) s koeficienty τ_n determinovanými konkrétní Trotter-Suzukiho formulí.

Pro reprezentaci imaginární exponenciály z reálného násobku jediné kombinace operátorů typu $\hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_r \hat{a}_s$ tedy postačuje $O(l)$ dvou- a jednoqubitových

$\exp(i \tau_l \hat{\sigma}_x^{[s_\alpha]})$, $\tau_l \in R$ a pak hermitovsky sdružené operátory (hermitovsky sdružená kvantová hradla) aplikovány v pořadí pro k jdoucí od $k_{min} = 1$ po $k_{max} = s_\beta - s_\alpha + 1$).

hradel⁸⁶. Protože hamiltonián (297) těchto výrazů obsahuje celkem $O(l^4)$, má aplikace evolučního operátoru odpovídajícího hamiltoniánu (297) v přiblížení Trotterova rozvoje η -tého řádu asymptotickou složitost $O(\eta l^5)$ v počtu (dvoqubitových⁸⁷) hradel. Pakliže optimální η neroste exponenciálně s l , lze tedy tvrdit, že (každý) algoritmus obsahující nanejvýš polynomiální (v l) počet opakování aplikace evolučního operátoru je efektivně proveditelný na kvantovém počítači o $l+w$ qubitech (kde w je malé celé číslo odpovídající registrům pro zaznamenání výsledku měření bitového rozvoje fáze v algoritmu IPEA nebo registrům pro extrakci informace při obecnější simulaci kvantového systému).

1.4 Konfigurační interakce

1.4.1 Nerelativistická CI

Metoda konfigurační interakce (CI) vychází z konstrukce aproximace vlnové funkce stacionárních stavů vícečásticového systému (řešení $|\psi_n\rangle$ rovnice pro vlastní čísla typu

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (379)$$

kde \hat{H} je hermitovský operátor s definičním oborem hustým v Hilbertově prostoru H_M studovaného systému M (380), $|\psi_n\rangle \in H_M$ je vektorem (obvykle normalizovaným (381)) z Hilbertova prostoru H_M a $E_n \in R$ je odpovídající vlastní číslo⁸⁸),

⁸⁶ Multiplikační konstanta nepřevyšuje 28, jak se nahlédne rozpisem (353) do (354) a spojením odpovídajících členů pro jiné kombinace indexů p, q, r, s . Studium možného dolního odhadu pro tuto multiplikační konstantu jsem zatím neprováděl, ale pro budoucí výzkum může být zajímavé.

⁸⁷ Z hlediska počtu jednoqubitových není asymptotická složitost horší a tedy ani z hlediska celkového počtu jedno a dvoqubitových hradel.

⁸⁸ S fyzikálním významem energie systému M v rámci popisu daným hamiltoniánem a ve stacionárním stavu popsaném stavovým vektorem $|\psi_n\rangle \in H_M$.

pomocí lineární kombinace součinů předem pevně zvolených jednočásticových funkcí (závislých na prostorové i spinové souřadnici) antisymetrizovaných, respektive symetrizovaných přes souřadnice (prostorové i spinové) identických fermionů resp. bosonů. Podrobně je metoda CI popsána v [41]-[49].

$$H_M = \otimes_{k=1}^F \text{Antisym} \left(\otimes_{p=1}^{F_k} L^2(R^3) \otimes C^{2S_k+1} \right) \otimes_{w=1}^B \text{Sym} \left(\otimes_{p=1}^{F_w'} L^2(R^3) \otimes C^{2S_w'+1} \right), \quad (380)^{89}$$

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1. \quad (381)$$

Pokud bychom vycházeli z úplné báze jednočásticových funkcí, bylo by možné ze všech jejich součinů z prostoru (380) vytvořit úplnou bázi (380) a diagonalizací \hat{H} (379) v této bázi získat přesné hodnoty energií E_n a tvary stacionárních vlnových funkcí $|\psi_n\rangle$. Pro praktické výpočty je však třeba vycházet z jednočásticových bází konečné mohutnosti. Pokud jsou v rámci jednočásticové báze dané mohutnosti sestaveny všechny přípustné součiny z prostoru (380), hovoříme o „úplné konfigurační interakci“ (angl. Full-CI, FCI), pokud jsou vybrány pouze některé součiny, hovoříme o „omezené konfigurační interakci“ (angl. Limited CI, LCI).

V případě *ab initio* kvantově chemických výpočtů je neobvyklejší variantou výpočtů CI případ, kdy systémem M je molekula, respektive její elektronové vnitřní stupně volnosti a \hat{H} odpovídá nr-BOA popisu, tedy plně nerelativistickému popisu pohybu elektronů v poli pevně uložených jader. Pak jsou výše zmiňované „částice“ elektrony (tedy nerozlišitelné fermiony se spinovým číslem $s = 1/2$) a prostor (380) je prostorem

$$H_M = \text{Antisym} \left(\otimes_{p=1}^N L^2(R^3) \otimes C^2 \right), \quad (382)$$

⁸⁹ Pro systém sestávající z F skupin fermionů (v rámci každé skupiny nerozlišitelných, se spinem S_k a počtem F_k v rámci každé skupiny) a B skupin bosonů (v rámci každé skupiny nerozlišitelných se spinem S_w' a počtem F_w' v rámci každé skupiny).

kde N je počet elektronů molekuly M .

Plně antisymetrizované součiny jednočasticových bázových funkcí⁹⁰ pro elektrony (tedy bázové funkce prostoru (382)) se označují jako Slaterovy determinanty a lze pro ně psát vztah

$$\langle y_1, y_2, \dots, y_N | \Psi_A \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \phi_{a(1)}(y_1) & \phi_{a(2)}(y_1) & \cdots & \phi_{a(N)}(y_1) \\ \phi_{a(1)}(y_2) & \phi_{a(2)}(y_2) & \cdots & \phi_{a(N)}(y_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{a(1)}(y_N) & \phi_{a(2)}(y_N) & \cdots & \phi_{a(N)}(y_N) \end{pmatrix}, \quad (383)$$

kde $y_k = (\vec{r}_k, \xi_k)$ jsou souřadnice k -tého elektronu, $\vec{r}_k \in R^3$ prostorová, $\xi_k \in \{-1/2; +1/2\}$ spinová, A představuje řetězec navzájem různých indexů $a(1) < a(2) < \dots < a(N)$, kde $a(k) \in \{1, 2, \dots, m\}$ (m je mohutností báze spinorbitalů) pro každé $k \in \{1, 2, \dots, N\}$ a $\phi_p \in L^2(R^3) \otimes C^2$ je p -tý spinorbital, uvažovaný ve tvaru

$$\phi_p(y) = \varphi_p(\vec{r}) \chi_{\omega(p)}(\xi), \quad (384)$$

kde $\varphi_p \in L^2(R^3)$ je prostorovou částí ((molekulovým) orbitalem) a $\chi_{\omega(p)} \in H_{spin, 1/2} \cong C^2$ spinovou částí, $\omega: \{1, 2, \dots, m\} \rightarrow \{\alpha, \beta\}$ je zobrazení přiřazující indexu spinorbitalu index spinové části (lze použít zjednodušení, kdy se uvažují jen dvě možnosti odpovídající kanonické bázi C^2 (bázové vektory jsou pak ztotožňovány s vlastními funkcemi operátoru z -tové komponenty spinu $\hat{s}_z = (1/2) \hat{\sigma}_z$)).

Funkce $\phi_p \in L^2(R^3) \otimes C^2$ obvykle uvažujeme z nějakého ortonormálního systému funkcí. Potom jsou také všechny navzájem různé funkce typu (383) ortonormální. V případě metody CI se systém funkcí $\phi_p \in L^2(R^3) \otimes C^2$ volí obvykle jako výsledek řešení Hartree-Fockových rovnic pro stejný systém (molekulu M ve

⁹⁰ Jednočasticové bázové funkce pro elektrony v rámci plně nerelativistického (dvoukomponentního, 2c) popisu se označují jako „spinorbitaly“.

stejné geometrii). V některých případech však může být vhodnější vycházet z řešení MCSCF rovnic, nebo použitý jiný typ spinorbitalů.

Jako příklad lze uvést Slaterovy determinanty pro popis elektronových stavů molekuly vodíku H_2 v rámci nr-BOA popisu (312)-(317). Hamiltonián má v případě nr-BOA popisu (jako diferenciální operátor na prostoru (382)) tvar

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{T}_i + \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^C \hat{V}_{iA}^{eN} + \hat{V}^{NN}, \quad (385)$$

kde členy mají v sumách mají po řadě obvyklý význam operátoru kinetické energie elektronů, operátoru potenciální energie párové interakce elektron-jádro a na elektronech nezávislého operátoru elektrostatické repulze mezi jádry.

Speciální tvar spinorbitalů je možný v případě, vychází-li se při jejich získávání ze „spin-restricted“ Hartree-Fockových rovnic (ať již varianty pro uzavřené slupky – RHF, nebo varianty ROHF (v nejobecnějším případě varianta „average of configurations“)), v takovém případě lze spinorbitaly rozdělit do dvojic

$$\phi_{2p-1}(y) = \varphi_p(\vec{r}) \chi_\alpha(\xi), \quad (386)$$

$$\phi_{2p}(y) = \varphi_p(\vec{r}) \chi_\beta(\xi), \quad (387)$$

sdílejících tutěž prostorovou část.

Samotná metoda konfigurační interakce je založená na diagonalizaci maticové reprezentace hamiltoniánu (385) na prostoru s bází složenou ze Slaterových determinantů tvaru (383). Jde tedy o úlohu diagonalizace hermitovské matice, jejíž rozměr je dán počtem Slaterových determinantů, které uvažujeme pro popis vlnové funkce a pro její maticové elementy platí

$$H_{AB} = \langle \psi_A | \hat{H} | \psi_B \rangle \equiv \int_{R^3} \int_{R^3} \cdots \int_{R^3} \psi_A^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \cdot H \psi_B(y_1, y_2, \dots, y_N) dV, \quad (388)$$

kde dV odpovídá $3N$ -rozměrné Lebesguově míře pro integraci přes všech N prostorových proměnných a sumě přes všech N spinových proměnných. Pro výpočet výrazů typu (388) existují díky součinovému tvaru jednotlivých členů v rozvoji Slaterových determinantů (a navíc díky ortonormalitě spinorbitalů) jednoduchá pravidla obsahující pouze troj a šestinásobné integrály přes prostorové proměnné (Slater-Condonova pravidla, [48],[49],[38])

Tento tvar (385) se také označuje jako „hamiltonián M v rámci nr-BOA popisu v prvním kvantování“. V rámci formalismu druhého kvantování [38] se uvažuje hamiltonián (385) ve tvaru (297).

Zatímco, jak bylo popsáno výše (v kapitole „Mapping Hilbertových prostorů“), pro kvantový algoritmus pro diagonalizaci maticové reprezentace hamiltoniánu plné konfigurační interakce (FCI) je nejpřirozenější reprezentace tohoto hamiltoniánu v rámci kvantového jádra kvantového počítače pomocí formalismu „Direct-mapping“, v případě omezené konfigurační interakce (LCI) je obvykle volena reprezentace pomocí formalismu „Compact mapping“. Neboť se v praktické části práce (str. 130-178) budu zabývat výhradně LCI (ovšem v relativistickém případě, viz následující kapitola), uvedu níže nejběžnější varianty LCI:

1. **CID metoda** – v rozvoji vlnové funkce se uvažuje Slaterův determinant s obsazením všech molekulových spinorbitalů „odspoda“ (dle výstavbového principu od energeticky nejnižších po vyšší) a všechny z možné biexcitace, které z něj lze získat (v rámci excitací do prostoru molekulových orbitalů o energii nižší než zadaná hodnota, nebo do omezeného počtu molekulových orbitalů nad nejvyšším obsazeným orbitalem)
2. **CISD metoda** – podobně jako CID, ale uvažují si i monoexcitace. **Ve třetí kapitole takto zjednodušeně označuji i CI výpočty vycházející z rozvoje kde jsou uvažovány všechny možné mono- a biexcitace, ale pouze z prostoru energeticky nejvyšších molekulových orbitalů (přesněji specifikuji na obrázku 24 a v tabulce 3).**
3. **CI-CAS(n,n)** – Pro sudý počet elektronů a „spin-restricted“ formalismus uvažují prvních $(N-n)/2$ molekulových orbitalů vždy obsazených $N-n$ elektrony a zbylých n elektronů umístěných libovolným způsobem

v rámci n molekulových orbitalů (MO) následujících v pořadí dle rostoucí energie za $(N-n)/2$ -tým MO.

1.4.2 Relativistická CI, KRCI [50]

Uvažujeme-li Dirac-Coulombův, nebo Dirac-Coulomb-Breitův hamiltonián popisující používaný v relativistické kvantové chemii (tento hamiltonián pro N elektronů působí na direktní součin N čtyřkomponentních funkcí z $L^2(R)$), tedy operátor (389) a jemu odpovídající rovnici pro vlastní čísla (390) (Dirac-Coulombovu, Dirac-Coulomb-Breitovu)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[c \left(\hat{\alpha}_i \cdot \hat{p}_i \right) + \hat{\beta}_i mc^2 - \hat{\phi}_{nuc} \right] + \sum_{i < j} \hat{V}_{ij} + \hat{V}_{NN}, \quad (389)$$

Podrobný popis členů hamiltoniánu (389) je uveden hned na začátku následující kapitoly na příkladě molekuly SbH. V případě konfigurační interakce, kde namísto nr-BOA hamiltoniánu (385) vycházím z hamiltoniánu, který má v prvním kvantování tvar (389) hovořím o „Relativistické CI“. Slaterovy determinanty mají v tomto případě tvar (383), pouze jednočásticové funkce $\phi_{a(k)}$ odpovídají bispinorům, tedy čtyřkomponentním funkcím tvaru

$$\phi_{a(k)} = \begin{pmatrix} \phi_{a(k),L\alpha} \\ \phi_{a(k),L\beta} \\ \phi_{a(k),S\alpha} \\ \phi_{a(k),S\beta} \end{pmatrix}, \quad (390)$$

kde $\phi_{a(k),L\alpha}$, $\phi_{a(k),L\beta}$, $\phi_{a(k),S\alpha}$, $\phi_{a(k),S\beta} \in L^2(R^3)$, první dvě komponenty se běžně označují v literatuře [50] jako „velká komponenta“ ($L = \text{Large}$) a druhé dvě jako „malá komponenta“ ($S = \text{Small}$). První a třetí komponenta bispinoru (390) odpovídají vlastní funkci projekce spinu na třetí osu a tak jsou označeny jako „ α “, zbylé dvě jako „ β “.

Pro další klasifikaci metod používám termínu „Kramers-restricted“, který označuje situaci analogickou „spin-restricted“ bázi molekulových spinorbitalů v nerelativistickém dvokomponentním případě. V čtyřkomponentním, relativistickém případě se zavádí operátor časové inverze vztahem

$$\hat{\kappa} = -i \hat{\Sigma}_y \hat{\kappa}_0, \quad (391)$$

kde $\hat{\Sigma}_y$ je operátorem y-ové komponenty spinu (v Diracově reprezentaci daný 4x4 maticí (392)) a $\hat{\kappa}_0$ je oprátorem komplexního sdružení (díky němu je pak operátor časové inverze $\hat{\kappa}$ antiunitárním operátorem (tj. antilineární⁹¹ a unitární operátor))

$$\hat{\Sigma}_y = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_y & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (392)$$

V práci [50] je provedena analýza působení operátoru časové inverze (391) na různé členy Dirac-Coulombovy respektive Dirac-Coulomb-Breitovy rovnice a zmíněn teorém aplikovatelný na soustavu Dirac-Hartree-Fockových rovnic (Hartree-Fockovy rovnice vycházející z hamiltoniánu (389)) – pro systém s poločíselným spinem v absenci vnějších vektorových potenciálů jsou energetické hladiny alespoň dvakrát degenerované a každá degenerace je sudo-násobná.

Kramerův pár je dvojicí navzájem ortogonálních bispinorů ψ_p, ψ_p^- takových, že platí

⁹¹ Operátor \hat{A} se označuje za anti-lineární, pokud splňuje

$$\hat{A}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1^* \hat{A}(\psi_1) + c_2^* \hat{A}(\psi_2), \quad (393)$$

kde ψ_1, ψ_2 jsou funkce z definičního oboru \hat{A} , $c_1, c_2 \in C$ komplexní čísla a hvězdička u c_1^* a c_2^* značí komplexní sdružení.

$$\hat{K} \psi_p = \psi_p^-, \quad (394)$$

$$\hat{K} \psi_p^- = -\psi_p, \quad (395)$$

jeden ze členů páru se poté označuje jako „A“ a druhý jako „B“. Operace časové inverze se v dvoukomponentním nerelativistickém případě redukuje na současnou změnu spinové části z α na β (a naopak) a změnu směru třetí komponenty momentu hybnosti (díky komplexnímu sdružení) a případnou změnu znaménka. Časová inverze tedy v nerelativistickém případě vytváří Kramerův pár mezi $1s \alpha$ a $1s \beta$ spinorbitaly pro atom vodíku, ale $2p_1 \alpha$ spinorbital spojuje s $2p_{-1} \beta$ spinorbitalem.

Kramers-restricted formalismus je analogií „spin-restricted“ formalismu v případě nerelativistickém. V případě čtyřkomponentního Dirac-Coulomb(-Breit) výpočtu naznačuje takový výpočet ve kterém figurují páry molekulových bispinorů přesně splňujících vztahy (394) a (395). Pokud se jedná o výpočet řešení Dirac-Hartree-Fockových rovnic (DHF rovnic), hovoříme o metodě KR-DHF, pokud jsou takto získané bispinory použity k sestavení Slaterových determinantů v rámci kterých je proveden výpočet konfigurační interakce, hovoříme o KR-CI (nebo KR-CI) výpočtu apod.

Až na klasifikaci jednočásticových stavů [50], fakt, že je třeba se omezit (při konstrukci Slaterových determinantů a v rámci „No-pair aproximace“ (NPA)⁹²) jen na řešení analogie Hartree-Fockových rovnic vyplývajících z hamiltoniánu (389),

⁹² Tato aproximace odpovídá modelu „Empty Dirac picture“, tedy představě, že potenciální „Diracovo moře“ pro pozitrony je prázdné. V rámci relativistické kvantové teorie molekul není dosud zcela zřejmé, jaký model je pro popis molekuly vhodnější. Je však zjevné, že popis vycházející z pevného počtu částic (elektronů) a neuvažující fotonové stupně volnosti je nezbytně omezený. Je zajímavostí, že popis mappingu Hilbertových prostorů „Direct mapping“ je sice nevhodným pro popis systémů s pevným počtem částic, ale byl by velice přínosným v případě, že bychom šli za rámce NPA aproximace a ve tvaru hamiltoniánu v druhém kvantování (297) uvažovali i členy odpovídající pozitronickým bispinorům (jde-li se za rámec NPA, anihilační operátory elektronických bispinorů lze považovat za kreační operátory pro pozitronické bispinory a naopak, to pak vede na interakci stavů obsahujících nejen N (zde $N = 52$) elektronů, ale $N+1$ elektronů a 1 pozitron, $N+2$ elektronů a 2 pozitrony, atd. Pokud bychom v Direct mappingu vyhradili řadu qubitů i pro fotonové stupně volnosti, otvírala by se tak cesta k poměrně robustnímu neporuchovému QED popisu vázaných stavů molekul.

Zajímavé pojednání na téma Dirac-Coulomb(-Breit)ova hamiltoniánu a QED lze najít v [50] i [57].

jimž odpovídá hodnota orbitální energie větší než $-mc^2$ (elektronická řešení) a proceduru výpočtu maticových elementů h_{pq} a V_{pqsr} (297) v reprezentaci hamiltoniánu v druhém kvantování je relativistický případ podobný nerelativistickému. Alespoň pokud jde o simulaci algoritmu IPEA, kde je evoluční operátor (194) reprezentován jediným l -qubitovým hradlem (skutečně jako „orákulum“). V případě, že uvažujeme simulaci algoritmu IPEA rozkladem evolučního operátoru (194) na elementární hradla, je nezbytné uvážit, že pro členy hamiltoniánu (194) v druhém kvantování nebude platit, že jsou nezbytně reálné, protože pro ně bude existovat složitější vyjádření než je uvedeno pod vztahem (297), vyplývající ze tvaru relativistického hamiltoniánu (389) a tedy je třeba uvažovat obecnější alternativu ke vztahu (350) apod.

Relativistické vlnové funkce jsou také obecně „více multireferenční“, neboť narušil od nerelativistického případu není CI-hamiltonián blokově diagonální vzhledem k rozdílu počtu elektronů v A -spinorbitalech a B -spinorbitalech ⁹³ (relativistické analogie α - a β -spinorbitalů), další „nárůst multireferenčnosti“ je způsoben vlivem spin-orbitálního štěpení i mimo výše popsanou neblokově-diagonální strukturu hamiltoniánu. Proto představuje například Direct-mapping v relativistickém případě menší plýtvání s prostorem než v nerelativistickém případě a proto je v relativistickém případě daleko důležitější vhodná volba vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ vlastního vektoru evolučního operátoru (194) odpovídajícího hledané fázi.

⁹³ V dalším klasifikuji jako „ A “ bispinor $s_{j_z} > 0$ a jako „ B “ bispinor $s_{j_z} < 0$. V případě $\pi_{1/2}$ orbitalů je tak ale stává, že „ B “ bispinor má převažující α -charakter, zatímco „ A “ bispinor převažující β -charakter. V případě $\sigma_{1/2}$ a $\pi_{3/2}$ orbitalů naopak „ A “ bispinor má převažující α -charakter a „ B “ bispinor převažující β -charakter.

2 Simulace kvantových výpočtů

(Relativistická CI (KRCD) – molekula SbH)

Jako příklad simulace *ab initio* kvantově chemického výpočtu pomocí kvantového algoritmu diagonalizace matic IPEA A byly provedeny výpočty základního a energeticky nejnižšího excitovaného elektronického stavu molekuly SbH v rámci relativistické konfigurační interakce odpovídající Dirac-Coulombově (DC) hamiltoniánu (396) a No-pair aproximaci (NPA)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[c \left(\hat{\alpha}_i \cdot \hat{p}_i \right) + \hat{\beta}_i^I mc^2 - \hat{\phi}_{nuc} \right] + \sum_{i < j} \hat{V}_{ij} + \hat{V}_{NN}, \quad (396)$$

kde $N = 52$ je počet elektronů molekuly SbH, c je rychlost světla v Bohrových atomových jednotkách (používaných v *ab initio* nerelativistických kvantově-chemických výpočtech, v nich číselně platí $\hbar = m = e_q = 1$, kde m je klidová hmotnost elektronu (i v (396)) a e_q elementární náboj), $\hat{\alpha}_i$ a $\hat{\beta}_i^I$ jsou Diracovy matice působící na bispinor i -tého elektronu (elektronová část vlnové funkce molekuly SbH je uvažována jako lineární kombinace antisymetrizovaných direktních součinů N bispinorů⁹⁴, tedy ve tvaru (397)), tedy platí (398)-(404), $\hat{\phi}_{nuc}$ je operátor potenciální energie elektronu v poli jader (H^+ , Sb^{51+}), \hat{V}_{ij} odpovídá interakci elektron-elektron a \hat{V}_{NN} interakci jádro-jádro.

$$|\psi\rangle \in Antisym_{f+} \left(\otimes_{i=1}^N \left(L^2(\mathbb{R}^3) \otimes C^4 \right) \right), \quad (397)$$

$$\hat{\alpha}_i = \left(\hat{\alpha}_{x,i}, \hat{\alpha}_{y,i}, \hat{\alpha}_{z,i} \right) = \hat{I}_4^{(1)} \otimes \hat{I}_4^{(2)} \otimes \dots \otimes \hat{I}_4^{(i-1)} \otimes \hat{\alpha} \otimes \hat{I}_4^{(i+1)} \otimes \hat{I}_4^{(i+2)} \otimes \dots \otimes \hat{I}_4^{(N)}, \quad (398)$$

⁹⁴ Respektive bispinorů, které náleží do „kladné části jednočasticového spektra“. Tj. prostor generovaný všemi řešeními Dirac-Hartree-Fockových (DHF) rovnic (DHF rovnice jsou Hartree-Fockovy rovnice odpovídající hamiltoniánu tvaru (396)), které odpovídají kladné energii (kladné pro hamiltonián, kde od matic $\hat{\beta}_i$ není odečtena jednotková matice, tj. pro hamiltonián (396) (respektive jemu odpovídající fockián) jde o řešení odpovídající $E > -mc^2$) – jak obsazených, tak virtuálních.

$$\hat{\beta}_i^I = \hat{\beta}_i - \hat{I}, \quad (399)$$

$$\hat{\beta}_i = \hat{I}_4^{(1)} \otimes \hat{I}_4^{(2)} \otimes \dots \otimes \hat{I}_4^{(i-1)} \otimes \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \otimes \hat{I}_4^{(i+1)} \otimes \hat{I}_4^{(i+2)} \otimes \dots \otimes \hat{I}_4^{(N)}, \quad (400)$$

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (401)$$

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (402)$$

$$\hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_y & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (403)$$

$$\hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_z \\ \hat{\sigma}_z & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (404)$$

V rámci Dirac-Coulombovy aproximace mají operátory mezičásticové interakce plně neretardovaný, skalární tvar direktního součinu kulově symetrického potenciálu závisícího na mezičásticové vzdálenosti r_{ij} a operátoru identity na spinové stupně volnosti všech částic \hat{I}

$$\hat{V}_{ij} = V(r_{ij}) \otimes \hat{I}, \quad (405)$$

kde $V(r_{ij})$ má v případě aproximace distribuce náboje částic i a j delta distribucemi tvar

$$V(r_{ij}) = \frac{1}{r_{ij}}, \quad (406)$$

program DIRAC [D] navíc umožňuje výpočty, ve kterých je v případě interakce elektron-jádro započtena korekce na konečné rozměry jádra⁹⁵ pro model Gaussovského rozdělení nábojové hustoty v jádře [51] , [52] (407), čemuž odpovídá elektrostatická potenciální energie tvaru (413).

$$\rho(R) = \rho_0 \exp(-\xi R^2), \quad (407)$$

kde $\rho(R)$ je objemová hustota náboje ve vzdálenosti R od středu jádra, R je vzdálenost od středu jádra, ρ_0 je parametr rozměru objemové hustoty náboje (odpovídá $\rho(0)$) vztahený k parametru ξ a celkovém náboji jádra ($e_q Z$) výrazem (408) a parametr ξ odpovídá násobku převrácené hodnoty středního kvadratického poloměru jádra $\langle R^2 \rangle$ podle vztahu (409).

$$\rho_0 = e_q Z \left(\frac{\xi}{\pi} \right)^{3/2}, \quad (408)$$

$$\xi = \frac{3}{2 \langle R^2 \rangle}. \quad (409)$$

$$\sqrt{\langle R^2 \rangle} = a_1 A^{1/3} + a_0, \quad (410)$$

$$a_0 = 0.570 \text{ fm}, \quad (411)$$

$$a_1 = 0.836 \text{ fm}, \quad (412)$$

$$V_{iA}(r_{iA}) = -\frac{Z_A}{r_{iA}} \operatorname{erf}(r_{iA} \sqrt{\xi}), \quad (413)$$

⁹⁵ Tato korekce je v relativistické kvantové chemii důležitá jak z důvodů fyzikálnosti modelu (u těžších atomů jsou vnitřní slupky lokalizovány tědňěji okolo jádra než u lehčích atomů a současně vlastní rozměr jádra je v případě těžších atomů větší), tak z důvodů stability a existence řešení (řešení (vlnové funkce) jednočásticového problému pro bodový zdroj mohou být (pro nejnižší hodnoty impulsmomentu) singulární).

Jak je poznamenáno v [1], použití tohoto hamiltoniánu (Dirac-Coulomb) nepředstavuje kvalitativně méně obecný přístup než použití Dirac-Coulomb-Breitova hamiltoniánu (DCB) s elektron-elektronovým interakčním členem ve tvaru

$$\hat{V}_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} \otimes \hat{I} - \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{\alpha}_i \cdot \hat{\alpha}_j}{r_{ij}} + \frac{(\vec{r}_{ij} \cdot \hat{\alpha}_i)(\vec{r}_{ij} \cdot \hat{\alpha}_j)}{r_{ij}^3} \right), \quad (411)^{96}$$

protože zahrnutí integrálů, které vyžaduje DCB hamiltonián navíc si v klasickém případě vyžaduje maximálně polynomiální nárůst časové komplexity v porovnání s DC hamiltoniánem. DC hamiltonián dobře popisuje skalární relativistické efekty a velkou část spin-orbitální interakce⁹⁷.

4-komponentní (4c) relativistický popis na úrovni DC hamiltoniánu byl zvolen, aby bylo ukázáno, že kvantový algoritmus nejen poskytuje podstatné urychlení jak nerelativistických, tak relativistických *ab initio* výpočetních problémů (využívajících diagonalizace velkých matic), ale poskytuje násobně snadnější (ve smyslu časové složitosti) přechod od nerelativistických výpočtů k relativistickým, jak s ohledem na reprezentaci dat (přirozeně komplexní aritmetika kvantového počítače, možnost

⁹⁶ Alternativně lze výraz upravit do tvaru (414) za pomoci identity pro skalární součin vektorových součinů (412), tedy (413).

$$\begin{aligned} (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot (\vec{c} \times \vec{d}) &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} a_j b_k c_l d_m = (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) a_j b_k c_l d_m \\ &= (\vec{a} \cdot \vec{c})(\vec{b} \cdot \vec{d}) - (\vec{a} \cdot \vec{d})(\vec{b} \cdot \vec{c}), \quad \forall \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d} \in R^3 (ev. C^3) \end{aligned}, \quad (412)$$

$$r_{ij}^{-3} (\hat{\alpha}_i \times \vec{r}_{ij}) \cdot (\hat{\alpha}_j \times \vec{r}_{ij}) = r_{ij}^{-1} (\hat{\alpha}_i \cdot \hat{\alpha}_j) - r_{ij}^{-3} (\hat{\alpha}_i \cdot \vec{r}_{ij}) \cdot (\hat{\alpha}_j \cdot \vec{r}_{ij}), \quad (413)$$

$$\hat{V}_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} \otimes \hat{I} - \frac{\hat{\alpha}_i \cdot \hat{\alpha}_j}{r_{ij}} + \frac{1}{2} \frac{(\hat{\alpha}_i \times \vec{r}_{ij}) \cdot (\hat{\alpha}_j \times \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^3}, \quad (414)$$

⁹⁷ DCB hamiltonián navíc díky členu Gauntova typu $(-1/2 r_{ij}^{-1} (\hat{\alpha}_i \cdot \hat{\alpha}_j))$ také velkou část spin-other-orbit interakce [58,59,60].

compact mappingem snadno pokrýt hustší matice FCI hamiltoniánu), tak na implementaci hamiltoniánu pomocí kvantových hradel [1].

Molekula SbH byla pro testování kvantového algoritmu pro diagonalizaci vybrána z toho důvodu, že mezi jejím základním elektronovým stavem $X 0^+$ ($\Omega = 0^+$) a (energeticky degenerovaným) dubletem excitovaných elektronových stavů $A 1_+$, $A 1_-$ ($\Omega = +1, -1$) je poměrně malá energetická separace, která vzniká jako „čistě molekulární jev“ (trojici stavů $X 0^+$, $A 1_+$, $A 1_-$ odpovídající disociační křivky mají stejnou disociační limitu a nabývají stejné hodnoty energie i v limitě sjednoceného atomu) v důsledku spin-orbitální interakce (na úrovni HF popisu „štěpení hladin π -molekulových orbitalů touto interakcí, na úrovni FCI popisu pak jde o štěpení tripletní hladiny $^3\Sigma^-$ na trojici stavů $X 0^+$, $A 1_+$, $A 1_-$). Pro dobrý kvantitativní popis tohoto štěpení hladin je nezbytný jak dobrý popis relativistických efektů, tak dobrý popis statické i dynamické elektronové korelace.

Pro simulace kvantového algoritmu diagonalizace hamiltoniánu z metody limitované CI byl pro každý bod disociační křivky (tj. pro řadu hodnot mezijaderné vzdálenosti $R = R(\text{Sb-H})$) proveden výpočet DHF rovnic (varianta average-of-configurations „Kramers-restricted“ (KR-DHF) (pro konfigurace⁹⁸ $\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^x \pi_{3/2}^y$, kde⁹⁹ $x+y=2$), která představuje 4-komponentní Dirac-Coulomb (4c-DC) analogii k average-of-configurations ROHF rovnicím v nerelativistické kvantové chemii) v bázi atomových orbitalů pro Sb pocházející od Dyalla (triple-dzeta + valenční korelačně-konzistentní funkce, celkově 28s funkcí, 21p funkcí, 15d funkcí a 1f funkce) a cc-pVTZ báze pro H (z EMSL basis set library). Získané molekulové

⁹⁸ Při popisu elektronových konfigurací uvádím jen hraniční MO, tj. HOMO-1, HOMO, LUMO pro SbH a 5p pro Sb.

⁹⁹ To znamená, že metoda minimalizuje průměr z energií odpovídajících 6 konfiguracím - $\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^2 \pi_{3/2}^0$, $\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^0 \pi_{3/2}^2$, $\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^A \pi_{3/2}^A$, $\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^B \pi_{3/2}^B$, $\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^A \pi_{3/2}^B$, $\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^B \pi_{3/2}^A$. Tedy výpočet odpovídá smíšenému stavu s maticí hustoty

$$\hat{\rho} = \frac{1}{6} \sum_{\substack{x+y=2 \\ x,y \in \{0; A; B; 2\}}} |[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^x 5\pi_{3/2}^y \rangle \langle [Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^x 5\pi_{3/2}^y |, \quad (416)$$

kde kety (a odpovídající bra-vektory) s danou konfigurací odpovídají Slaterově determinantu sestavenému z bispinorů splňujících podmínku „Kramers restricted“.

bispinory odpovídající kladným¹⁰⁰ hodnotám energie (tj. „elektronická“ řešení¹⁰¹ DHF rovnic, dále označované jako MEB¹⁰²) pak byly použity jako jednočásticová báze funkcí pro sestavení Slaterových determinantů.

Fyzikální symetrie molekuly SbH v rámci 4c-DC hamiltoniánu je popsána (double-)grupou $C_{\infty v}^*$, nicméně pro výpočet v námi použité bázi atomových bispinorů je uvažována výpočetní symetrie odpovídající (double-)grupě C_{2v}^* na DHF úrovni a C_2^* na KRCI úrovni. Odpovídající tabulky charakterů uvádí obr. 21 a tabulka 2.

computational double-group C_{2v}^*										
character table										
Symbol	E	C_2	σ_x	σ_y	R					
A_1	1	1	1	1	1					
A_2	1	1	-1	-1	1					
B_1	1	-1	1	-1	1					
B_2	1	-1	-1	1	1					
$E_{1/2}$	2	0	0	0	-2					

physical double-group $C_{\infty v}^*$										
Symbol	E	$2C_{\infty}(\phi)$	$2C_{\infty}(2\phi)$...	$2C_{\infty}(p\phi)$...	$\infty\sigma_v$	R	$2C_{\infty}(\phi)$	R
$A_1(\Sigma^+)$	1	1	1	...	1	...	1	1	1	1
$A_2(\Sigma^-)$	1	1	1	...	1	...	-1	1	1	1
$E_1(\Pi)$	2	$2\cos(\phi)$	$2\cos(2\phi)$...	$2\cos(p\phi)$...	0	2	$2\cos(\phi)$	
$E_2(\Delta)$	2	$2\cos(2\phi)$	$2\cos(2 \cdot 2\phi)$...	$2\cos(2p\phi)$...	0	2	$2\cos(2\phi)$	
$E_3(\phi)$	2	$2\cos(3\phi)$	$2\cos(2 \cdot 3\phi)$...	$2\cos(3p\phi)$...	0	2	$2\cos(3\phi)$	
...
$E_{1/2}$	2	$2\cos(\phi/2)$	$2\cos(\phi)$...	$2\cos(p/2\phi)$...	0	-2	$-2\cos(\phi/2)$	
$E_{3/2}$	2	$2\cos(3/2\phi)$	$2\cos(3\phi)$...	$2\cos(3p/2\phi)$...	0	-2	$-2\cos(3/2\phi)$	
$E_{5/2}$	2	$2\cos(5/2\phi)$	$2\cos(5\phi)$...	$2\cos(5p/2\phi)$...	0	-2	$-2\cos(5/2\phi)$	
...
$E_{n/2}$	2	$2\cos(n/2\phi)$	$2\cos(n\phi)$...	$2\cos(np/2\phi)$...	0	-2	$-2\cos(n/2\phi)$	

Obr. 21: Tabulky charakterů dvojitých grup (double-group) $C_{\infty v}^*$ a C_{2v}^* . Nalevo od tabulky odpovídající $C_{\infty v}^*$ uvádím odpovídající označení elektronových stavů molekuly SbH v rámci 4c-DC popisu a jim odpovídající hodnoty komponenty celkového momentu hybnosti spojeného promítnutého na spojnici obou jader molekuly.

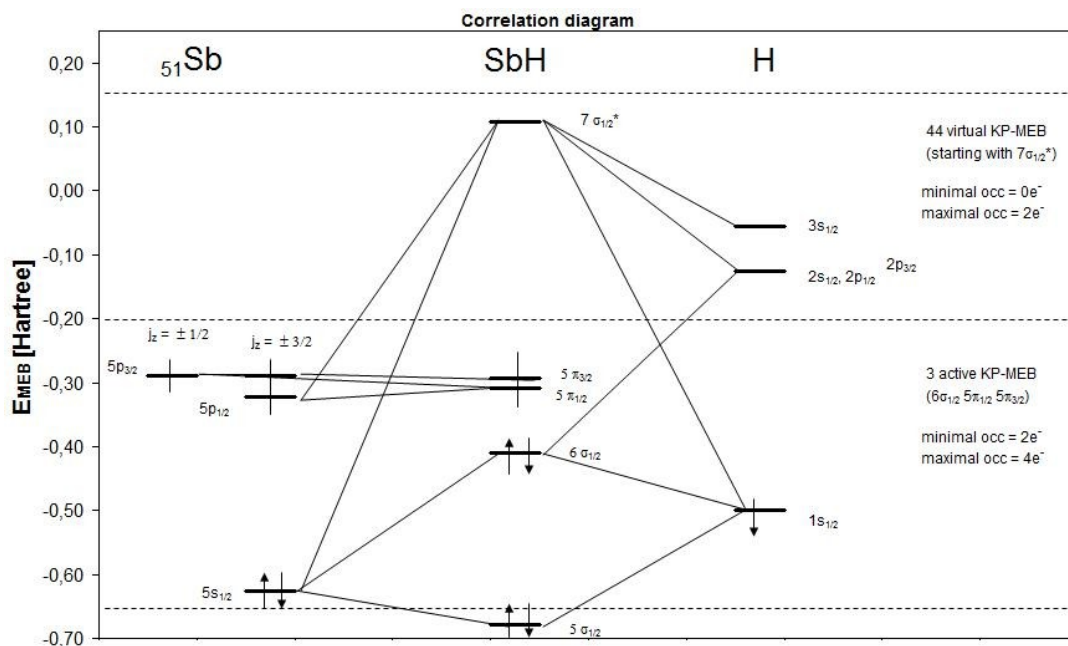
¹⁰⁰ Kladným za předpokladu, že v původním hamiltoniánu nebyly předem odečteny hmotové členy βmc^2 . Vzhledem k hamiltoniánu (396) by tedy šlo o „energie větší než $-mc^2$ “.

¹⁰¹ Molekulové spinorbitaly odpovídající záporným energiím, respektive „energiím menším než $-mc^2$ “ (vzhledem k hamiltoniánu (396)).

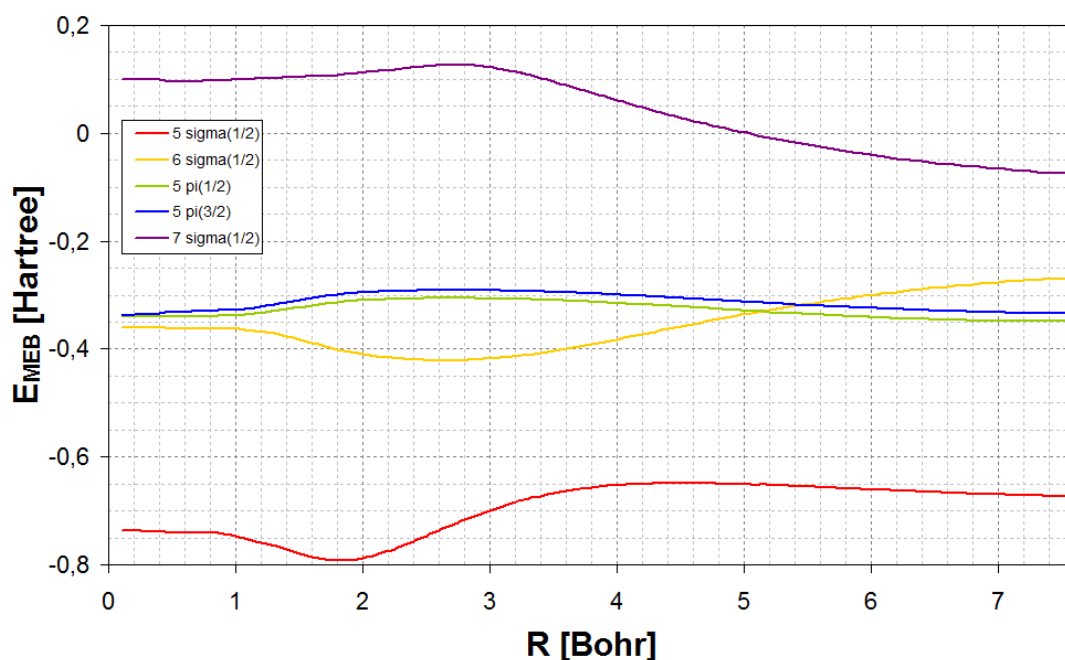
¹⁰² Molekulové elektronické bispinory.

Symbol	E	C_2	R
A	1	1	1
B	1	-1	1
$E_{1/2}$	1	i	-1
$E_{-1/2}$	1	$-i$	-1

Tabulka 2: Tabulka charakterů dvojité grupy C_2^*

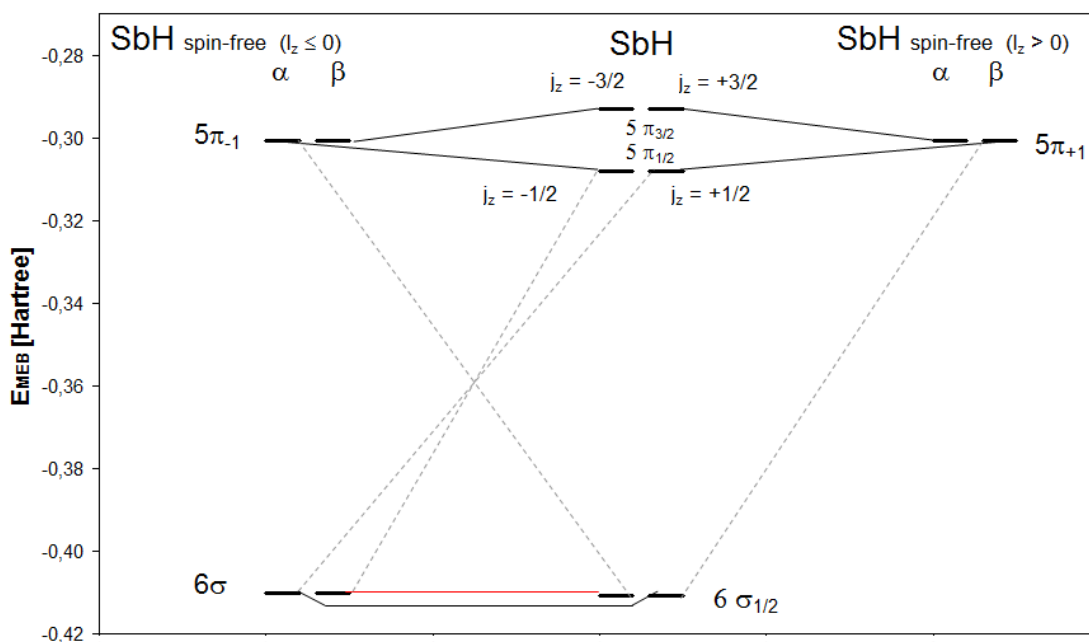


Obr. 22: Korelační diagram pro Kramerovy páry molekulových elektronických bispinorů (MEB) molekuly SbH pro average-of-configurations KR-DHF výpočet odpovídající konfiguracím $\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^x \pi_{3/2}^y$, kde $x+y=2$ a mezijaderné vzdálenosti $R = 3.3 a_0$. Levá část diagramu znázorňuje MEB atomu Sb pro average-of-configurations KR-DHF výpočet odpovídající konfiguraci $[\text{Cd}]5p_{1/2}^1 5p_{3/2(|j_z|=1/2)}^x 5p_{3/2(|j_z|=3/2)}^y$, kde $x+y=2$, pravá část diagramu znázorňuje MEB pro atom vodíku.



Graf 8: Závislost energií hraničních MEB molekuly SbH na mezijaderné vzdálenosti. MEB o nižší energii než $5\sigma_{1/2}$ nebo o vyšší energii než $7\sigma_{1/2}^*$ (vzhledem k rovnovážné geometrii) jsou ve studovaném rozsahu mezijaderných vzdáleností vždy energeticky nižší než $5\sigma_{1/2}$, respektive vyšší než $7\sigma_{1/2}^*$. Zajímavá situace nastává v oblasti Σ ($R \in (5,1 a_0; 5,5 a_0)$), kde dochází ke změně pořadí energií trojice MEB – $6\sigma_{1/2}$, $5\pi_{1/2}$ a $5\pi_{3/2}$ (pro $R < 5 a_0$ energeticky nejnižší $6\sigma_{1/2}$ při hodnotě $R_1 = 5,13 a_0$ dosahuje energie $5\pi_{1/2}$ a při hodnotě $R_2 = 5,45 a_0$ energie $5\pi_{3/2}$, pro $R < R_1$ je tedy pořadí MEB podle vzrůstající energie $6\sigma_{1/2}$, $5\pi_{1/2}$, $5\pi_{3/2}$, v oblasti $R \in (R_1; R_2)$ $5\pi_{1/2}$, $6\sigma_{1/2}$, $5\pi_{3/2}$ a pro $R > R_2$ pak $5\pi_{1/2}$, $5\pi_{3/2}$, $6\sigma_{1/2}$)¹⁰³.

¹⁰³ Hodnoty R_1 a R_2 byly zjištěny pomocí proložení hodnot pro energie MEB v oblasti S lineárními funkcemi (krok pro výpočet závislosti energie MEB na mezijaderné vzdálenosti v oblasti S byl zvolen jako $dR = 0,1 a_0$) a výpočtem průsečíků. Údaj o změně pořadí energií MEB při změně mezijaderné vzdálenosti je stěžejní pro konzistentní zadání konfigurace pro kterou je prováděn DHF výpočet i následné post-DHF výpočty. V oblasti Σ lze také pozorovat řadu skutečných i „vyhnutých“ křížení disociačních křivek molekuly SbH souvisejících se zmiňovanou změnou pořadí energií MEB.



Obr. 23: Korelační diagram ukazující souvislost mezi MEB při „spin-free“ výpočtu (4c-výpočet KR-DHF rovnic pro konfiguraci „open shell“ ($\sigma_{1/2}^2 \pi_{1/2}^x \pi_{3/2}^y$, kde $x+y=2$) kde jsou zahrnuty jen spinově nezávislé relativistické efekty (pomocí Dyallova hamiltoniánu [56], jak umožňuje option „SPINFREE“ v programu DIRAC [D]) a MEB vyplývajících z řešení KR-DHF rovnic s původním DC hamiltoniánem (dále DC-DHF). Tento diagram znázorňuje spin-orbitální štěpení čtyřnásobně degenerované hladiny 5π ($|5\pi_{-1}\rangle|\alpha\rangle$, $|5\pi_{-1}\rangle|\beta\rangle$, $|5\pi_{+1}\rangle|\beta\rangle$, $|5\pi_{+1}\rangle|\alpha\rangle$) na dvě dvojnásobně degenerované hladiny $5\pi_{1/2}$ a $5\pi_{3/2}$.¹⁰⁴

Vlnová funkce pro další KR-CI výpočty molekuly SbH byla poté konstruována s omezením na determinanty vymezené pomocí formalizmu GAS (Generalized Active Space), kde jsou MEB rozděleny do skupin podle energie na „frozen“ (vždy obsazené, několik energeticky nejnižších MEB) a prostory MEB pro které je

¹⁰⁴ Plné čáry v obr. 23 spojující hladiny ukazují na dominantní příspěvky při rozvoji MEB z DC-DHF výpočtů do báze MEB ze „spin-free“ výpočtů, přerušované čáry na minoritní příspěvky. Spin-orbitální interakce nejen štěpí energetické hladiny s $l_z > 0$ (π , δ , ϕ , ...), ale přispívá i ke změně energie hladin s $l_z = 0$ (σ). Navíc, jelikož mají DC-DHF bispinory pouze ostrou hodnotu j_z , nikoli zvláště l_z a s_z , jsou označeny „ σ “, „ π “, ... dále již jen orientační (ukazují na „převažující“ charakter orbitalu), $\sigma_{1/2}$ i $\pi_{1/2}$ MEB je dán lineární kombinací σ a π , podobně $\pi_{3/2}$ i $\delta_{3/2}$ lineární kombinací π a δ , atd. MEB $\sigma_{1/2}$ od $\pi_{1/2}$ odlišuje pouze velikost absolutní hodnoty rozvojových koeficientů při rozvoji do spin-free σ a π MEB. Relativistická symetrie $\sigma_{1/2}$ a $\pi_{1/2}$ (podobně jako $\pi_{3/2}$ a $\delta_{3/2}$ apod.) je stejná.

specifikováno kolik minimálně a kolik maximálně mohou obsahovat elektronů (akumulované hodnoty, tj. počet elektronů (minimální i maximální) se vztahuje k danému prostoru a všem, které leží energeticky pod ním). Tyto prostory jsou seřazeny podle vzrůstající energie. V některých případech lze od akumulovaných hodnot přejít k počtu minimálních a maximálních hodnot pouze v daném prostoru MEB. Několik příkladů rozdělení všech MEB na GAS prostory uvádím níže v obr. 24. Tabulka 3 pak uvádí odpovídající akumulované minimální a maximální počty elektronů obsazujících daný GAS a všechny energeticky nižší GAS (uvažují pouze elektrony, které nejsou součástí „frozen core“).

Verze LCI:

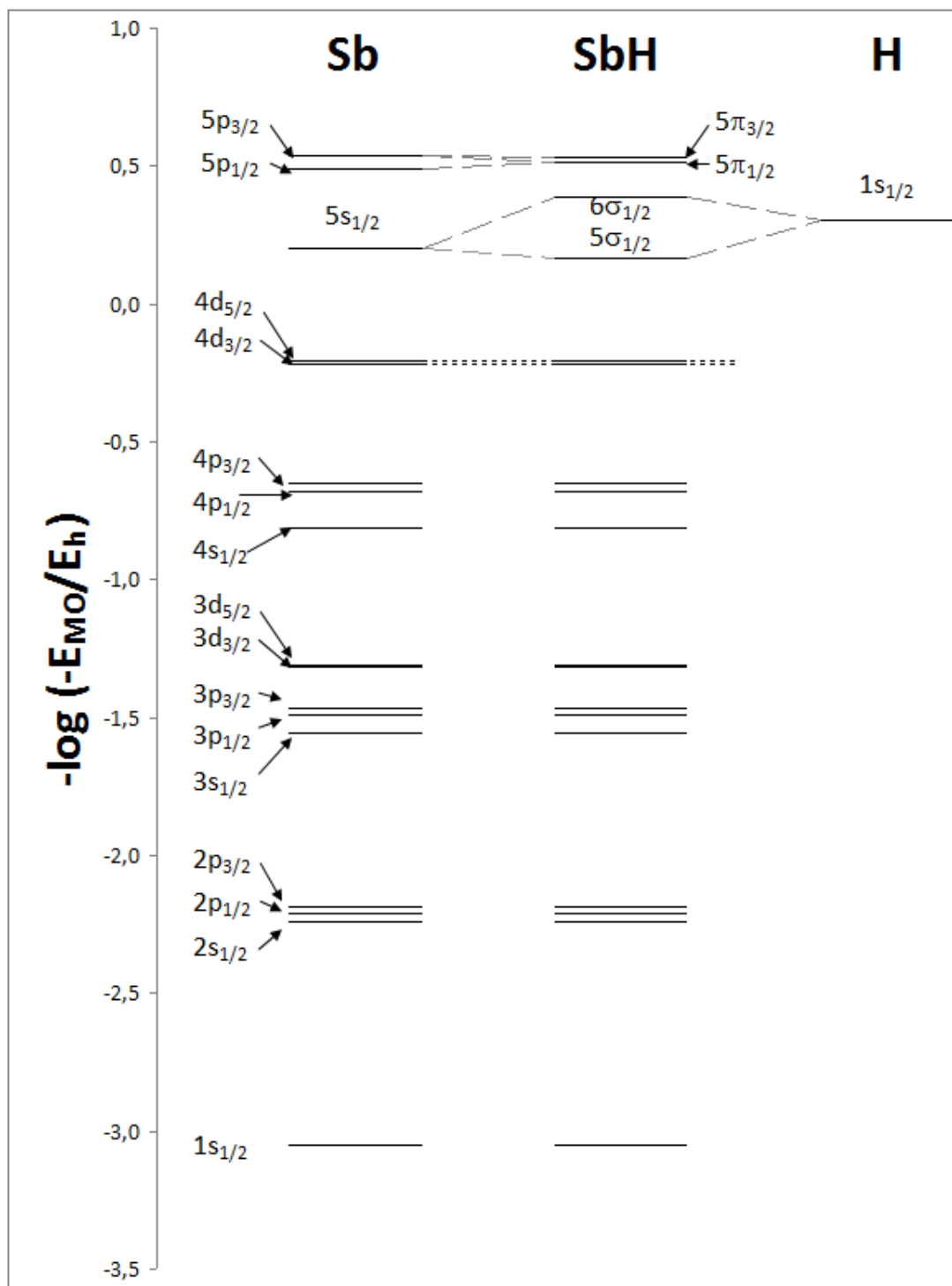
	CISD(n)	LCI(I)	LCI(II)	LCI(III)
GAS N	N = 2	N = 3	N = 4	N = 4
External				
GAS N-1	n KP	44 KP	24 KP	44 KP
⋮		$5\pi_{3/2}$	$5\pi_{3/2}$	$5\pi_{3/2}$
GAS III		$5\pi_{1/2}$	$5\pi_{1/2}$	$5\pi_{1/2}$
GAS II	$6\sigma_{1/2}^2$	$6\sigma_{1/2}$	$6\sigma_{1/2}$	$6\sigma_{1/2}$
	$5\sigma_{1/2}^2$	$5\sigma_{1/2}^2$	$5\sigma_{1/2}$	$5\sigma_{1/2}$
GAS I	25 KP (50 e ⁻)	24 KP (48 e ⁻)	23 KP (46 e ⁻)	23 KP (46 e ⁻)
Frozen Core				

Obr. 24: Diagram znázorňující rozdělení prostoru Kramerových párů pro MEB na GAS prostory za účelem vymezení typů excitací, které jsou pro daný CI rozvoj přípustné. Číslo n nabývalo při našich výpočtech hodnot 2, 3 a 46.

	min.e ⁻	max.e ⁻		min.e ⁻	max.e ⁻		min.e ⁻	max.e ⁻	
CISD(n)			LCI(I)			LCI(II) & LCI(III)			KP of MEBs
GAS N = GAS II	2	2	GAS N = GAS III	4	4	GAS N = GAS IV	6	6	virt.
			GAS II	2	4	GAS III	4	6	5 $\pi_{3/2}$
						GAS II	2	4	6 $\sigma_{1/2}$
									5 $\sigma_{1/2}$

Tabulka 3: Rozvoje CI specifikované podle obsazení GAS prostorů vymezených v obr. 24 specifikováno kolik minimálně a kolik maximálně mohou obsahovat elektronů (akumulované hodnoty, tj. počet elektronů (minimální i maximální) se vztahuje k danému prostoru a všem, které leží energeticky pod ním).¹⁰⁵

¹⁰⁵ Označení CISD(*n*) je zjednodušující, neboť narozdíl od skutečných metod CISD neuvazuje excitace z prostoru GAS I, pouze z prostoru GAS II. Přesto jej v dalším používám pro klasifikaci odpovídajících CI-rozvoji.



Obr. 25: Seznam řešení DHF rovnic pro molekulu SbH v rámci použité báze AO, hamiltoniánu (396) a pro mezijadernou vzdálenost $R = 3.3 a_0$

V případě, kterým se převážně věnovaly simulace IPEA algoritmu (LCI(I)) jsou MEB energeticky níže než 6 $\sigma_{1/2}$ (tedy prvních 24 Kramerových párů) vždy uvažovány jako obsazené (GAS I), Kramerovy páry 6 $\sigma_{1/2}$, 5 $\pi_{1/2}$ a 5 $\pi_{3/2}$ tvoří jeden ze „zobecněných aktivních prostorů“ (GAS II) a jsou obsazeny nejméně 2 elektrony (a nejvíce 4 elektrony (tj. všechny zbývající)) a konečně 44 virtuálních Kramerových párů (počínaje 7 $\sigma_{1/2}^*$) tvoří GAS obsahující maximálně 2 elektrony (a minimálně 0 elektronů).

Konstrukci matice KRCI hamiltoniánu (včetně tomu předcházejících výpočtů na bázi Hartree-Fockových rovnic (resp. average-of-configurations KR-DHF rovnic)) zajistil program DIRAC [D].

Zmíněné vymezení GAS vede na KR-CI rozvoj obsahující 29665 determinantů pro popis stavů o symetrii odpovídající ireducibilní reprezentaci A dvojité grupy C_2^* (Tuto symetrii má i základní stav $X 0^+$) a 29530 determinantů pro popis stavů o symetrii odpovídající ireducibilní reprezentaci B dvojité grupy C_2^* (Tuto symetrii má i excitovaný stav $A 1$). Tabulka 4 uvádí počty determinantů a elektronické KRCI energie pro další možná vymezení GAS pro mezijadernou vzdálenost $R = 3.3 a_0$.

$R = 3.255242 a_0$					
	$X 0^+$		$A 1$		
typ KRCI	počet det.	$E [E_0]$	počet det.	$E [E_0]$	$T_e [\text{cm}^{-1}]$
CISD(1)	1	-6481,1075953			
CISD(2)	4	-6481,1350703	2	-6481,1327511	509,0
CISD(3)	9	-6481,1350881	9	-6481,1327533	512,4
CISD(46)	2116	-6481,1422264	2070	-6481,1392179	660,3
CI-CAS(4,4)	36	-6481,1377626	32	-6481,1354706	503,0
LCI(I)	29665	-6481,1849777	29530	-6481,1821679	616,7
LCI(II)	31216	-6481,2213623	31092	-6481,2181921	695,8
LCI(III)	103856	-6481,2407232	103632	-6481,2380942	577,0
LCI(IV,2)	344	-6481,1411065	328	-6481,1385279	565,9
LCI(IV,6)	2680	-6481,1555688	2640	-6481,1523086	715,5
LCI(IV,12)	10384	-6481,1910797	10308	-6481,1887044	521,3
LCI(IV,18)	23128	-6481,2034074	23016	-6481,2007157	590,7
LCI(IV,24)	40912	-6481,2217402	40764	-6481,2185493	700,3
LCI(IV,44)	136592	-6481,2411254	136324	-6481,2384655	583,8
experiment					655,0
$R = 3.3 a_0$					
	$X 0^+$		$A 1$		
typ KRCI	počet det.	$E [E_0]$	počet det.	$E [E_0]$	$T_e [\text{cm}^{-1}]$
CISD(1)	1	-6481,1072789			
CISD(2)	4	-6481,1347532	2	-6481,132425	510,9
CISD(3)	9	-6481,1347722	9	-6481,132428	514,5
CISD(46)	2116	-6481,1377243	2070	-6481,135403	509,5
CI-CAS(4,4)	36	-6481,1419105	32	-6481,138892	662,6
LCI(I)	29665	-6481,1848362	29530	-6481,182018	618,5
LCI(II)	31216	-6481,2214035	31092	-6481,218231	696,3
LCI(III)	103856		103632		
LCI(IV,2)	344	-6481,1411042	328	-6481,138517	567,7
LCI(IV,6)	2680	-6481,1556533	2640	-6481,152382	718,0
LCI(IV,12)	10384	-6481,1912774	10308	-6481,188898	522,1
LCI(IV,18)	23128	-6481,2035415	23016	-6481,200845	591,8
LCI(IV,24)	40912	-6481,2217895	40764	-6481,218596	700,9
LCI(IV,44)	136592	-6481,2410631	136324	-6481,238398	584,9

Tabulka 4: Počet Slaterových determinantů v rámci NPA aproximace pro KRCI rozvoje odpovídajících ireducibilním koreprezentacím „A“ (tuto má základní stav $X 0^+$) a „B“ (tuto má energeticky nejnižší excitovaný stav, resp. energeticky degenerovaný dublet excitovaných stavů $A 1$) dvojité grupy¹⁰⁶ C_2^* . Hodnoty energie

¹⁰⁶ viz Tabulka 2 – dvojitá grupa C_2^* je grupa výpočetní symetrie použité v programu DIRAC pro KRCI výpočty heteronukleárních biatomik.

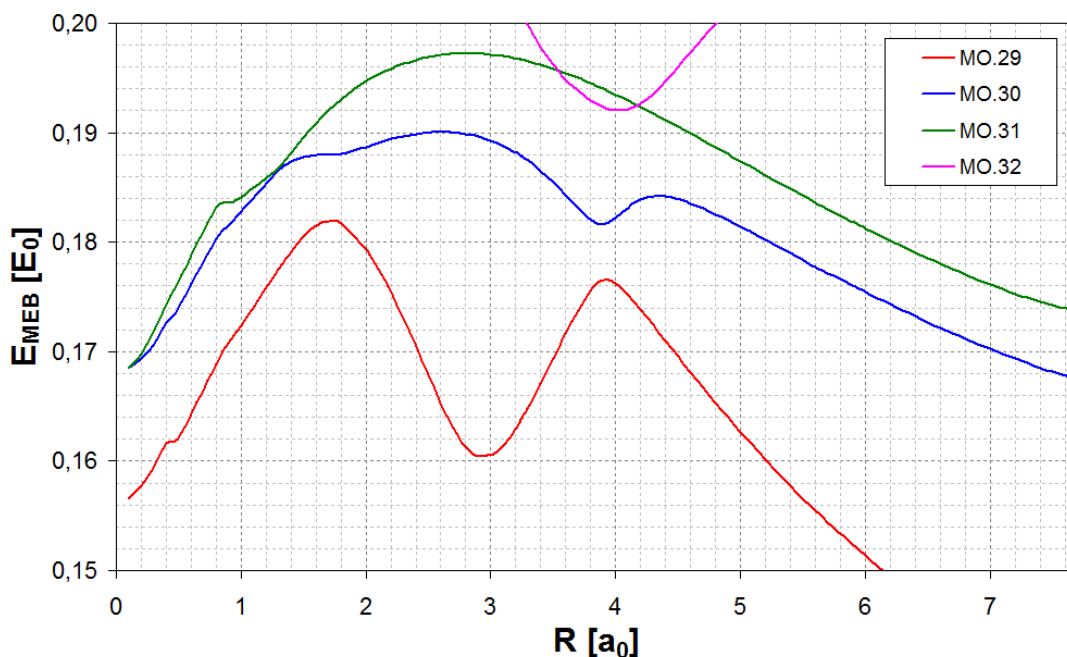
stavů $X\ 0^+$ a $A\ 1$ v Hartreeho atomových jednotkách (E_0 , viz seznam zkratk) a příčné excitační energie¹⁰⁷ $T_e(X\ 0^+ \rightarrow A\ 1)$ v jednotkách vlnočtu (cm^{-1}).

¹⁰⁷ Tj. Velikosti rozštěpení (v nerelativistickém případě, popř. v případě nezahrnutí spin-orbitální interakce původně trojnásobně degenerovaného) tripletu stavů $^3\Sigma^-$ ($L_z = 0, S = 1, S_z \in \{-1, 0, 1\}$) na $X\ 0^+$ ($J_z = 0$) a $A\ 1$ ($J_z \in \{-1, 1\}$).

Sb				SbH				
	[Cd] $5p_{1/2}^a 5p_{3/2,1/2}^x 5p_{3/2,3/2}^y$, kde $a+x+y=3$				[Cd] $5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^a 5\pi_{3/2}^b$, kde $a+b=2$			
	$a = 1$	$a = 2$	$a = z$		$a = x$ $b = y$	$a = 2$ $b = 0$	$a = 1$ $b = 1$	
	os	cs	3in6		os	cs	osII	
MO	E [E_0]	ΔE_1 [$10^{-3} E_0$]	ΔE_2 [$10^{-3} E_0$]	MO	E [E_0]	ΔE_1 [$10^{-3} E_0$]	ΔE_2 [$10^{-3} E_0$]	$E_{SbH} - E_{Sb}$ [$10^{-3} E_0$]
1s _{1/2}	-1127,0408335	7,88	-0,91	1s _{1/2}	-1127,0369070	3,81	1,35	3,93
2s _{1/2}	-174,9584627	7,16	-0,88	2s _{1/2}	-174,9545546	3,36	1,32	3,91
2p _{1/2}	-163,1945320	5,87	-0,86	2p _{1/2}	-163,1907848	2,51	1,32	3,75
2p _{3/2}	-153,9011001	7,81	-0,89	2p _{3/2}	-153,8974269	3,26	1,33	3,67
3s _{1/2}	-35,8031496	7,21	-0,87	2p _{3/2}	-153,8971389	4,31	1,31	3,96
3p _{1/2}	-30,9524274	5,09	-0,84	3s _{1/2}	-35,7994681	3,40	1,31	3,68
3p _{3/2}	-29,1883642	8,18	-0,87	3p _{1/2}	-30,9490332	2,02	1,30	3,39
3d _{3/2}	-20,7242929	6,83	-0,86	3p _{3/2}	-29,1853264	3,63	1,32	3,04
3d _{5/2}	-20,3628312	7,38	-0,87	3p _{3/2}	-29,1843922	4,46	1,28	3,97
4s _{1/2}	-6,4888957	7,56	-0,84	3d _{3/2}	-20,7212320	3,09	1,32	3,06
4p _{1/2}	-4,7684345	2,65	-0,78	3d _{3/2}	-20,7203499	3,22	1,29	3,94
4p _{3/2}	-4,4392108	9,76	-0,86	3d _{5/2}	-20,3599805	3,85	1,33	2,85
4d _{3/2}	-1,6543739	5,24	-0,81	3d _{5/2}	-20,3591404	3,45	1,30	3,69
4d _{5/2}	-1,6048106	8,43	-0,84	3d _{5/2}	-20,3588135	3,25	1,29	4,02
5s _{1/2}	-0,6267282	3,42	-0,52	4s _{1/2}	-6,4857943	3,66	1,27	3,10
5p _{1/2}	-0,3232858	21,46	9,71	4p _{1/2}	-4,7660284	0,43	1,26	2,41
5p _{3/2}	-0,2892139	-2,22	-0,74	4p _{3/2}	-4,4373800	3,62	1,31	1,83
6s _{1/2}	0,1658046	1,15	-0,22	4p _{3/2}	-4,4357136	6,63	1,20	3,50
6p _{1/2}	0,1865293	-5,06	0,40	4d _{3/2}	-1,6529423	1,62	1,32	1,43
6p _{3/2}	0,1966407	4,36	-0,24	4d _{3/2}	-1,6516648	2,64	1,19	2,71
5d _{3/2}	0,3033112	-14,72	-0,36	4d _{5/2}	-1,6038493	4,43	1,36	0,96
5d _{5/2}	0,3044249	12,58	-0,26	4d _{5/2}	-1,6022806	4,32	1,18	2,53
H _s 1s _{1/2} ¹				4d _{5/2}	-1,6016550	4,01	1,23	3,16
MO	E_{var} [E_0]	n_j	E_{exact} [E_0]					
1s _{1/2}	-0,4998164	1 _{1/2}	-0,50000666	5σ _{1/2}	-0,6778683	1,56	0,77	-51,14
2s _{1/2}	0,3789332	2 _{1/2}	-0,12500208	6σ _{1/2}	-0,4107163	1,46	0,59	
2p _{1/2}	0,7865947	2 _{3/2}	-0,12500042	5π _{1/2}	-0,3081484	13,78	-7,83	15,14
2p _{3/2}	0,7866006	3 _{1/2}	-0,05555630	5π _{3/2}	-0,2930695	277,26	-4,67	-3,86
3s _{1/2}	2,0885492	3 _{3/2}	-0,05555580	7σ [*] _{1/2}	0,1082009	0,59	0,27	3,93
3d _{3/2}	3,4578137	3 _{5/2}	-0,05555564	8σ _{1/2}	0,1648993	0,43	0,36	
3d _{5/2}	3,4578544	4 _{1/2}	-0,03125034	6π _{1/2}	0,1874390	-4,97	-0,05	¹⁰⁸
3p _{1/2}	3,8890103	4 _{3/2}	-0,03125013	6π _{3/2}	0,1964987	2,78	0,05	
3p _{3/2}	3,8891479	4 _{5/2}	-0,03125006	9σ _{1/2}	0,1997692	13,58	0,19	
4s _{1/2}	9,7735435	4 _{7/2}	-0,03125003	10σ _{1/2}	0,2949632	-13,48	0,52	
5s _{1/2}	61,4495923	5 _{1/2}	-0,02000018	5δ _{3/2}	0,2952021	-10,81	0,50	

¹⁰⁸ V případě Kramerova páru MEB 6π_{1/2} a páru 9σ_{1/2} jsou jejich „π“ respektive „σ“ charaktery značně nezřetelné. Neboť jsem neprovedl přesný výpočet <I_z> u žádného MEB a λ-ω projekce (σ-, π- orientační označení) přisuzoval „od oka“ tam kde to bylo zřejmé, jsou označení σ/π u 6π_{1/2} a výše pouze velmi orientační (a s ohledem na značně smíšený charakter energeticky vyšších virtuálních MEB vcelku irrelevantní).

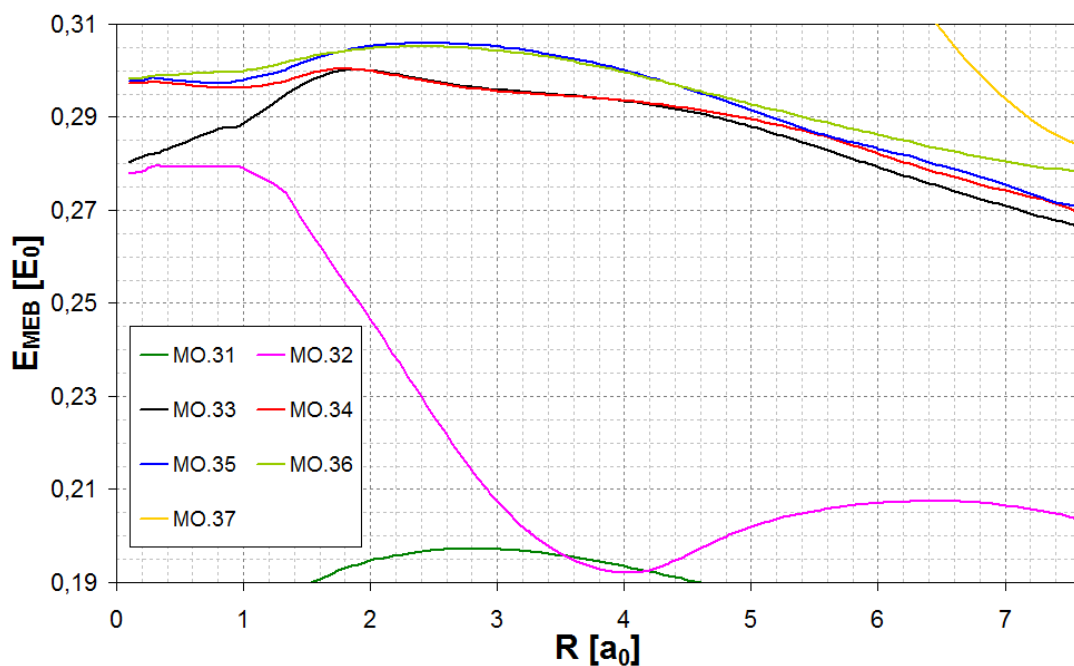
Tabulka 5: Energie MO (Kramerovy páry řešení DHF rovnic o energii $\varepsilon > -mc^2$ (elektronická řešení, uvádím pouze jeden bispinor pro daný Kramerův pár) pro atom Sb (average-of-configuration (a-o-c) pro elektronové konfigurace v tabulce uvedené – E odpovídá $[\text{Cd}]5p_{1/2}^1 5p_{3/2,1/2}^x 5p_{3/2,3/2}^y$, kde $x+y=2$, ΔE_1 a ΔE_2 odpovídají energetickým rozdílům vzhledem k E (tj. energiím po odečtení hodnoty E)) a molekulu SbH ($R = 3.3 a_0$, a-o-c pro elektronové konfigurace uvedené v tabulce, energetické rozdíly ΔE_1 a ΔE_2 jsou vztažené vzhledem ke konfiguraci $[\text{Cd}]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^1 5\pi_{3/2}^1$). Energetická jednotka „ E_0 “ (také označovaná jako „ H “ a „ E_h “) je $1 \text{ Hartree} = 27,211\,383\,86\,(68) \text{ eV} = 4,359\,743\,94\,(22) \cdot 10^{-18} \text{ J} = 219\,474,631\,3705(15) \text{ cm}^{-1}$, energetická jednotka mH je pak milihartree, tedy $10^{-3} E_h$. V případě atomu vodíku E_{exact} odpovídá přesným hodnotám řešení Diracovy rovnice pro model bodového jádra a E_{var} hodnotám vypočteným pomocí řešení DHF rovnic¹⁰⁹ pro jednoelektronový atom (H, s korekcí na nenulové rozměry jádra) s použitou bází AO.



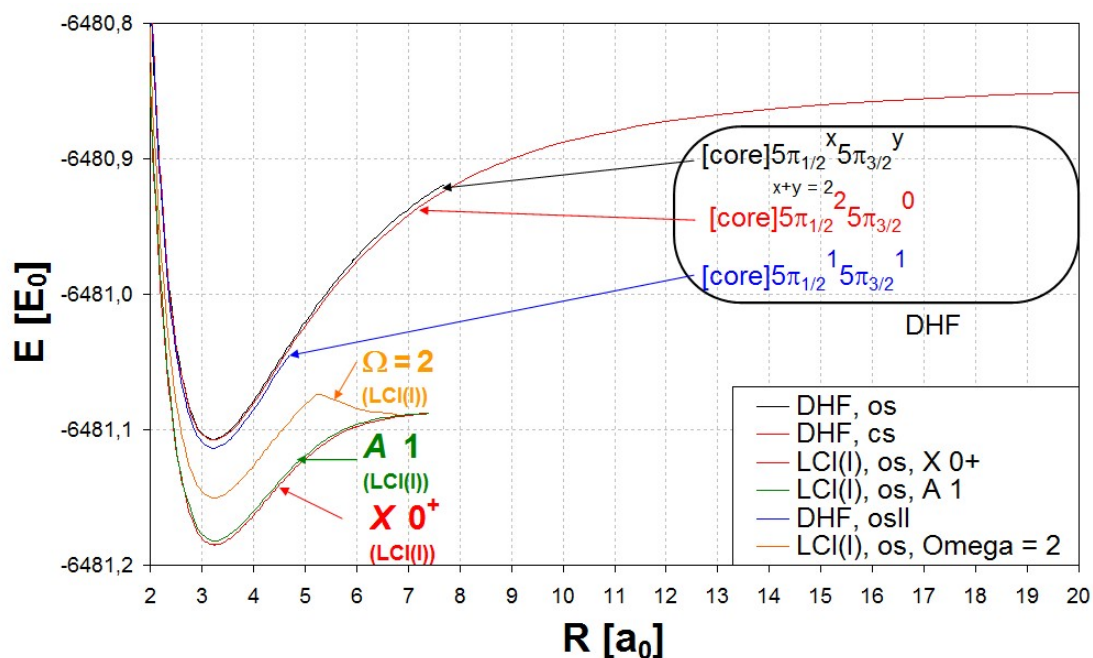
Graf 9: Závislost energií některých dalších virtuálních MO (Kramerových párů MEB), číslování odpovídá pořadí dle energie pro $R = 2,0 a_0$ (viz grafy 8, 9, 10b)

¹⁰⁹ Pro $1s_{1/2}$ orbital odpovídá řešení Kramers restricted open-shell DHF (a-o-c $1s_{1/2}^1$) řešení Diracovy rovnice pro atom vodíku v použité bází AO, pro energeticky vyšší orbitály se DHF řešení a řešení Diracovy rovnice v dané bází liší (self-interakční člen je nenulový).

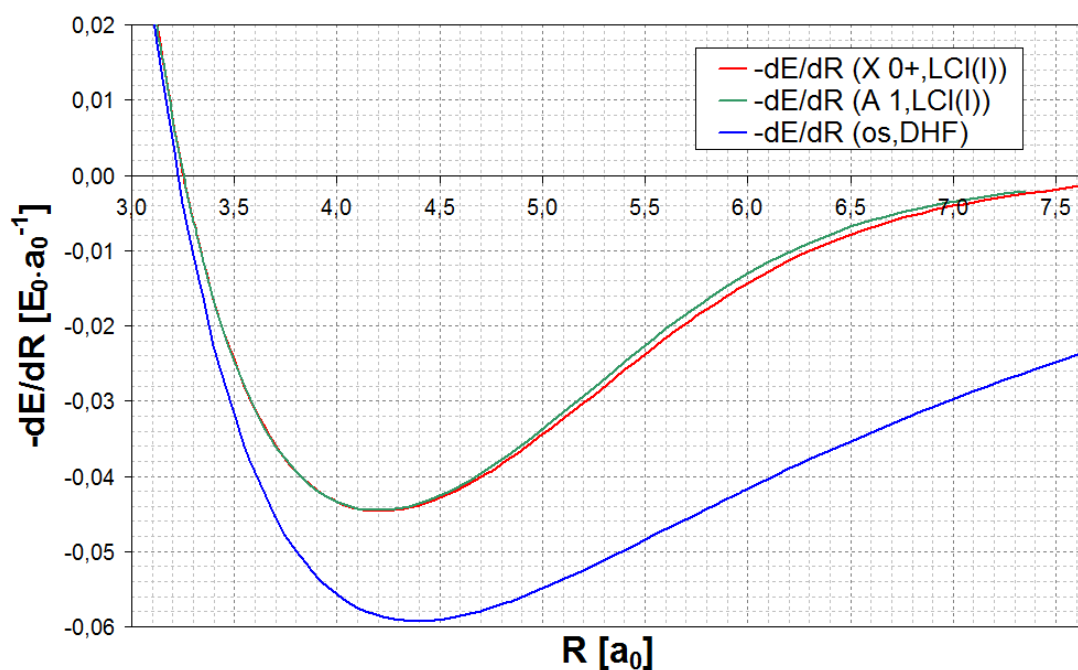
a tabulka 5, kde přerušovaná čára v seznamu MO pro SbH odděluje MO po pěticiích). Za drobnou pozornost stojí, že zatímco křížení křivek $E_{MEB} = E_{MEB}(R)$ pro MO.30 a MO.31 ($6\pi_{1/2}$ a $6\pi_{3/2}$) je „vyhnuté“, křivky $E_{MEB} = E_{MEB}(R)$ pro MO.31 a MO.32 se kříží skutečně.



Graf 10: Závislost energií některých dalších virtuálních MO (Kramerových párů MEB), číslování odpovídá pořadí dle energie pro $R = 2,0 a_0$ (viz tabulka 5, kde přerušovaná čára v seznamu MO pro SbH odděluje MO po pěticiích). Detail grafu uvádí graf



Graf 11: Disociační křivky molekuly SbH v rámci KR-DHF aproximace („close shell“ $[\text{Cd}]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^2 5\pi_{3/2}^0$, „open shell“ a-o-c $[\text{Cd}] 5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^x 5\pi_{3/2}^y$, $x+y=2$ „open shell II“ a-o-c $[\text{Cd}]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^1 5\pi_{3/2}^1$)



Graf 12: Závislosti projekce vektoru síly působící na jádro $^{110}\text{H}^+$ na spojnici jader na mezijaderné vzdálenosti R v základním stavu ($X 0^+$) a energeticky nejnižším excitovaném stavu ($A 1$) v rámci LCI(I) výpočtu. Porovnání s odpovídající křivkou

¹¹⁰ Na jádro Sb^{51+} působí síla stejné velikosti, ale opačného znaménka.

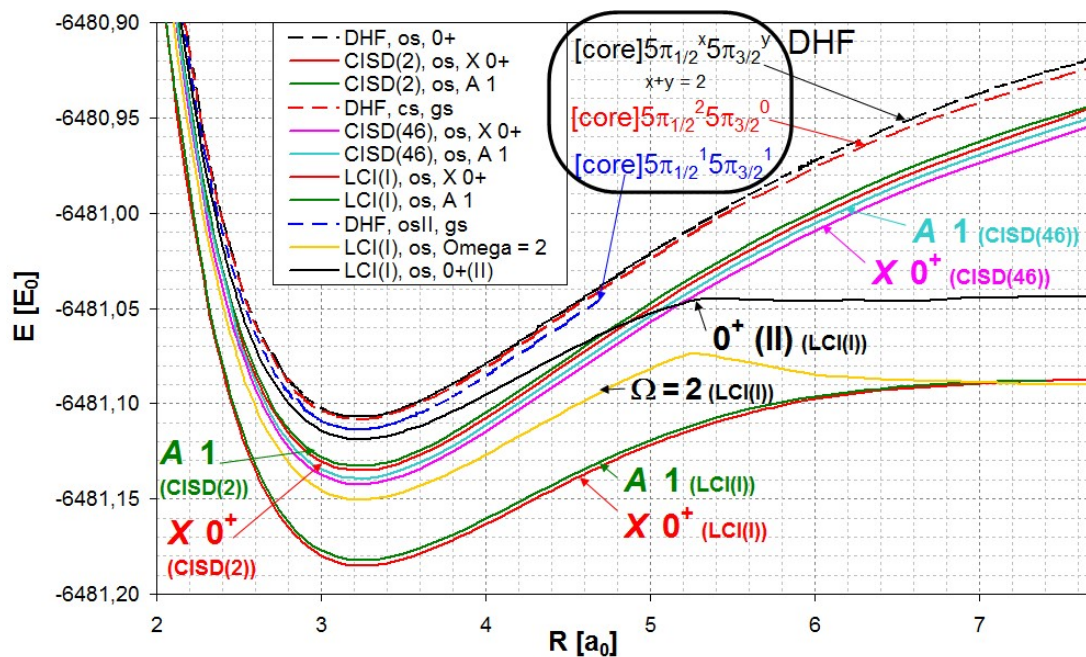
pro DHF výpočet (KR, a-o-c [Cd] $5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^x 5\pi_{3/2}^y$, $x+y = 2$ (dále jen „open-shell“)). S ohledem na to, že platí $F_z = -dE/dR$, je studium závislosti $F_z = F_z(R)$ (popřípadě $d^n F_z/dR^n = d^{n+1} E/dR^{n+1}$ pro $n \in \mathbb{N}$) nástrojem jak odhalit možné nespojitosti na křivce $E = E(R)$ ukazující na chybnou konvergenci při DHF nebo CI výpočtech.

<i>Veličina</i>	<i>Hodnota [a_0]</i>
$R_{min}(\text{DHF, „open-shell“})$	3,2257
$R_{min}(\text{LCI(I), } X 0^+)$	3,2531
$R_{min}(\text{LCI(I), } A 1)$	3,2518
$R_{min}(X 0^+, \text{experiment})$	3,25
$R_{min}(X 0^+ \text{ a } A 1)$ – doporučená hodnota T.F.	3,255242

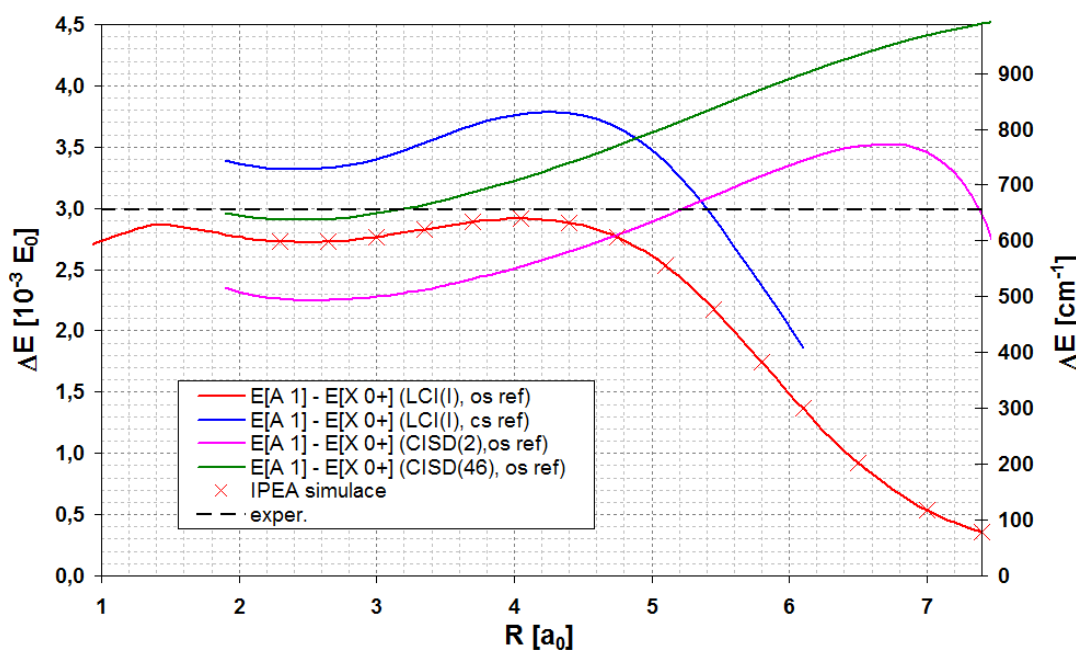
Tabulka 6: Minima disociačních křivek molekuly SbH – DHF výpočet („open-shell“), LCI(I) výpočty – základní stav ($X 0^+$) a stav $A 1$.

Před provedením simulace kvantového diagonalizačního algoritmu (IPEA) pro KRCI hamiltonián byly provedeny KRCI výpočty na základě klasických numerických algoritmů pro Direct-CI výpočty implementovaných v programu DIRAC [D]. Hodnoty KRCI energií (pro různě vymezené a tedy i různě rozsáhlé rozvoje Slaterových determinantů, „referencí“ byl „open shell“ DHF výpočet¹¹¹) pro mezijaderné vzdálenosti $R = 3,255424 a_0$ a $R = 3,3 a_0$ uvádím v tabulce 4, disociační křivky pak v grafu 13. Z hodnot energií pro oblast minima (tabulka 4) plyne, že ani pro tuto oblast nejsou použité báze Slaterových determinantů dostatečně mohutné, z grafů 13 a 11 pak, že pro popis disociace jsou CISD rozvoje nedostatečné (což je plně v souladu s obecnými zákonitostmi, které v kvantové chemii platí) a budou (podobně jako DHF metoda) poskytovat silně nadhodnocenou hodnotu disociační energie molekuly a i pro popis závislosti energetické separace stavů $A 1$ a $X 0^+$ na mezijaderné vzdálenosti R nejsou vhodné (zejména ne pro $R > 5,1 a_0$, tedy uvnitř a za „oblastí Σ^+ “, viz graf 14).

¹¹¹ Bispinory z tohoto výpočtu sloužily jako vstup pro konstrukci báze Slaterových determinantů.



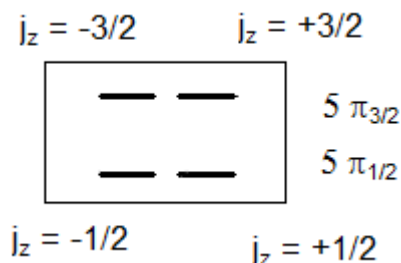
Graf 13: Disociační křivky molekuly SbH v rámci DHF a KRCI výpočtů s DHF referencí odpovídající výpočtu pro „open-shell“ (CISD(2), CISD(46) – základní stav $X 0^+$ a excitovaný stav $A 1$, LCI(I) – navíc stavy $\Omega = 2$ a $0^+(II)$).



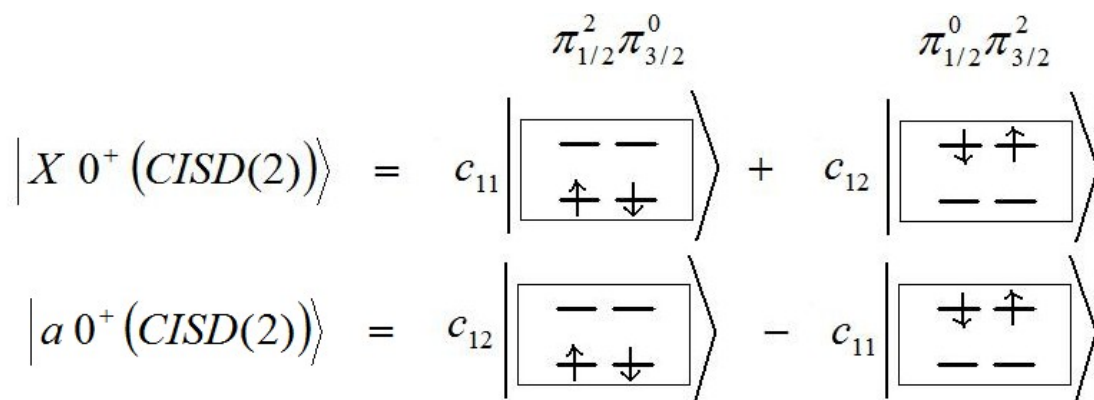
Graf 14: Závislost rozdílu energií dubletu excitovaných stavů $A 1$ ($\Omega = \pm 1$) a základního stavu $X 0^+$ ($\Omega = 0$) na mezijaderné vzdálenosti pro KRCI výpočty (CISD(2), CISD(46) a LCI(I)).

V tomto případě však CISD(2) a CISD(46) výpočty nejsou zcela zbytečné, neboť umožňují studovat diagonalizaci hermitovské matice menšího rozměru (viz počty determinantů uvedené v tabulce 4) a také umožňují rychlou předběžnou analýzu vlnových funkcí stavů $X 0^+$, $A 1$ a dalších alespoň pro $R < 6 a_0$. Na základě této analýzy lze pak konstruovat nejjednodušší možné post-DHF odhady pro použitelné vstupní odhady $|\psi_0\rangle$ vlastního vektoru pro algoritmus IPEA.

Uvádím proto níže KRCI rozvoje pro případ CISD(2) výpočtu. Jak je uvedeno v tabulce 4, prostor stavů odpovídajících korepresentaci „A“ dvojité grupy C_2^* je v tomto případě 4-rozměrný. Je generovaný Slaterovými determinanty z obrázků 27 a 28. Díky tomu, že výpočetní grupa je vlastní podgrupou fyzikální grupy $C_{\infty v}^*$, vycházejí při výpočtech nenulové rozvojové koeficienty pro stavy z obr. 27 i pro determinanty z obr. 28 a naopak, ale jejich hodnoty obvykle nepřekračují 10^{-10} , proto je v dalším ignoruji. Pak lze tedy tento 4 rozměrný prostor faktorizovat na 2-rozměrný prostor generovaný determinanty jejichž $\langle j_z \rangle = 0$ (obr. 27) a dva jednorozměrné prostory odpovídající dvojici ketů z obr. 28.



Obr. 26: Zjednodušené hladinové schéma HOMO/LUMO bispinorů pro znázornění Slaterových determinantů v obrázcích 27-29.



Obr. 27: Popis stavů „ $X 0^+$ “ a „ $a 0^+$ “, v rámci CISD(2) výpočtu.

Průběh závislosti rozvojových koeficientů c_1 a c_2 z Obr. 27 na mezijaderné vzdálenosti R je znázorněn v grafu 15 níže a závislost $|c_1|^2$ a $|c_2|^2$ je v grafu 16 porovnána se závislostí čtverců absolutních hodnot rozvojových koeficientů odpovídajících stejným Slaterovým determinantům na R pro případ LCI(I). Z tohoto porovnání pak vyplývá, že zastoupení konfigurace $\pi_{1/2}^0\pi_{3/2}^2$ v případě CISD(2) s rostoucím R klesá podstatně pomaleji než v případě LCI(I) a zastoupení konfigurace $\pi_{1/2}^2\pi_{3/2}^0$ v případě CISD(2) s R dokonce nepatrně roste (narozdíl od LCI(I))¹¹². Faktem je, že jak pro CISD(2) tak pro LCI(I) vykazují závislosti $|c_1|^2$ (R) a $|c_2|^2$ (R) v oblasti $R \in (1,6; 3,2)$ prakticky konstantní závislost a $|c_1|^2$ (R) má v okolí rozvážné mezijaderné vzdálenosti ($R \approx 3,3 a_0$) podobný průběh i hodnoty pro CISD(2) a LCI(I). Dalším zajímavým poznatkem je, že pro $R = 3,3 a_0$ lze s chybou menší než $1,2 \cdot 10^{-4}$ (ve smyslu vzdálenosti mezi normovanými vektory se stejnou hodnotou fáze pro koeficient c_i) aproximovat stav $|X 0^+(CISD(2))\rangle$ lineární kombinací¹¹³

$$|X 0^+(CISD(2))_0\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |[core]\pi_{1/2}^2\pi_{3/2}^0\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |[core]\pi_{1/2}^0\pi_{3/2}^2\rangle, \quad (415)$$

A tento stav použit jako vhodnější vstupní odhad vlastního vektoru pro metodu IPEA (pro všechny studované mezijaderné vzdálenosti) než jednodeterminantový odhad $|[core]\pi_{1/2}^2\pi_{3/2}^0\rangle$. Závislost „překryvu“ vektoru (415) s vlastním vektorem z LCI(I) výpočtu (odpovídajícímu základnímu stavu $X 0^+$) na R znázorněná v grafu 16 světle fialovou plnou křivkou a v grafu 20 tmavomodrou plnou křivkou pak má podobný průběh i hodnoty jako závislost „překryvu“ jednodeterminantového odhadu $|[core]\pi_{1/2}^B\pi_{3/2}^A\rangle$ vlastního vektoru z LCI(I) výpočtu energie stavu „A 1“ ($\Omega = +1$).

¹¹² Pohledem na meze os v grafu 15, stejně jako průběh červené a zelené přerušované křivky v grafu 16 také snadno nahlédneme, že koeficienty c_1 a c_2 (a tedy i zastoupení Slaterových determinantů $\pi_{1/2}^2\pi_{3/2}^0$ a $\pi_{1/2}^0\pi_{3/2}^2$) se v případě CISD(2) ve zkoumaném rozmezí $R \in \langle 1,5 a_0; 7,6 a_0 \rangle$ mění jen nepatrně.

¹¹³ kde $[core] \equiv [Cd]5\sigma_{1/2}^26\sigma_{1/2}^2$ a u HOMO/LUMO hraničních orbitalů $5\pi_{1/2}$ a $5\pi_{3/2}$ vynechávám označení „5“ vycházející z hlavního kvantového čísla (tj. 5p-orbitály Sb).

$$\begin{aligned}
|\Omega = -2(CISD(2))\rangle &= \left| \begin{array}{cc} \downarrow & - \\ \uparrow & - \end{array} \right\rangle \pi_{1/2}^B \pi_{3/2}^B \\
|\Omega = +2(CISD(2))\rangle &= \left| \begin{array}{cc} - & \uparrow \\ - & \downarrow \end{array} \right\rangle \pi_{1/2}^A \pi_{3/2}^A
\end{aligned}$$

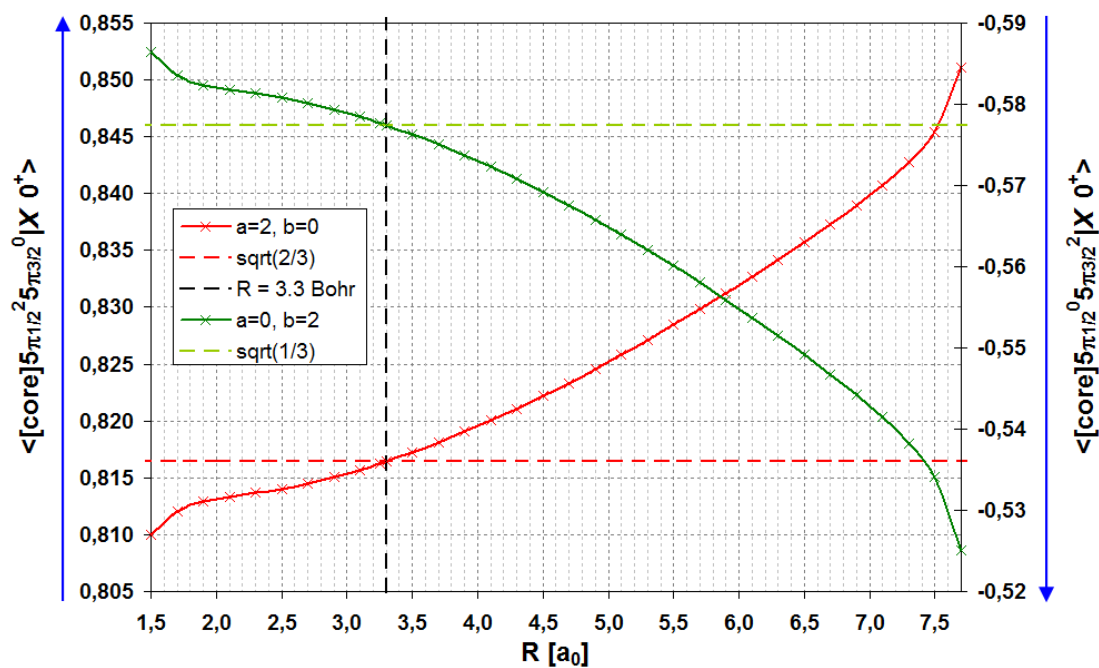
Obr. 28: Popis stavů s $|\Omega| = 2$ v rámci CISD(2) výpočtu

Prostor stavů odpovídajících korepresentaci „B“ dvojité grupy C_2^* je v tomto případě 2-rozměrný. Je generovaný Slaterovými determinanty z obrázku 29. Každý ze stavů $A 1_-$ a $A 1_+$ je dán přímo odpovídajícím bázevým Slaterovým determinantem (v rámci CISD(2) výpočtu).

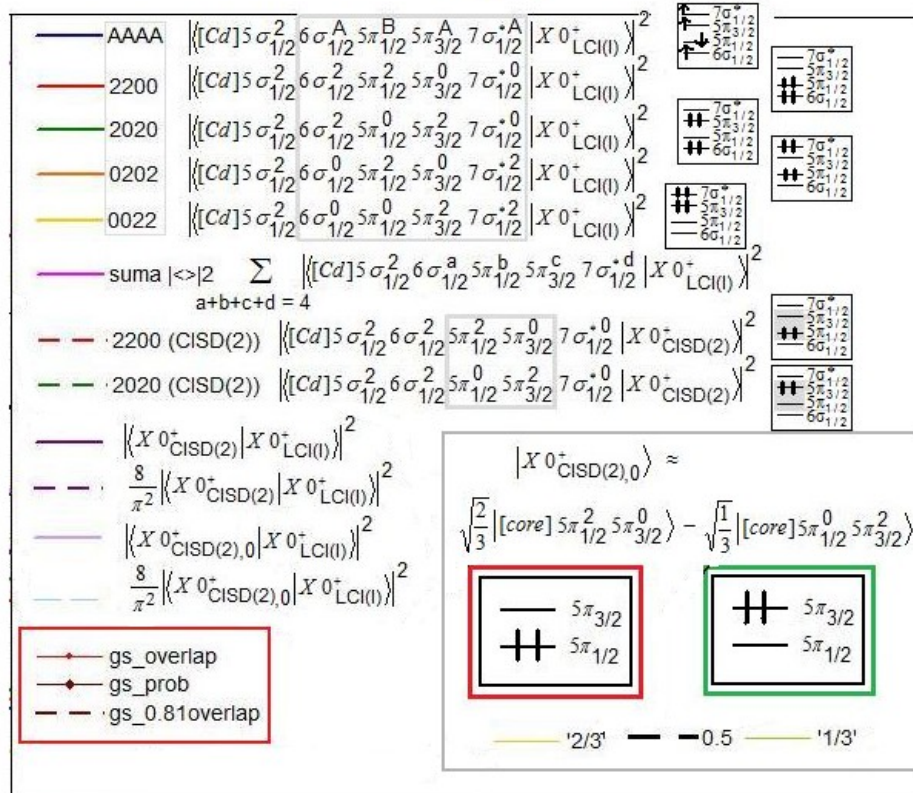
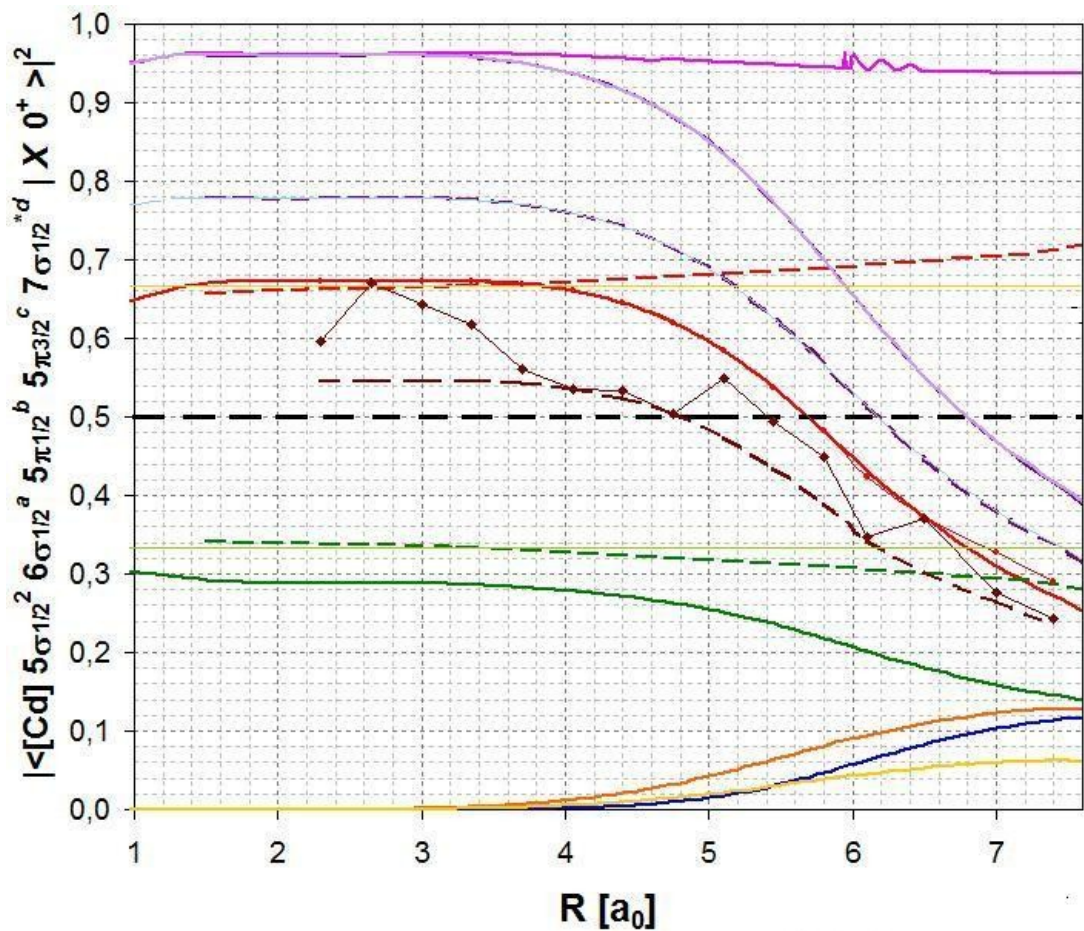
$$\begin{aligned}
|A 1_-(CISD(2))\rangle &= \left| \begin{array}{cc} \downarrow & - \\ - & \downarrow \end{array} \right\rangle \pi_{1/2}^A \pi_{3/2}^B \\
|A 1_+(CISD(2))\rangle &= \left| \begin{array}{cc} - & \uparrow \\ \uparrow & - \end{array} \right\rangle \pi_{1/2}^B \pi_{3/2}^A
\end{aligned}$$

Obr. 29: Popis stavů „A 1“ ($|\Omega| = 1$) v rámci CISD(2) výpočtu

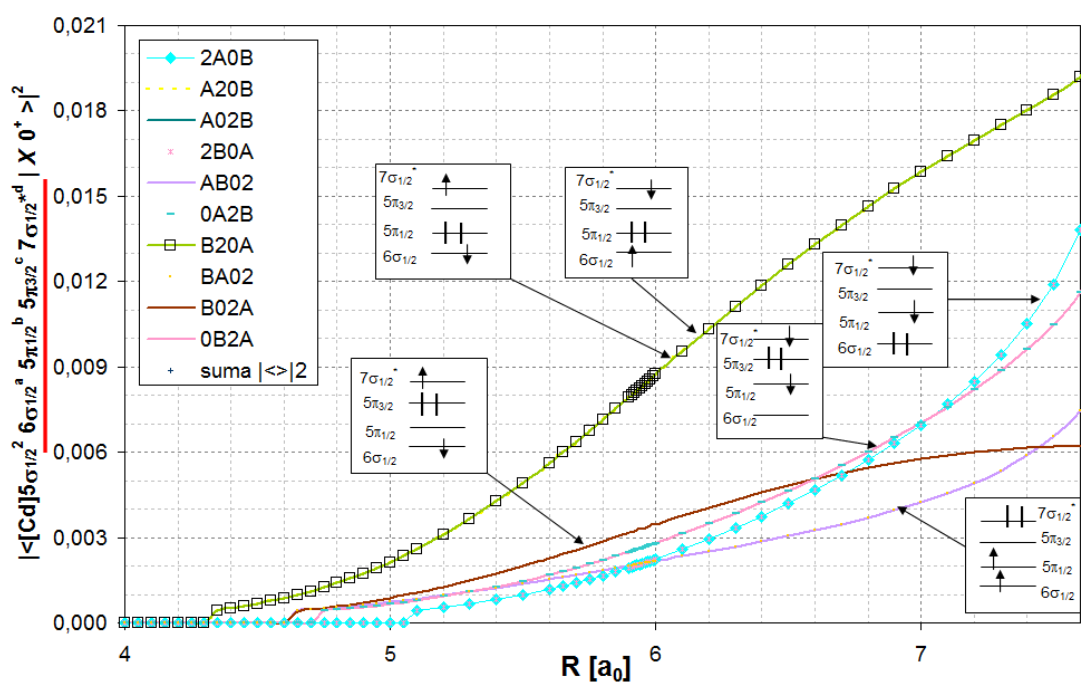
hodnoty rozvojových koeficientů KRCI Slaterových determinantů v rozvoji vlnové funkce pro CISD(2) výpočet



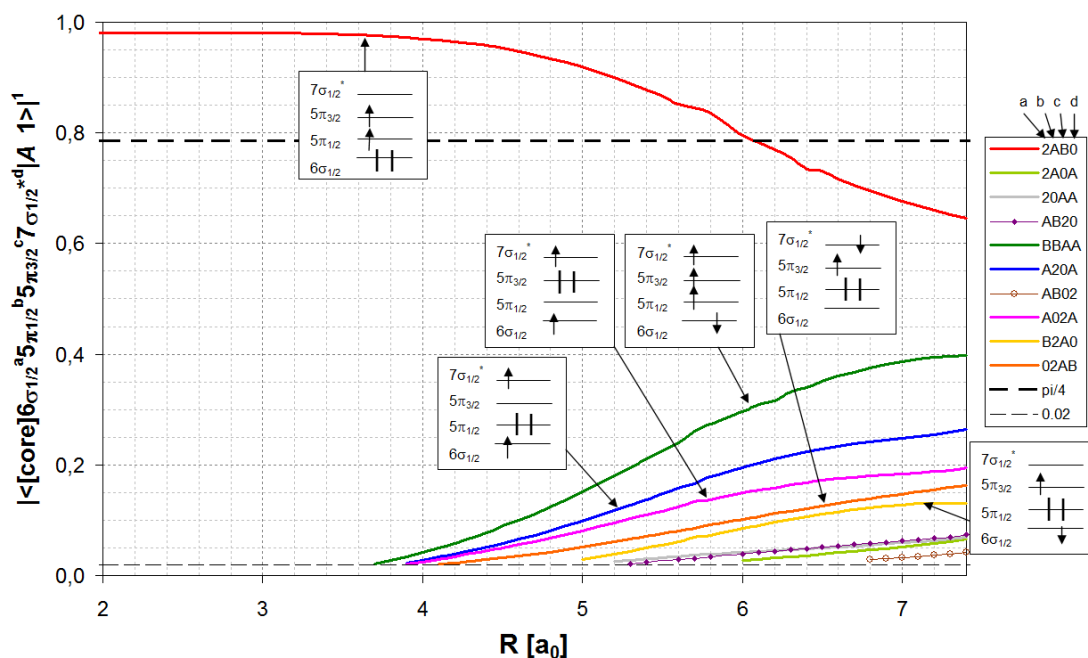
Graf 15: Závislost rozvojových koeficientů Slaterových determinantů $[\text{Cd}]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^2 5\pi_{3/2}^0$ a $[\text{Cd}]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^0 5\pi_{3/2}^2$ KRCI vlnové funkce na mezijaderné vzdálenosti R pro CISD(2) výpočet s DHF referencí „open-shell“.



Graf 16: Závislost kvadrátů absolutních hodnot rozvojových koeficientů nejvíce zastoupených Slaterových determinantů KRCI vlnové funkce základního stavu $X 0^+$ na mezijaderné vzdálenosti R pro LCI(I) výpočet, srovnání s hodnotami odpovídajícími CISD(2) a CI-CAS(4,4) výpočtům. V grafu je znázorněna křivka překryvu vlnové funkce LCI(I) základního stavu ($|X 0^+(LCI(I))\rangle$) s možnými počátečními odhady vlastního vektoru pro metody IPEA – jednodeterminantovou funkcí $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^2\rangle$ (červená plná křivka) a vlastním vektorem odpovídajícím metodě CISD(2) (normalizovaná lineární kombinace výše uvedeného Slaterova determinantu s determinantem $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^0 5\pi_{3/2}^2\rangle$) (fialová plná křivka) – tyto překryvy určují realistický odhad horní meze k pravděpodobnosti $p_m(\delta)$ úspěchu algoritmu IPEA A dle vztahu (241). Přerušovanou čarou hnědé barvy (vstupní odhad daný determinantem $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^2\rangle$), respektive tmavofialové barvy (vstupní odhad daný lineární kombinací $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^2\rangle$ a $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^0 5\pi_{3/2}^2\rangle$) pak označují závislost jejich $8/\pi^2$ násobku (který je dolní mezí k pravděpodobnosti $p_m(\delta)$ úspěchu algoritmu IPEA A) na R .



Graf 17: Závislost čtvrců absolutních hodnot koeficientů CI rozvoje pro LCI(I) popis základního stavu $X 0^+$ molekuly SbH – zastoupení Slaterových determinantů popisujících disociaci v oblasti $R > 4 a_0$.



Graf 18: Závislost čtverců absolutních hodnot koeficientů CI rozvoje pro LCI(I) popis základního stavu A 1 molekuly SbH.

Numerická simulace algoritmu IPEA A (compact mapping)

Pro následující mezijaderné vzdálenosti R uvedené v tabulce 7 byla zkontruována matice \hat{H} KRCI hamiltoniánu (pro metodu LCI(I) charakterizovanou v tabulce 3 odpovídající CI rozvoji do 29665 Slaterových determinantů (pro výpočet stavů se sudým J_z , tedy včetně základního stavu X^0^+), respektive 29530 Slaterových determinantů (pro výpočet stavů s lichým J_z , tedy včetně dubletu excitovaných stavů A 1)), respektive pole exponenciál z násobků této matice ve tvaru (viz také vztah (197))

$$\hat{U}^{2^{m-k}} = \exp\left(i \Delta\tau \left(\hat{H} - E_{\min}\right) \cdot 2^{m-k}\right), \quad (417)$$

kde m je počet bitů při binární reprezentaci racionální aproximace hledané fáze $f \in \langle 0; 1 \rangle$ (hledané vlastní číslo \hat{U} (označím jej $\lambda \in \mathbb{C}$, $|\lambda| = 1$) je parametrizováno vztahem (418), kde $f \in R$ označím jako fázi, m je současně také počet iterací uvnitř algoritmu IPEA), $k \in \{1; 2; \dots; m\}$ indexuje iterace metody IPEA, E_{\min} je dolní mezí

k hledanému vlastnímu číslu \hat{H} (analogicky horní mezi označím jako E_{max}) a $\Delta\tau$ je reálný parametr, který zvolím ve tvaru (419), neboť tato volba zajišťuje bijektivní zobrazení mezi množinou možných hodnot fáze $\langle 0;1 \rangle$ a množinou možných hodnot energetického rozdílu $E - E_{min}$ (kde E je hledané vlastní číslo \hat{H}), tedy $\langle 0; E_{max} - E_{min} \rangle$.

$$\lambda = \exp(2\pi i f) = \exp(i \Delta\tau (E - E_{min})), \quad (418)$$

$$\Delta\tau = \frac{2\pi}{E_{max} - E_{min}}. \quad (419)$$

Ze vztahů (418) a (419) vyplývají vztahy pro výpočet dvou nejbližších aproximací E_{\downarrow} , E_{\uparrow} (420)-(421) vlastního čísla E matice KRCI hamiltoniánu \hat{H} z hodnot jim odpovídajících nejbližších racionálních aproximací f_{\downarrow} , f_{\uparrow} fáze f v rámci m bitů.

$$E_{\downarrow} = \frac{2\pi}{\Delta\tau} f_{\downarrow} + E_{min} = f_{\downarrow} (E_{max} - E_{min}) + E_{min}, \quad (420)$$

$$E_{\uparrow} = \frac{2\pi}{\Delta\tau} f_{\uparrow} + E_{min} = f_{\uparrow} (E_{max} - E_{min}) + E_{min}, \quad (421)$$

Maximální chyba určení vlastního čísla E je pak dána rozdílem $\delta E \equiv E_{\uparrow} - E_{\downarrow}$, pro který platí

$$\delta E = 2^{-m} \Delta E, \quad (422)$$

kde $\Delta E \equiv E_{max} - E_{min}$ je délka intervalu ve kterém očekáváme výskyt vlastního čísla maticové reprezentace KRCI hamiltoniánu v rámci dané báze Slaterových determinantů. Je zřejmé, že čím užší je tento interval, tím vyšší přesnosti lze dosáhnout pro daný počet iterací algoritmu, pro fixní hodnotu ΔE pak počet cifer na

kteře lze přesně (s vysokou pravděpodobností) určit E roste lineárně s počtem iterací m (každá iterace přidává jednu binární číslici k fázi parametrizující lineárně E).

V našem případě byly meze E_{max} a E_{min} určeny s ohledem na předcházející výpočet několika málo vhodně situovaných bodů na disociační křivce klasickým diagonalizačním algoritmem a drženy fixní pro všechny simulované IPEA diagonalizace v rámci dané dvojice disociačních křivek ($X 0^+$ a $A 1$ pro danou bázi Slaterových determinantů). Pro simulace uvedené také v článku [1] bylo zvoleno $E_{min} = -6481,5 E_0$ a $E_{max} = -6481,0 E_0$. Tato volba je do značné míry umělá, nicméně pro první předběžný test simulací kvantového algoritmu postačující (v praktických aplikacích by bylo přirozené volit za E_{max} energii získanou SCF výpočtem¹¹⁴ (tedy řešením DHF rovnic) a za E_{min} klasickou diagonalizací získanou KRCI energii v okolí minima zmenšenou o díl kompenzující neznalost přesné polohy minima, alternativně lze použít libovolně hrubou dolní mez vycházející například z metod popisovaných v [53], [54] a použitím algoritmu IPEA pro menší počet iterací následně stanovit přesnější odhad této meze (následně pak použité pro více IPEA kvantových výpočtů podél celé disociační křivky))

Volba $m = 17$ použitá v článku [1] pak vede na teoretickou maximální chybu v určení energie $\delta E = 3,82 \cdot 10^{-6} E_0$ (odpovídá $0,837 \text{ cm}^{-1}$ na ose vlnočtů), což činí přibližně 0,1% z experimentálně určené hodnoty energetické separace stavů $T_e = E(A 1, R_{min}) - E(X 0^+, R_{min}) = 654,97 \text{ cm}^{-1}$ [1], [55]. Takový energetický rozdíl je samozřejmě naprosto nepostřehnutelný v grafu 19 a body odpovídající E_{\uparrow} tak leží prakticky na křivkách $E = E(R)$. Pro větší názornost je v grafu 19 na vedlejší ose y znázorněna energetická stupnice v jednotkách fáze f .

Praktická použitelnost algoritmu je limitována podmínkou, aby pravděpodobnost úspěchu p_m (stanovená jako součet pravděpodobností změření fází f_{\downarrow} a f_{\uparrow} , tedy vztahem (238)) byla větší než 0,5.

V [1] byla použita varianta IPEA A, pro kterou lze očekávat splnění vztahů (238), (243) pro pravděpodobnost p_m .

Grafu 20 znázorňuje závislost mezi pro p_m daných vztahem (234) pro případ jednodeterminantových vstupních odhadů vlastního vektoru (odpovídajících

¹¹⁴ Pro každý bod disociační křivky zvlášť (lze předpokládat, že SCF iterace proběhly pro každý studovaný bod v každém případě, neboť jich bylo potřeba ke konstrukci báze MEB), nebo pro oblast disociace, popř. prvních několika bodů pro velmi malé mezijaderné vzdálenosti.

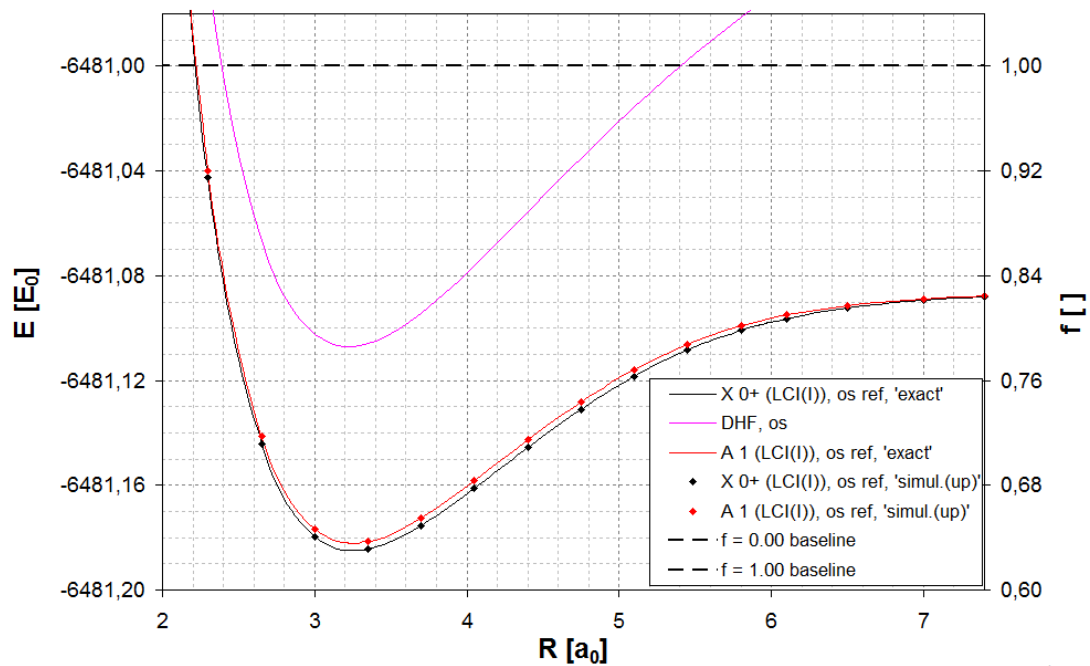
konfiguracím $[\text{Cd}]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^2 5\pi_{3/2}^0$ (pro $X 0^+$) a $[\text{Cd}]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^B 5\pi_{3/2}^A$ (pro komponentu $\Omega = +1$ dubletu $A 1$)) pomocí červených křivek pro základní stav $X 0^+$ a zelených křivek pro excitovaný stav $A 1$ (plnou čarou horní mez, přerušovanou dolní mez). Jednodeterminantový vstupní odhad byl použit právě v práci [1]. Poskytuje pro každou hodnotu mezijaderné vzdálenosti nižší pravděpodobnosti úspěchu pro aplikaci IPEA A na výpočet energie stavu $X 0^+$ než v případě stavu $A 1$ a pro stav $X 0^+$ také nižší „kritickou“ hodnotu mezijaderné vzdálenosti R_{krit} nad kterou již nelze zaručit, že $p_m > 0,5$ ($R_{krit} = 4,75 a_0$ pro $X 0^+$ a $R_{krit} = 6,03 a_0$ pro $A 1$). Skutečně zjištěné hodnoty pravděpodobnosti úspěchu p_m jsou pak znázorněny v grafu 20 jako body spojené plnou čarou červené ($X 0^+$), respektive zelené ($A 1$) barvy.

Pro zvýšení hodnot mezí pro p_m v případě základního stavu $X 0^+$ byla v této práci studována možnost použít pro celou disociační křivku jako vstupní odhad vlastního vektoru lineární kombinace Slaterových determinantů odpovídajících konfiguracím $[\text{core}]\pi_{1/2}^2 \pi_{3/2}^0$ a $[\text{core}]\pi_{1/2}^0 \pi_{3/2}^2$ (kde $[\text{core}]$ označuje $[\text{Cd}]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2$ a u hraničních π -orbitalů vynechávám označení slupky) s koeficienty ze vztahu (415), který v dobrém přiblížení odpovídá vlastnímu vektoru pro (KR)CISD(2) metodu v rovnovážné geometrii ($R = 3,3 a_0$, viz graf 15). S touto volbou je pak průběh závislosti mezí k p_m na mezijaderné vzdálenosti R pro základní stav $X 0^+$ velmi blízký průběhu pro excitovaný stav $A 1$ (což odpovídá faktu, že odhad vlastního vektoru pro oba stavy vychází z CISD(2) metody, již odpovídající prostor Slaterových determinantů odpovídá CAS(2,2) – tedy úplnému aktivnímu prostoru). V tomto případě tedy také $R_{krit} = 6,18 a_0$ pro základní stav $X 0^+$, což je blízké hodnotě $R_{krit} = 6,03 a_0$ pro excitovaný stav $A 1$.

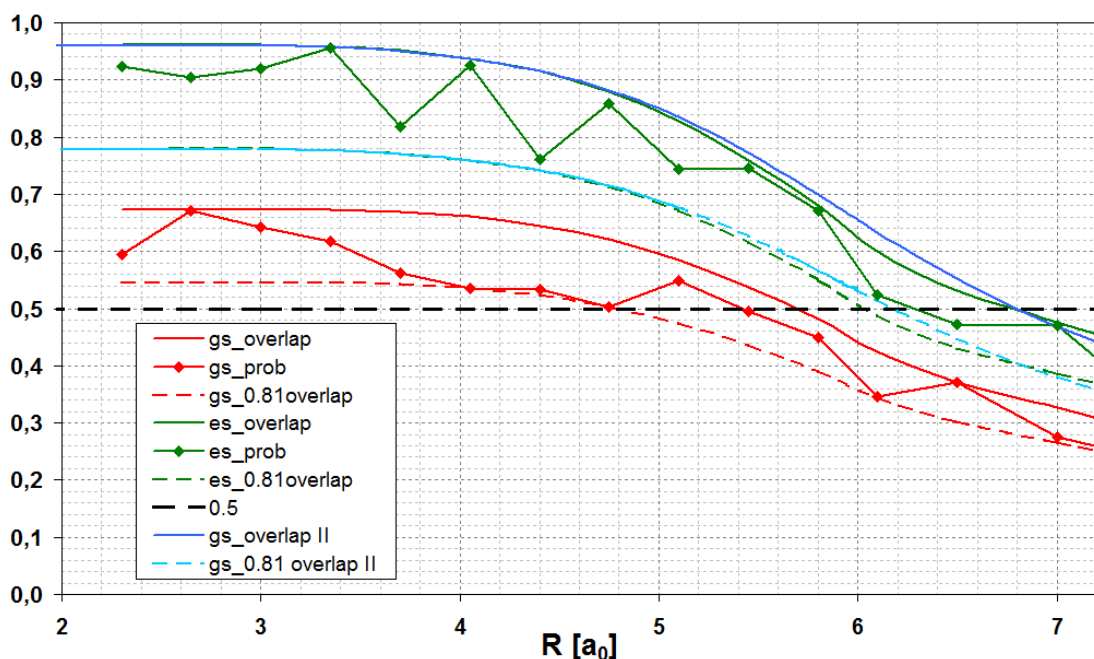
Simulace IPEA A algoritmu pro výše zmiňované vylepšení vstupního odhadu vlastního vektoru pro stav $X 0^+$ nebyly z časových důvodů dosud provedeny, nicméně hodnoty p_m budou téměř s jistotou splňovat ve velmi dobrém přiblížení vztah (239) (kde hodnoty δ jsou uvedeny v tabulce 7).

	$X 0^+$					
R [a_0]	E_{\uparrow} [E_0]	E_{δ} [$10^{-6}E_0$]	δ	p_{\uparrow}	p_m	p_{δ} [10^{-6}]
2,30	-6481,04269028	2,76	0,276	0,0755	0,5952	-0,7
2,65	-6481,14415741	0,10	0,973	0,6708	0,6714	-0,6
3,00	-6481,17970276	0,58	0,847	0,6225	0,6430	-1,0
3,35	-6481,18439484	0,84	0,780	0,5722	0,6176	-0,5
3,70	-6481,17544174	1,40	0,632	0,4195	0,5616	-0,4
4,05	-6481,16115952	1,88	0,506	0,2747	0,5356	-0,3
4,40	-6481,14562225	2,30	0,398	0,1623	0,5343	-0,2
4,75	-6481,13097763	1,85	0,516	0,2675	0,5033	-0,2
5,10	-6481,11839676	3,11	0,185	0,0269	0,5485	-21,4
5,45	-6481,10836792	2,99	0,216	0,0350	0,4945	-0,3
5,80	-6481,10092926	0,75	0,804	0,4236	0,4489	-0,2
6,15	-6481,09574890	2,12	0,445	0,1354	0,3461	-0,2
6,50	-6481,09231186	3,66	0,042	0,0007	0,3702	5,6
7,00	-6481,08942413	3,42	0,102	0,3159	0,3200	
7,20	-6481,08871078	2,42	0,367	0,1826	0,2438	

Tabulka 7: Simulace IPEA A algoritmu na klasickém počítači pro LCI(I) výpočet energií základního ($X 0^+$) stavu molekuly SbH pro různé mezijaderné vzdálenosti – hodnoty nejbližší horní aproximace energie E_{\uparrow} , její odchylky od energie E získané klasickou diagonalizací ($E_{\delta} = E_{\uparrow} - E$) a hodnot parametrů $\delta \in <0;1$) (přesná fáze splňuje $f = f_{\downarrow} + 2^{-m}\delta$). Dále uvádím hodnoty pravděpodobností úspěchu p_{\downarrow} , p_{\uparrow} , $p_m = p_{\downarrow} + p_{\uparrow}$ a odchylky $p_{\delta} = p_m - p_m(\delta)$, kde $p_m(\delta)$ je dáno vztahem (239).



Graf 19: Disociační křivky základního ($X\ 0^+$) a dubletu nejnižších excitovaných stavů ($A\ 1$) molekuly SbH v rámci KRCI (LCI(I)) výpočtu s DHF („open shell“) referencí vypočtené jako výstup ze simulace kvantového algoritmu IPEA A pro $m = 17$ iterací.



Graf 20: Křivka překryvu vlnové funkce LCI(I) základního stavu ($|X 0^+(LCI(I))\rangle$) s možnými počátečními odhady vlastního vektoru pro metody IPEA – jednodeterminantovou funkcí $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^2\rangle$ (červeně, plná čára) a lineární kombinací determinantů $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^2\rangle$ a $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^0 5\pi_{3/2}^2\rangle$ (s koeficienty odpovídajícími metodě CISD(2) a rovnovážné geometrii $R = 3,3 a_0$, modře, plná čára¹¹⁵) odpovídající křivka pro excitační stav $A 1$ (vstupní odhad vlastního vektoru pro metodu IPEA A byl zvolen jako Slaterův determinant $|[Cd]5\sigma_{1/2}^2 6\sigma_{1/2}^2 5\pi_{1/2}^B 5\pi_{3/2}^A\rangle$ pro $\Omega = 1$, zeleně, plná čára, pro $R < 5 a_0$ tato křivka prakticky koinciduje s modrou) a součet pravděpodobností (body odpovídajících barev spojené soustavou přímek) $p_m(\delta) = p_\downarrow + p_\uparrow$ odpovídající dvěma nejbližším racionálním aproximacím přesné fáze f odpovídající hledanému vlastnímu číslu (metoda IPEA A).

¹¹⁵ Přerušovanou čarou jsou v grafu vyznačeny dolní meze pro součet pravděpodobností $p_m(\delta) = p_\downarrow + p_\uparrow$ pro metodu IPEA A dané vztahem

Numerické porovnání úspěšností algoritmů IPEA A a IPEA B

Pro porovnání metod IPEA A a IPEA B jsem provedl simulace diagonalizace matice KRCI hamiltoniánu pro CI rozvoj (označovaný „LCI(IV,6)“ v této práci) vymezený GAS prostory s obsazením uvedeným v tabulce 8 níže. E_{min} a E_{max} byly zvoleny stejně jako v případě simulací „IPEA A-LCI(I)“, tedy $E_{min} = -6481,20 E_0$ a $E_{max} = -6480,70 E_0$. Vstupní odhad vlastního vektoru KRCI hamiltoniánu pro výpočet stavu $X 0^+$ byl zvolen jako dvoudeterminantový odhad uvedený ve vztahu (415) a pro výpočet stavu $A 1$ jako jednodeterminantový uvedený v obr. 29. Počet iterací a tedy počet bitů v dvojkovém rozvoji algoritmem zjišťované fáze byl v případě následujících simulací (IPEA A i IPEA B) použit $m = 17$, stejně jako v předcházejícím textu a stejně jako v článku [1].

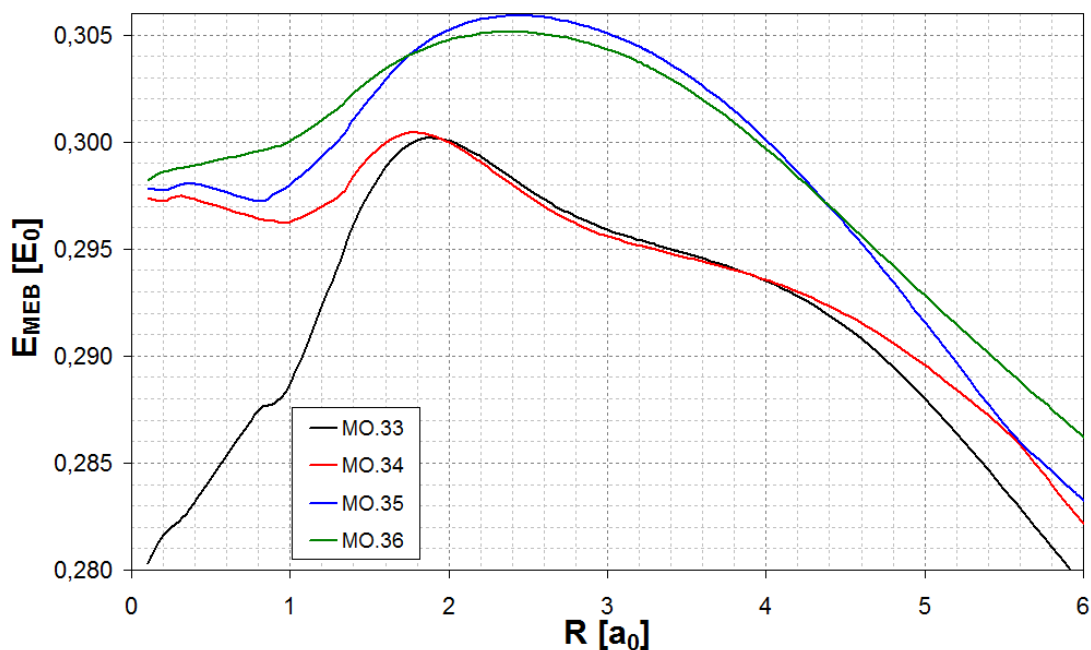
	min.e ⁻	max.e ⁻	
LCI(IV, n)			KP of MEBs
GAS N= GAS III	6	6	virt.
GAS II GAS II	4	6	5 $\pi_{3,2}$
			5 $\pi_{1,2}$
			6 $\sigma_{1,2}$
			5 $\sigma_{1,2}$

Tabulka 8: Rozvoj CI specifikovaný podle obsazení GAS prostorů pro metodu „LCI(IV, n)“ použitou v této části (n značí počet virtuálních Kramerových párů vymetujících prostor GAS III, zde byla použita varianta $n = 6$, která vede dle tabulky 4 na CI rozvoje o délkách 2680 Slaterových determinantů (konfigurací) (pro stavy symetrie ireducibilní koreprezentace A (tedy zahrnujíc $X 0^+$)), respektive 2640 Slaterových determinantů (stavy ireducibilní koreprezentace B (zahrnujíc $A 1$))).

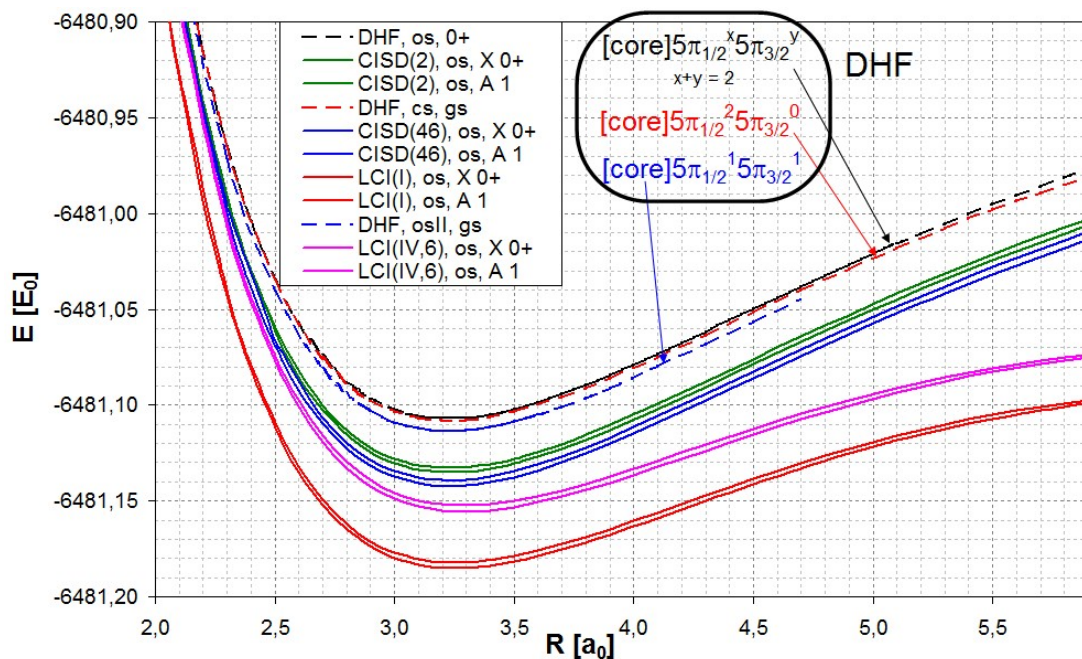
Volba rozvoje LCI(IV,6) je „střední cestou“ mezi CAS(4,4) a CISD(n) (pro větší n) a lze se tak domnívat, že by mohla poskytovat dobrý popis rovnovážné geometrie i nepříliš zkreslený popis disociace molekuly. $n = 6$ bylo vybráno s ohledem na časovou zvládnutelnost simulace (CI rozvoje mají podobnou délku jako v případě metody CISD(46), kde jsem dobu pro simulaci výpočtů již znal (ne více jak tři hodiny pro jeden bod na disociační křivce)), nicméně, není volbou

nejvhodnější, neboť hraničním orbitalem je poté $10\sigma_{1/2}$ („MO.34“), jehož křivka závislosti energie EMEB na mezijaderné vzdálenosti R se v oblasti $R \in \langle 3,9 a_0; 3,95 a_0 \rangle$ kříží s křivkou EMEB = EMEB(R) pro $5\delta_{3/2}$ („MO.33“). Proto je třeba v této oblasti dát pozor na zadání prostorů GAS ve vstupu pro DIRAC, aby bylo vymezení CI rozvoje v celé počítané oblasti disociační křivky navzájem konzistentní.

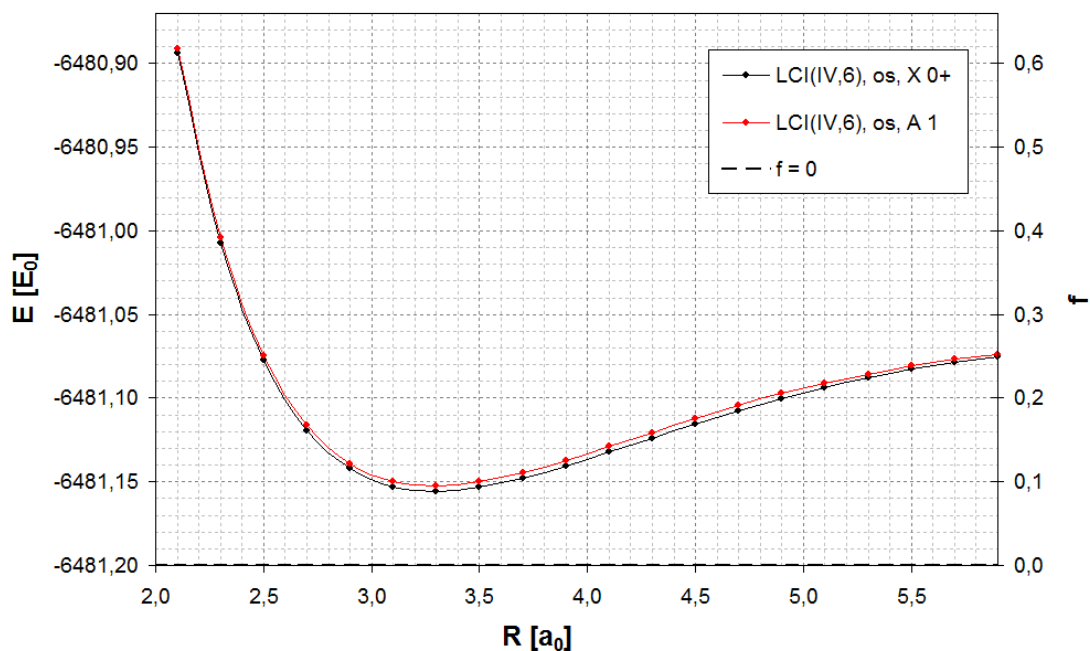
V grafu 21 porovnávám disociační křivky získané metodou LCI(IV,6) s disociačními křivkami z ostatních metod, v grafu 22 pak uvádím výsledky simulace IPEA A (a IPEA B) algoritmů pro diagonalizaci matice KRCI hamiltoniánu. Metody IPEA A a IPEA B poskytují stejné hodnoty energie, mohou se lišit pouze pravděpodobností úspěchu p_m , které porovnává graf 24.



Graf 10b: Závislost energie vybraných MO (Kramerových párů vzniklých řešením KR-DHF rovnic) na mezijaderné vzdálenosti R .

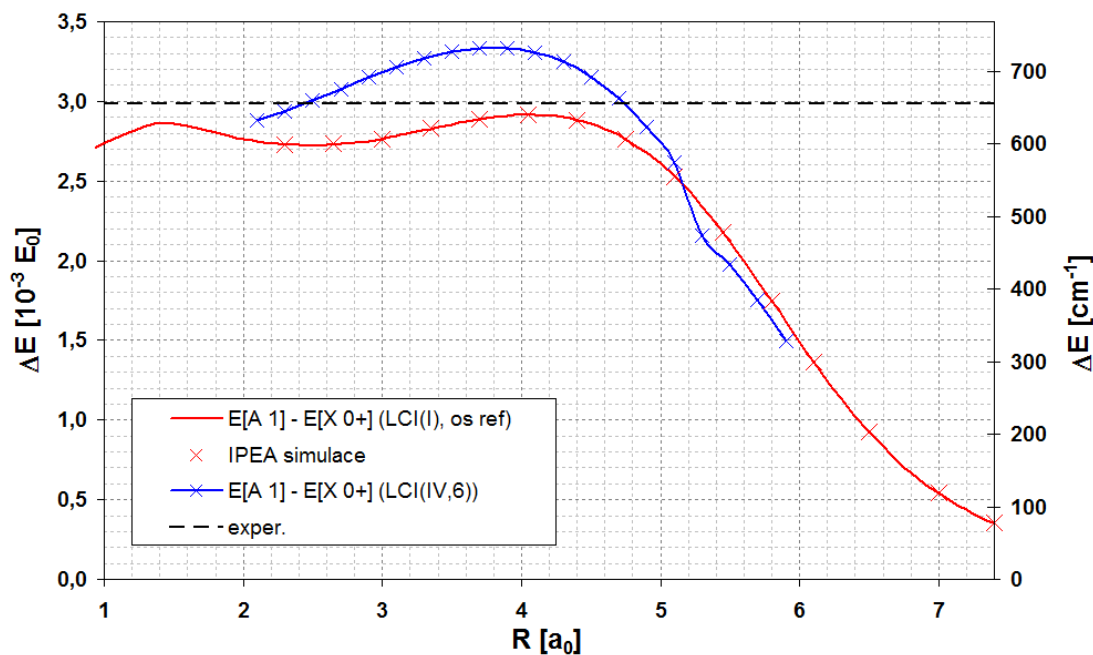


Graf 21: Srovnání disociačních křivek stavů dvou energeticky nejnižších elektronových stavů molekuly SbH - $X\ 0^+$ a $A\ 1$ v rámci metod DHF (přerušované křivky), CISD(2), CISD(46), LCI(I) a metody použité v rámci simulací k porovnání IPEA A a IPEA B algoritmů – LCI(IV,6). Je patrné, že metoda LCI(IV,6) podobně jako LCI(I) nenadhodnocuje markantně disociační energii (narozdíl od metod CISD a DHF), ale není spolehlivá pro stanovení rovnovážné mezijaderné vzdálenosti R_{min} .

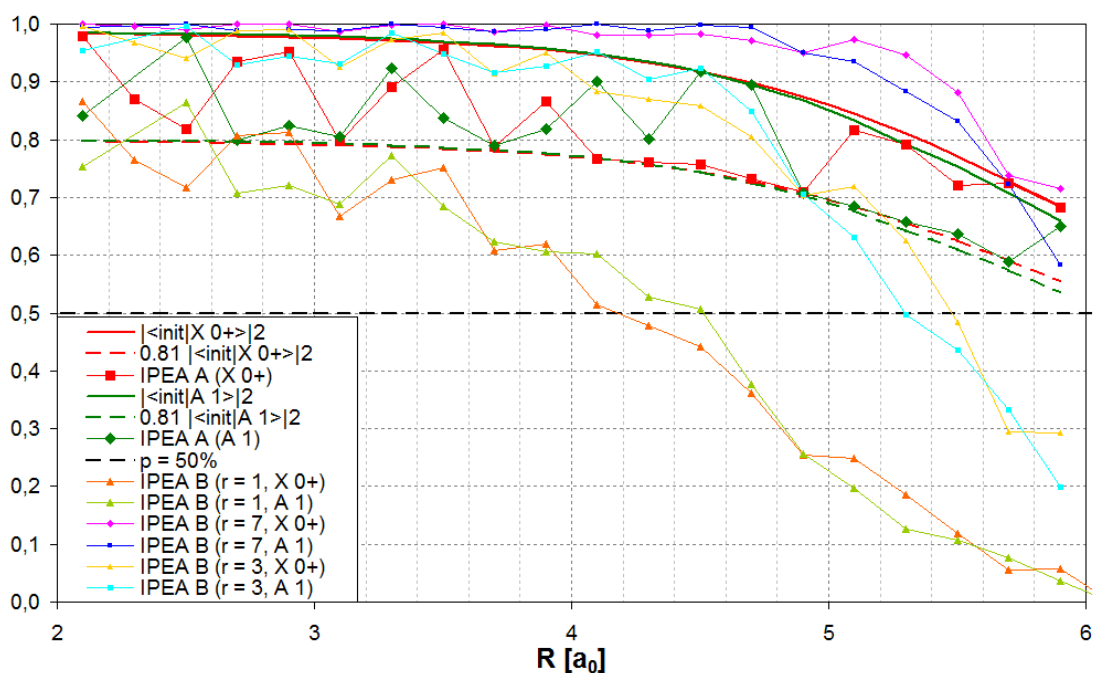


Graf 22: IPEA simulované disociační křivky pro základní ($X\ 0^+$) a první excitovaný ($A\ 1$) elektronový stav molekuly SbH v rámci metody KRCI (LCI(IV,6)).

Na vedlejší (pravé) ose y je vynesena fáze f , hledaná v algoritmu IPEA. S ohledem na to, že maximální možná chyba (stanovení energie (v rámci zvoleného CI rozvoje)) při zvoleném počtu iterací/bitů zjišťované fáze ($m = 17$) je $\delta E = 3,81 \cdot 10^{-6} E_0$, nejsou odchylky bodů (odpovídajících hodnotě E_{\downarrow}) od křivky (odpovídající „přesné“ hodnotě vlastního čísla daného KRCI hamiltoniánu) pozorovatelné v grafu.



Graf 23: Závislost energetické separace stavů $X 0^+ - A 1$ (její nenulovost je dána spin-orbitální interakcí a je čistě molekulovým jevem (disociační křivky obou stavů mají stejnou limitu)) na mezijaderné vzdálenosti R – výpočet metodami LCI(I) (červená křivka) a LCI(IV,6) – modrá křivka, pro které byla provedena simulace algoritmu IPEA (simulované body znázorněny křížkem). Přerušovanou čarou je znázorněna experimentální hodnota $\Delta E = 654,97 \text{ cm}^{-1}$ [55].



Graf 24: Závislost pravděpodobností úspěchu p_m metod IPEA A a IPEA B (parametr r udává počet opakování měření v každé iteraci metody IPEA B) na mezijaderné vzdálenosti R (pro výpočet energií základního stavu ($X 0^+$) a nejnižšího excitovaného stavu ($A 1$) molekuly SbH metodou KRCI s CI rozvojem vymezeným pomocí GAS prostorů definovaných v tabulce 8 výše.

Z výsledků uvedených v grafu 24 je patrné, že metoda IPEA B, je-li provedeno pouze jediné měření (k určení binární číslice zápisu fáze f , tj. počet měření v rámci každé iterace $r = 1$) v rámci každé iterace má obecně vždy nižší pravděpodobnost úspěchu než metoda IPEA A (což je zřejmé z kvantových logických obvodů pro obě metody – v rámci iterací IPEA A dochází (existuje-li dostatečný překryv vstupního odhadu vlastního vektoru diagonalizované matice s tímto vlastním vektorem) k postupnému zvyšování překryvu vektoru z kvantového registru b (viz str. 86-90) s vlastním vektorem odpovídajícím hledanému vlastnímu číslu, kdežto v případě metody IPEA B v každé iteraci pracujeme s původním vstupním odhadem vlastního vektoru). Rozdíl mezi pravděpodobnostmi úspěchu metody IPEA A a IPEA B (pro $r = 1$) dokumentovaný rozdílem mezi červenou křivkou s body (IPEA A, pro stav $X 0^+$) a oranžovou křivkou s body (IPEA B ($r = 1$), pro stav $X 0^+$), respektive rozdílem mezi tmavozelenou křivkou s body (IPEA A, pro stav $A 1$) a světle zelenou křivkou s body (IPEA B, pro stav $A 1$) se ukazuje být nezávislým na hodnotě δ , ale záviset na hodně překryvu $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ (kde $|\phi\rangle \in C^{2^l}$ je

vlastním vektorem KRCI hamiltoniánu odpovídajícím hledanému vlastnímu číslu a $|\psi_0\rangle$ je použitý vstupní odhad) – křivky pro daný elektronový stav a metody IPEA A a IPEA B ($r = 1$) mají velice podobný průběh pokud jde o (zdánlivě) „náhodnou“ složku (ve skutečnosti závislou na hodnotě δ).

Metoda IPEA B ($r = 1$) je nepoužitelná již pro $R > 4,1 a_0$, zatímco IPEA A je použitelná ještě pro $R = 5,9 a_0$ (výpočty pro vyšší R nebyly zatím z časových důvodů provedeny, nicméně budou provedeny v nejbližších dnech jako (předpokládám) součást dalšího výstupu). Pokud se v metodě IPEA B však v každé iteraci provede větší počet měření, pravděpodobnosti úspěchu p_m pro všechny studované hodnoty R poměrně rapidně konvergují k jedné.

Závislost pravděpodobnosti úspěchu metody IPEA B ($r = 1$) p_m na δ a $|\langle\psi_0|\phi\rangle|^2$

V grafu 25 uvádím studium závislosti pravděpodobnosti úspěchu metody IPEA B ($r = 1$) na velikosti překryvu $|\langle\psi_0|\phi\rangle|^2$. Na základě tvarové podobnosti křivek $p_m = p_m(R)$ pro metody IPEA A a IPEA B jsem odhadl tvar vzorce pro pravděpodobnosti úspěchu p_m v případě metody „IPEA B, $r = 1$ “ jako

$$p_m = S_m(\delta) \cdot T_m\left(|\langle\psi_0|\phi\rangle|^2\right), \quad (423)$$

kde T_m je neznámá¹¹⁶ funkce jedné nezáporné proměnné s parametrem $m \in N$ a funkce $S_m(\delta)$ odpovídá teoretické pravděpodobnosti úspěchu pro metodu IPEA A v případě, že $|\langle\psi_0|\phi\rangle|^2 = 1$, tedy dle (232), (233) platí

$$S_m(\delta) = (\alpha_m(\delta))^2 + (\alpha_m(1-\delta))^2, \quad (424)$$

kde

¹¹⁶ Předem lze uvážit, že musí platit $T_m(1) = 1$, $T_m(0) = 0$ a $T_m(x) \leq x \quad \forall x \in \langle 0; 1 \rangle$. Na základě analýzy kvantového logického obvodu pro metodu IPEA B lze také snadno usoudit, že by mělo dále platit $T_m(x) = x^\Lambda$, kde $\Lambda = \Lambda(m)$ bude lineární, roustoucí funkcí m .

$$\alpha_m(\delta) = \frac{1}{2^m} \frac{\sin(\pi \delta)}{\sin(\pi \delta / 2^m)}. \quad (425)$$

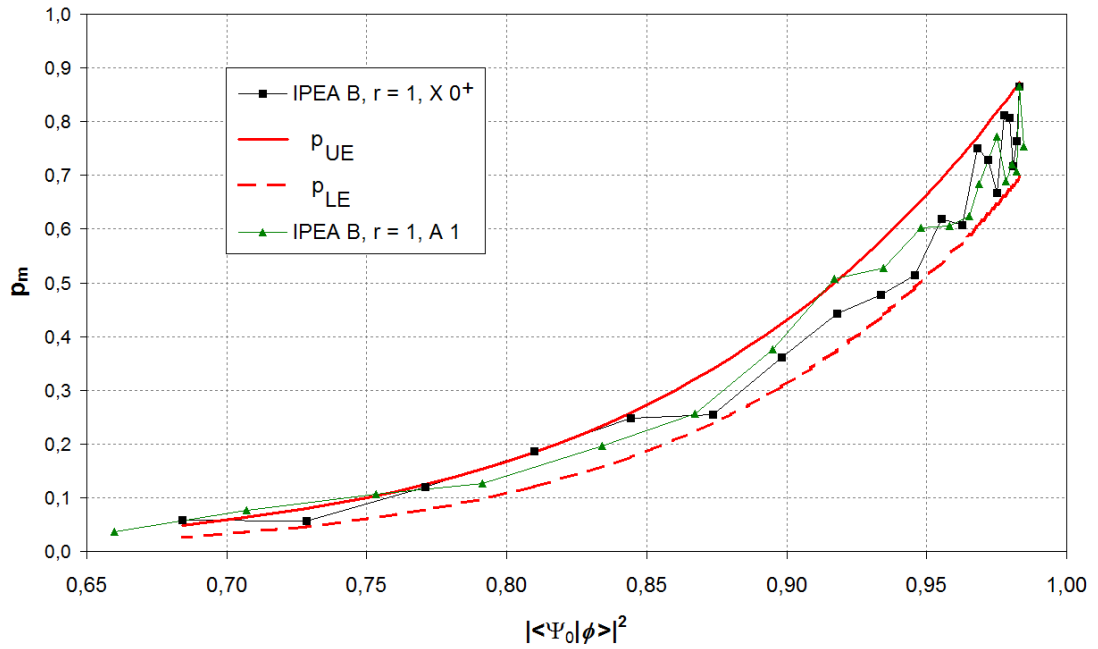
Hodnoty δ , $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ a p_m pro IPEA A, IPEA B ($r = 1, 3, 5, 7$) uvádí pro výpočty stavu $X 0^+$ tabulka 9 a pro výpočty stavu $A 1$ tabulka 10 níže.

$X 0^+$							
R [a_0]	$ \langle \psi_0 \phi \rangle ^2$	δ	p_m IPEA A	p_m IPEA B		- log(1- p_m) IPEA B	
				$r = 1$	$r = 5$	$r = 9$	$r = 17$
2,1	0,98313	0,0445	0,9789	0,8657	0,9999	6,91	
2,3	0,98215	0,2748	0,8704	0,7645	0,9913	2,91	4,35
2,5	0,98094	0,3820	0,8178	0,7170	0,9784	2,34	3,46
2,7	0,97945	0,8447	0,9347	0,8066	0,9989	4,48	7,17
2,9	0,97758	0,1144	0,9518	0,8122	0,9995	5,28	8,69
3,1	0,97519	0,4361	0,7973	0,6679	0,9720	2,23	3,40
3,3	0,97208	0,2229	0,8910	0,7295	0,9951	3,40	5,24
3,5	0,96798	0,0787	0,9553	0,7509	0,9991	5,43	9,75
3,7	0,96254	0,5651	0,7872	0,6078	0,9692	2,17	3,27
3,9	0,95535	0,7595	0,8657	0,6194	0,9905	3,03	4,59
4,1	0,94592	0,4767	0,7676	0,5149	0,9593	2,04	3,17
4,3	0,93368	0,5554	0,7617	0,4782	0,9559	2,01	3,02
4,5	0,91799	0,4059	0,7578	0,4426	0,9562	2,08	3,15
4,7	0,89820	0,4516	0,7317	0,3612	0,9341	1,85	2,82
4,9	0,87373	0,4696	0,7096	0,2544	0,8868	1,61	2,54
5,1	0,84419	0,1270	0,8173	0,2482	0,9125	2,07	3,97
5,3	0,80980	0,1074	0,7908	0,1855	0,8569	1,67	3,13
5,5	0,77081	0,8074	0,7200	0,1191	0,7473	1,24	2,41
5,7	0,72842	0,9481	0,7241	0,0564	0,5550	0,82	1,75
5,9	0,68418	0,0257	0,6832	0,0577	0,5396	0,76	1,53

Tabulka 9: Výsledky simulací pro stav $X 0^+$. Hodnoty překryvu vlastního vektoru $|\phi\rangle$ (zde konkrétně $|X 0^+\rangle$) KRCI hamiltoniánu (rozvoj LCI(IV,6)) a jeho vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ (zde konkrétně (415)), parametru δ ($f = f_\downarrow + \delta \cdot 2^{-m}$ viz (228)-(230)), pravděpodobnosti úspěchu p_m metod IPEA A a IPEA B (r označuje počet opakování měření v každé iteraci metody IPEA B – „úspěchem“ je pak majoritní výsledek měření u každého bitu shodný s očekávanou hodnotou pro fázi f_\downarrow a nebo f_\uparrow). V případě $r = 9$ a $r = 17$ jsou pravděpodobnosti úspěchu p_m pro metodu IPEA B (s těmito počty r opakování měření) již velmi blízké jedné a tak uvádím pouze záporně vzatý dekadický logaritmus jejich odchylky od jedné.

A 1							
R [a_0]	$ \langle \psi_0 \phi \rangle ^2$	δ	p_m IPEA A	p_m IPEA B		- log(1- p_m) IPEA B	
				$r = 1$	$r = 5$	$r = 9$	$r = 17$
2,1	0,98458	0,6661	0,8415	0,7536	0,9847	2,54	3,72
2,5	0,98318	0,2893	0,9766	0,8645	0,9999	6,82	12,00
2,7	0,98204	0,0558	0,8000	0,7076	0,9725	2,24	3,44
2,9	0,98051	0,4517	0,8238	0,7202	0,9799	2,38	3,49
3,1	0,97837	0,6344	0,8055	0,6890	0,9743	2,26	3,39
3,3	0,97516	0,4132	0,9241	0,7723	0,9982	4,18	6,65
3,5	0,96880	0,8315	0,8372	0,6844	0,9842	2,55	3,75
3,7	0,96522	0,3195	0,7890	0,6242	0,9691	2,18	3,34
3,9	0,95810	0,4386	0,8184	0,6053	0,9785	2,38	3,48
4,1	0,94789	0,3347	0,9012	0,6016	0,9941	3,72	6,02
4,3	0,93445	0,8379	0,8011	0,5271	0,9726	2,30	3,41
4,5	0,91700	0,6715	0,9170	0,5069	0,9891	3,60	6,73
4,7	0,89489	0,0059	0,8946	0,3764	0,9691	2,85	5,38
4,9	0,86738	0,0118	0,7070	0,2566	0,8883	1,59	2,39
5,1	0,83418	0,4485	0,6851	0,1971	0,8514	1,51	2,41
5,3	0,79143	0,5794	0,6581	0,1267	0,7558	1,24	2,19
5,5	0,75323	0,4030	0,6370	0,1064	0,6911	1,02	1,83
5,7	0,70709	0,6470	0,5890	0,0762	0,5671	0,74	1,35
5,9	0,66004	0,3837	0,6505	0,0362	0,4054	0,54	1,17

Tabulka 10: Hodnoty překryvu vlastního vektoru $|\phi\rangle$ (zde konkrétně $|A 1\rangle$) KRCI hamiltoniánu (rozvoj LCI(IV,6)) a jeho vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ (zde konkrétně viz obr. 29), parametru δ ($f = f_\downarrow + \delta \cdot 2^{-m}$ viz (228)-(230)), pravděpodobnosti úspěchu p_m metod IPEA A a IPEA B (r označuje počet opakování měření v každé iteraci metody IPEA B – „úspěchem“ je pak majoritní výsledek měření u každého bitu shodný s očekávanou hodnotou pro fázi f_\downarrow a nebo f_\uparrow). V případě $r = 9$ a $r = 17$ jsou pravděpodobnosti úspěchu p_m pro metodu IPEA B (s těmito počty r opakování měření) již velmi blízké jedné a tak uvádím pouze záporně vzaty dekadický logaritmus jejich odchylky od jedné.



Graf 25: Pravidelnost úspěchu p_m pro metodu IPEA B ($r = 1$) jako funkce překryvu mezi vlastním vektorem KRCI hamiltoniánu ($|\phi\rangle$) a jeho vstupním odhadem ($|\psi_0\rangle$) – černá křivka s body (stav $X 0^+$) a zelená křivka s body (stav $A 1$). Na základě numerických experimentů jsem navrhl výrazy pro horní (p_{UE} , plná červená křivka) a dolní (p_{LE} , přerušovaná červená křivka) odhady p_m tvaru (426) a (427).

$$p_{UE} = |\langle \psi_0 | \phi \rangle|^\Lambda, \quad (426)$$

kde hodnota exponentu $\Lambda = 16$ byla získána fitem, stejně jako odhad prefaktoru (1,00 v dobrém přiblížení). Domnívám se, že hodnota exponentu bude záviset na počtu iterací (v tomto případě $m = 17$) a bude s počtem iterací růst¹¹⁷.

¹¹⁷ Právě v tomto případě platí $\Lambda = m - 1$. Tento odhad plánuji ověřit v rámci další práce na této problematice. Odhad je založen na následující úvaze – v dalším označme

$$\Theta \equiv |\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2, \quad (428)$$

protože pravidelnost úspěchu p_m je součtem dvou pravidelností pro dvě nejbližší fáze, lze bez újmy na obecnosti považovat p_m za pravidelnost pro určení fáze jediné, ovšem v rámci algoritmu s $m \rightarrow m - 1$ iteracemi. V k -té iteraci může být změřena bitová hodnota odpovídající k -té

$$p_{LE} = \frac{8}{\pi^2} \left| \langle \psi_0 | \phi \rangle \right|^\Omega, \quad (427)$$

binární číslici v zápisu fáze f_0 (odzadu), nebo bitová hodnota odpovídající k -té binární číslici v zápisu jiné fáze f_p (kde p je náhodné kladné celé číslo). Pokud nevíme nic o vzájemném vztahu fází odpovídajících různým vlastním číslům operátoru \hat{U} (který je v algoritmu diagonalizován), je rozumné předpokládat, že vztah k -té binární číslice f_p ke k -té binární číslici f_0 bude odpovídat nulové korelaci – v polovině iterací tak budou tyto číslice stejné (pak bude výsledkem měření na kvantovém registru a s jistotou správný bit, respektive s pravděpodobností $S_{m,k}(\delta)$) a v polovině iterací budou opačné (tj. 0 a 1, popř. 1 a 0, pak bude výsledkem měření na kvantovém registru a správný bit s pravděpodobností odpovídající zastoupení fáze f_0 , tedy $\Theta \cdot S_{m,k}(\delta)$). Je-li tedy provedeno $(m - 1)$ iterací, bude při stanovování pravděpodobnosti úspěchu pm metody IPEA B ($r = 1$) v součinu člen Θ v $(m - 1)/2$ případech (pro jednoduchost předpokládejme, že je m liché, což v našem případě splněno je ($m = 17$)) a ve všech případech bude v součinu člen $S_{m,k}(\delta)$. Ze součinu $S_{m,k}(\delta)$ pro všechna k vznikne výraz tvaru $S_m(\delta)$ a

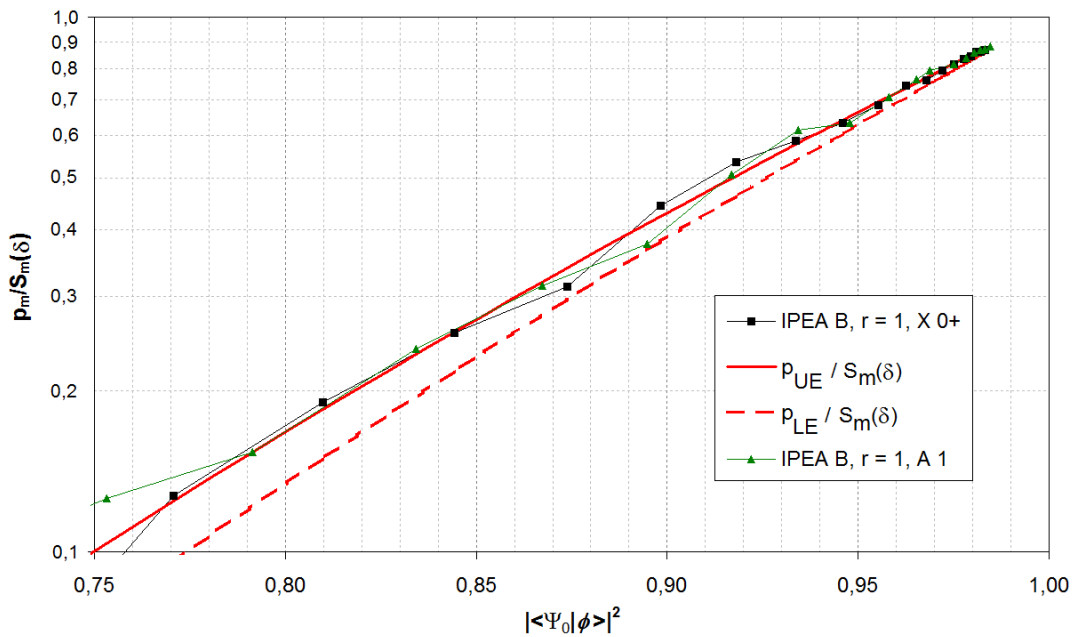
$$\Theta^{\frac{m-1}{2}} = \left| \langle \psi_0 | \phi \rangle \right|^{m-1}, \quad (429)$$

což po porovnání s (426) skutečně vede na vztah $\Lambda = m - 1$. Dokonalá nekorelace bitových rozvojų fází odpovídajících vlastním vektorům matice \hat{U} na něž (resp. jejich lineární kombinace) postupně kolabuje kvantový registr a v průběhu jednotlivých iterací metody IPEA B ($r = 1$) je však obecný a zjednodušující předpoklad, který nebude přesně splněn pro drtivou většinu matic \hat{U} , které budou v praxi předmětem možného studia (diagonalizace). Proto má smysl zabývat se krajními odhady – dokonalou antikorelací, kdy $p_m \cong \Theta^{m-1} S_m(\delta) = \left| \langle \psi_0 | \phi \rangle \right|^{2m-2} S_m(\delta)$ (což představuje dolní mez k hodnotě pravděpodobnosti úspěchu pm) a co nejdokonalější korelací navzájem odlišných fází (pak $p_m \cong \Theta S_m(\delta) = \left| \langle \psi_0 | \phi \rangle \right| S_m(\delta)$, což odpovídá pravděpodobnosti zjištění dané fáze pomocí metody IPEA A a představuje horní mez k pravděpodobnosti úspěchu p_m). Tedy lze takto „odvodit“ intervalové vymezení pro p_m i pro metodu IPEA B ($r = 1$) a to

$$\Theta^{2(m-1)} S_m(\delta) \leq p_m \leq \Theta^{m-1} S_m(\delta). \quad (430)$$

kde prefaktor $8/\pi^2$ i hodnota exponentu $\Omega = 18$ byly získány úpravou vztahu (426) tak, aby byl zahrnut vliv δ (232)-(243), respektive byla (větší) jistota, že studovaný odhad pravděpodobnosti bude skutečně zdola.

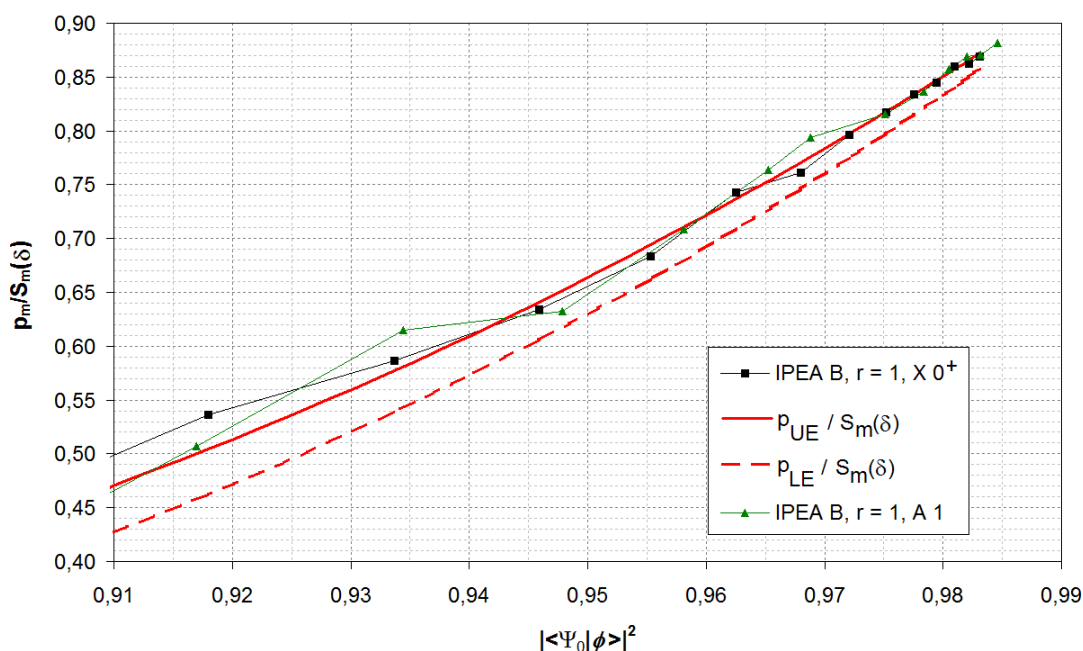
Vycházejí ze vztahu (423) jsem vynesl závislost podílu pravděpodobnosti úspěchu p_m a funkce $S_m(\delta)$ na překryvu $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$. Proložení této závislosti¹¹⁸ pravou stranou (426) (pro volbu $\Lambda = 16$) se ukázalo jako kvalitativně dobré jak pro hodnoty p_m odpovídající základnímu stavu $X 0^+$, tak pro hodnoty p_m odpovídající stavu $A 1$ (viz graf 26).



Graf 26: Studium závislosti pravděpodobnosti úspěchu p_m pro metodu IPEA B ($r = 1$) na velikosti překryvu $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ pro základní stav ($X 0^+$, černá křivka s body) a první excitovaný stav ($A 1$, zelená křivka s body). Funkce $S_m(\delta)$ je definována vztahem (424) a představuje pravděpodobnost úspěchu metody IPEA A pro stejnou hodnotu parametru δ a jednotkový překryv. Plnou červenou čarou ve v grafu znázorněna závislost podílu $p_{UE}/S_m(\delta)$ na $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ a přerušovanou červenou čarou závislost podílu $p_{LE}/S_m(\delta)$ na $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ (p_{UE} a p_{LE} jsou dány vztahy (426) a (427)).

¹¹⁸ Dle vztahu (423) platí

$$T_m \left(|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2 \right) = p_m / S_m(\delta). \quad (431)$$



Graf 27: Studium závislosti pravděpodobnosti úspěchu p_m pro metodu IPEA B ($r = 1$) na velikosti překryvu $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ - detail oblasti pro nejvyšší hodnoty $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$.

Závislost pravděpodobnosti úspěchu metody IPEA B p_m na r

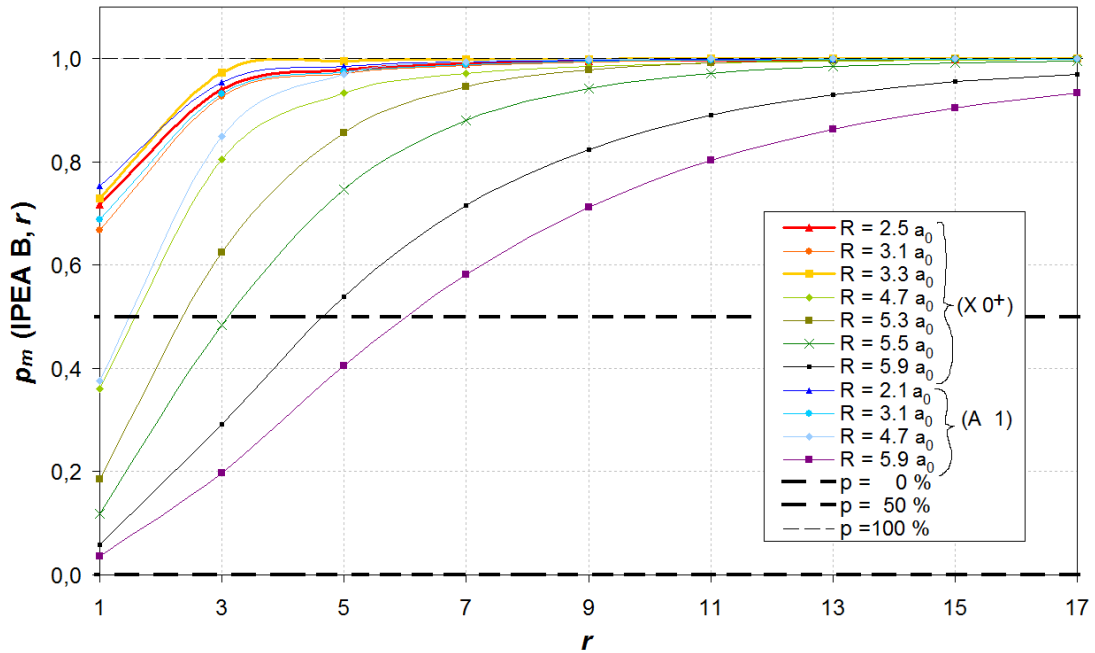
Konvergence pravděpodobnosti úspěchu metody IPEA B s rostoucím počtem opakování r měření v každé z iterací metody je zobrazena v grafech 28 a 29. Směrnice lineárních částí křivek z grafu 29 se pohybují mezi hodnotami 0,3 až 2,2 (pro různé body disociačních křivek stavů $X 0^+$ a $A 1$ – závislost hodnoty této směrnice na δ či $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ nebyla ze zjištěných dat zkoumatelná). Je patrné, že pro všechny studované body obou disociačních křivek konvergují pravděpodobnosti úspěchu p_m metody IPEA B s rostoucím počtem opakovaným měření r v každé iteraci k jedné i když p_m pro IPEA B ($r = 1$) jsou nižší než 0,5. V některých případech lze ukázat, že ani $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2 > 0,5$ nemusí být nutnou podmínkou pro takovou konvergenci pravděpodobností v případě metody IPEA B¹¹⁹.

¹¹⁹ Výpočty tohoto typu jsem pro molekulu SbH také provedl, ale jejich zpracování jsem z technicko-časových důvodů nestihl zahrnout do této práce. Domnívám se, že postačující podmínkou pro konvergenci p_m k 1 ($s r \rightarrow \infty$) je maximalita $g_0 |\langle \psi_0 | \phi_0 \rangle|^2$ (dolní index „0“ u ϕ označuje, že se

Kritické hodnoty mezijaderné vzdálenosti R_{krit} (nad R_{krit} je pravděpodobnost úspěchu dané metody nižší než 0,5 a tak ji nelze použít) pro různá r v rámci metody IPEA B jsou uvedena v tabulce 11.

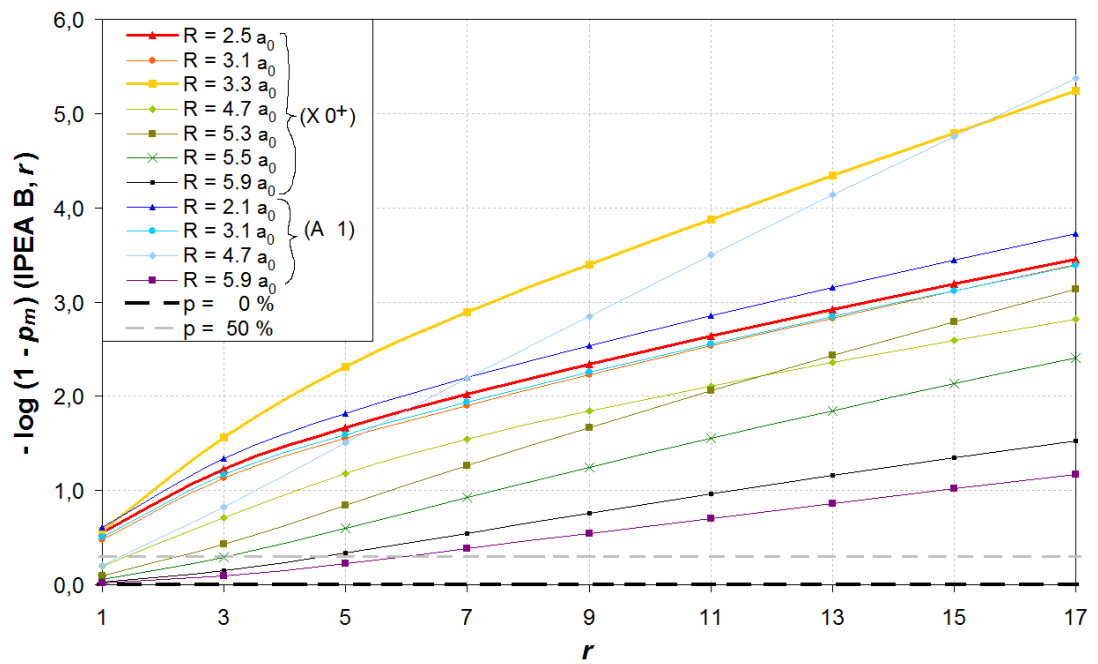
r	R_{krit} (IPEA B (r)) [a_0] $X 0^+$	R_{krit} (IPEA B (r)) [a_0] $A 1$
1	4,2	4,5
3	5,4	5,3
5	5,9	5,8
7	> 5,9	> 5,9

Tabulka 11: Kritické mezijaderné vzdálenosti R_{krit} pro metodu IPEA B pro různé hodnoty počtu opakování měření v každé iteraci algoritmu r .



Graf 28: Závislost pravděpodobností úspěchu p_m metody IPEA B na počtu opakování měření r v každé iteraci IPEA B (o výsledku měření pak rozhoduje bitová hodnota, která převažovala v sérii r opakování měření (proto jsou r lichá))

zabýváme vlastním vektorem odpovídajícím hledané fázi f_0 , $|\phi_k\rangle$ pak buď vlastní vektor diagonalizované matice a jemu odpovídající fáze f_k (tj. jemu odpovídající vlastní číslo diagonalizované matice je $\lambda_k = \exp(2\pi i f_k)$) v množině $W = \{g_k |\langle \psi_0 | \phi_k \rangle|^2 \mid k \in \{0, 1, \dots, p\}\}$, kde $f_k \in (0;1)$ jsou navzájem různé fáze, $|\phi_k\rangle$ vlastní vektory z charakteristického podprostoru C^{2^l} odpovídajícího fázi f_k a g_k násobnosti vlastních čísel $\lambda_k = \exp(2\pi i f_k)$.



Graf 29: Závislost pravděpodobností úspěchu p_m metody IPEA B na počtu opakování měření r v každé iteraci IPEA B (zobrazení „ $-\log(1 - p_m)$ “ umožňuje nahlédnout exponencialitu konvergence p_m k 1 a odlišení hodnot pravděpodobností blízkých 1).

3 Plány do budoucna

V nejbližší době plánuji pokračovat ve studiu (na základě teoretických úvah i numerické simulace kvantového algoritmu na klasickém počítači) závislosti pravděpodobnosti úspěchu p_m pro metodu IPEA B ($r = 1$) na počtu bitů m fáze f , které jsou určovány a na hodnotě překryvu vstupního počátečního odhadu $|\psi_0\rangle$ vlastního vektoru $|\phi\rangle$, tedy $|\langle\psi_0|\phi\rangle|^2$ a pokusím se formulovat podmínky pro které algoritmus IPEA B (r) poskytuje $p_m \rightarrow 1$ s $r \rightarrow +\infty$. Včetně studia hodnoty r potřebné pro dosažení dané hodnoty p_0 pravděpodobnosti úspěchu (v závislosti na m , $|\langle\psi_0|\phi\rangle|^2$ a případně i dalších parametrech úlohy – např. distribuce jiných vlastních čísel než je studované pro daný hamiltonián/evoluční operátor a daný počáteční odhad jeho vlastního vektoru).

Další oblastí možného zájmu je simulace diagonalizačního algoritmu pro Direct-mapping a rozklad evolučního operátoru na elementární hradla tak jak je ukázáno v kapitolách *Trotterův-Suzukiho rozvoj*, *Druhé kvantování*, *Jordan-Wignerova transformace* a *Rozklad evolučního operátoru*. V této souvislosti plánuji simulovat navíc procesy kvantového šumu, nepřesností v aplikaci elementárních hradel, v přípravě vstupního stavu, v měření, proces dekoherence a případně opravné kódy k zmírnění důsledků těchto procesů. Výsledkem by měla být kvantifikace potřebných počtů hradel a qubitů k realizaci diagonalizačního algoritmu, popřípadě jiných simulací kvantových systémů pro daný rozsah a přesnost výpočtu (tedy také stanovení optimální hodnoty řádu Trotterova rozvoje η (293) a počtu dílků q pro rozdělení časového intervalu Δt (v evolučním operátoru (194)) na podintervaly Δt_ε pro které je použito Trotterovy formule (293) (viz druhý odstavec pod vztahem (294)))

V neposlední řadě považuji za zajímavé studovat alternativy mezi direct- a compact-mappingem, které umožňují reprezentaci hamiltoniánu/evolučního operátoru v dostatečně efektivně aplikovatelném tvaru z hlediska počtu kvantových hradel (podobně jako kombinace Jordan-Wignerovy transformace a Direct-mappingu) a zároveň umožňují reprezentovat hospodárněji studovaný (odhad) vlastní(ho) vektor(u) než v případě Direct-mappingu. Domnívám se, že pro metodiku

vymezení prostoru konfigurací v metodě CI jak jak je popsáno nad tabulkou 3 by takové alternativy mohly být velmi vhodné.

Použití kvantového algoritmu pro diagonalizaci unitární matice v metodě konfigurační interakce (CI) (potažmo úplné konfigurační interakce – FCI) je pravděpodobně nejpřímochařejší aplikací kvantových algoritmů v ab initio kvantové chemii, nicméně může být zajímavé studovat možnosti použití výhod kvantových algoritmů i v rámci jiných ab initio kvantově-chemických metod (SCF, MCSCF, DFT, CC, ...).

Mezi systémy na kterých plánuji do budoucna studovat simulace kvantových algoritmů bych kromě molekuly SbH v rámci 4c-DC popisu bych rád připojil NOMO/CI výpočet nejjednodušších molekul (H_2 , HeH^+ , ...), respektive jejich různých iztopomerů. Článek na zabývající se touto tematikou právě s mým příspěvkem vzniká na pracovišti, kde jsem se zabýval i problematikou studovanou v této práci – Ústavu fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského.

Protože kvantové diagonalizační algoritmy vyžadují dolní odhad energie, rád bych se v další práci také vrátil k problematice, kterou jsem dříve studoval ve svých bakalářských pracech [53], [54] – konkrétně implementací algoritmu pro jednoduchý odhad dolní meze k energii do vybraných kvantově-chemických výpočetních programů.

Závěr

V teoretické části práce bylo provedeno stručné shrnutí teorie kvantového počítání potřebné pro práci s kvantovými algoritmy využitelnými v ab initio kvantové chemii.

Praktická část práce (shrnutí výsledků simulací kvantových algoritmů Iterative Phase Estimation A a B na klasickém počítači pro případ diagonalizace KRCI hamiltoniánu molekuly SbH pro dva LCI rozvoje a hodnoty mezijaderné vzdálenosti do $R \approx 2 a_0$ po $R \approx 6 a_0$) zahrnovala implementaci algoritmů IPEA A a IPEA B v programovacím prostředí C++ (v dané implementaci jde o kód ekvivalentní kódu, který by bylo možné zapsat v programovacím jazyce QCL), jejich propojení s programem DIRAC – pro čtyřkomponentní all-electron relativistické výpočty založené na Dirac-Coulombově hamiltoniánu a několik testovacích simulací obou variant kvantového algoritmu Iterative Phase Estimation (IPEA A i IPEA B).

Pomocí simulované kvantové diagonalizace matice KRCI hamiltoniánu v rámci LCI(I) rozvoje (charakterizovaného na obrázku 24 a v tabulkách 3 a 4) byla studována energetická separace ΔE dvou energeticky nejnižších elektronových stavů molekuly SbH – základního stavu $X 0^+$ a excitovaného dubletu $A 1$ včetně její závislosti na mezijaderné vzdálenosti R (štěpení hladiny $^3\Sigma^-$ je čistě molekulárním fenoménem, energetická separace ΔE pro $R > 4 a_0$ s rostoucí mezijadernou vzdáleností R klesá k nule, viz graf 14, červená křivka). V tomto případě byla použita pouze varianta IPEA A a vstupní odhad vlastního vektoru $|\psi_0\rangle$ byl volen jako jednodeterminantový ($\pi_{1/2}^2\pi_{3/2}^0$ pro stav $X 0^+$ a $\pi_{1/2}^B\pi_{3/2}^A$ pro $A 1$ ($\Omega = +1$)). Taková volba vede na závislost pravděpodobnosti úspěchu p_m algoritmu uvedenou v grafu 20 (červené křivky odpovídají základnímu stavu $X 0^+$, zelené excitovanému dubletu $A 1$, modré teoretickým mezím pro pravděpodobnost úspěchu p_m za předpokladu použití dvoudeterminantového odhadu pro základní stav $X 0^+$ ve tvaru lineární kombinace konfigurací $\pi_{1/2}^2\pi_{3/2}^0$ a $\pi_{1/2}^0\pi_{3/2}^2$ s koeficienty $c_1 = (2/3)^{1/2}$ a $c_2 = -(1/3)^{1/2}$ (což odpovídá v dobrém přiblížení diagonalizaci v rámci aktivního prostoru (2,2) pro rovnovážnou oblast disociační křivky, tj. $R = 3,3 a_0$). Kritická mezijaderná R_{krit} vzdálenost nad kterou již nelze metodu IPEA A použít z důvodu nedostatečně

velkého překryvu mezi vstupním odhadem vlastního vektoru KRCI hamiltoniánu a vlastním vektorem KRCI hamiltoniánu v rámci dané báze Slaterových determinantů byly $R_{krit} = 4,75 a_0$ pro $X 0^+$ a $R_{krit} = 6,03 a_0$ pro $A 1$. Pokud by byl použit dvoudeterminantový odhad, bylo by možné zvýšit R_{krit} pro základní stav $X 0^+$ na hodnotu blízkou hodnotě pro excitovaný dublet $A 1$, tedy $R_{krit}' = 6,18 a_0$. Při simulaci bylo uvažováno $m = 17$ iterací metody IPEA A, tedy 17-bitová přesnost v určení fáze odpovídající hledané energii (rozpětí intervalu ve kterém byla hledána energie bylo zvoleno jako $0,5 E_0$), takto získané simulované hodnoty energií se od přesných hodnot (přesných v rámci dané báze Slaterových determinantů) liší o méně než $\delta E = 3,82 \cdot 10^{-6} E_0$ (odpovídá $0,837 \text{ cm}^{-1}$ na ose vlnočtů), což činí přibližně 0,1% z experimentálně určené hodnoty energetické separace stavů $T_e = E(A 1, R_{min}) - E(X 0^+, R_{min}) = 654,97 \text{ cm}^{-1}$ [1], [55].

Pro LCI rozvoj o menším počtu Slaterových determinantů – LCI(IV,6), charakterizovaný v tabulce 8, stejný počet iterací ($m = 17$) i šířku okna ve kterém lze očekávat hledané hodnoty energie ($E_{max} - E_{min} = \Delta E = 0,5 E_0$) jsem provedl numerické porovnání výsledků simulací algoritmů IPEA A a IPEA B. Použitý vstupní odhad vlastního vektoru pro stav $A 1$ byl determinant $\pi_{1/2}^B \pi_{3/2}^A$ ($\Omega = +1$), ale pro stav $X 0^+$ byl zvolen ve tvaru lineární kombinace konfigurací $\pi_{1/2}^2 \pi_{3/2}^0$ a $\pi_{1/2}^0 \pi_{3/2}^2$ s koeficienty $c_1 = (2/3)^{1/2}$ a $c_2 = -(1/3)^{1/2}$, což je přístup vedoucí ke srovnatelným hodnotám pravděpodobnosti úspěchu p_m pro oba stavy – $X 0^+$ a $A 1$. Disociační křivky pro tento případ uvádím v grafu 22, porovnání závislosti $\Delta E = \Delta E(R)$ pro LCI(IV,6) rozvoj a LCI(I) rozvoj v grafu 23 a konečně, porovnání pravděpodobnosti úspěchu metod IPEA A a metody IPEA B pro různé počty r opakování každé iterace uvádí graf 24. Metoda IPEA A je v tomto případě dobře použitelná až do hodnoty $R = 6 a_0$, zatímco metoda IPEA B pro jediné opakování ($r = 1$) v každé iteraci je použitelná pro oba elektronové stavy nejvýše do $R = 3,9 a_0$, nicméně pro dostatečně velký počet opakování (ukazuje se, že pro všechny body na studované části disociační křivky ($R < 6 a_0$) postačuje volba $r = 7$ opakování měření v každé iteraci metody IPEA B a výsledná pravděpodobnost úspěchu p_m metody IPEA B převyšuje ve všech bodech (až na poslední odpovídající největší mezijaderné vzdálenosti, viz graf 24) pravděpodobnost úspěchu metody IPEA A (samozřejmě za cenu minimálně 7-násobně delšího výpočetního času). Konvergence hodnoty p_m s rostoucím počtem opakování r je pro metodu IPEA B a výše popsané uspořádání znázorněna v grafech

28 a 29. Na praktickém případě simulace diagonalizace KRCI hamiltoniánu pro LCI(IV,6) rozvoj jsem také numericky studoval závislost pravděpodobnosti úspěchu p_m metody IPEA B ($r = 1$) na překryvu $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ vlastního vektoru $|\phi\rangle$ a jeho vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ a odhadoval souvislost exponentu v této závislosti (viz vztahy (426)-(431)) a počtu iterací m v této simulaci. S pomocí znalosti této závislosti bude možné v budoucnu odpovít podobný vztah i pro metodu IPEA B pro $r > 1$.

Seznam použité literatury

- [1] Veis L., Višňák J., Fleig T., Knecht S., Saue T., Visscher L., Pittner J.: Relativistic quantum chemistry on quantum computers, *Phys. Rev. A* **85** (2012) 030304.
- [2] Feynmann R. P.: Simulating Physics with Computers, *International Journal of Theoretical Physics*, Vol. **21**, Nos. 6/7, 1982.
- [3] Aaronson S. J.: Limits on Efficient Computation in the Physical World, Dissertation, University of California, Berkeley, 2004.
- [4] Abrams D. S., Lloyd S., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5162 (1999).
- [5] Aspuru-Guzik A., Dutoi A. D., Love P. J., Head-Gordon M., *Science* **309**, 1704(2005).
- [6] Whitfield J. D.: At the intersection of quantum computing and quantum chemistry, dissertation, Harvard University, Cambridge, Massachusetts, November 2011.
- [7] Lanyon B. P., Whitfield J. D., Gillett G. G., Goggin M. E., Almeida M. P., Kassal I., Biamonte J. D., Mohseni M., Powell B. J., Barbieri M., Aspuru-Guzik A., White A. G.: Towards Quantum Chemistry on a Quantum Computer, *Nature Chemistry* **2**, 106–111 (2010).
- [8] Ömer B.: Quantum Programming in QCL, January 2000, Institute of Information Systems, Technical University of Vienna.
- [9] Chiribella G., D'Ariano G. M., Perinotti P., Valiron B.: Beyond Quantum Computers (arXiv:0912.0195v5 [quant-ph] 20 Dec 2009).
- [10] D. S. Abrams and S. Lloyd. Nonlinear quantum mechanics implies polynomial-time solution for NP-complete and #P problems. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3992–3995, 1998. quant-ph/9801041.
- [11] Melikidze A., Dobrovitski V. V., De Raedt H. A., Katsnelson M. I., Harmon B. N.: Parity effects in spin decoherence, *Phys. Rev. B* **70**, 014435 (2004).
- [12] Lanyon B. P., Weinhold T. J., Langford N. K., O'Brien J. L., Resch K. J., Gilchrist A., White A. G.: Manipulating Biphotonic Qutrits, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 060504 (2008).
- [13] Neeley M., Ansmann M., Bialczak R. C., Hofheinz M., Lucero E., O'Connell A. D., Sank D., Wang H., Wenner J., Cleland A. N., Geller M. R., Martinis J. M.:

- Emulation of a Quantum Spin with Superconducting Phase Qudit, *Science* **325**, 722 (2009).
- [14] Nielsen M. A., Chuang I. L.: Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge University Press, 2000.
- [15] Gruska J.: Quantum Computing, Advanced Topics in Computer Science Series, The McGraw-Hill Companies, 1999, ISBN 007 709503 0.
- [16] Dobšíček M.: Quantum computing, phase estimation and applications, Ph.D. thesis, Czech Technical University in Prague, Faculty of Electrical Engineering, Department of Computer Science and Engineering, January 2008.
- [17] Barenco A.: A universal two-bit gate for quantum computation. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 449:679-683, 1995.
- [18] Deutsch D., Barenco A., Ekert A.: Universality in quantum computation. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 449:669-677, 1995.
- [19] Shi Y.: Both Toffoli and Controlled-NOT need little help to do universal quantum computation. *Quantum Information and Computation*, **3** (1):84-92, 2003.
- [20] Lloyd S.: Almost any quantum logic gate is universal. *Phys Rev Lett*, **75**:346-349, 1995.
- [21] Deutsch D.: Quantum computational networks. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 425:73-90, 1989.
- [22] Barenco A., Bennett Ch. H., Cleve R., DiVincenzo D. P., Margolus N., Shor P., Sleator T., Smolin J. A., Weinfurter H.: Elementary gates for quantum computation. *Phys Rev A*, **52**:3457-3467, 1995.
- [23] Shor P. W.: Fault-tolerant quantum computation. In IEEE Symposium on Foundations of Computer Science, pages 56-65, 1996.
- [24] Kitaev A. Y.: Quantum computations: Algorithms and error correction. *Russian Mathematical Surveys*, **52** (6):1191-1249, 1997.
- [25] Boykin P. O., Mor T., Pulver M., Roychowdhury V., Vatan F.: A new universal and fault-tolerant quantum basis. *Information Processing Letters*, **75**:101-107, 2000.
- [26] Calderbank A. R., Shor P. W.: Good quantum error-correcting codes exist. *Phys Rev A*, **54**:1098-1105, 1996.
- [27] Steane A.: Multiple-particle interference and quantum error correction. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 452:2551-2577, 1996.

- [28] Wikipedia: Hadamard transform,
http://en.wikipedia.org/wiki/Hadamard_transform.
- [29] Ritter T.: Walsh-Hadamard Transforms: A Literature Survey, 1996-08-15,
<http://www.ciphersbyritter.com/RES/WALHAD.HTM>.
- [30] Akansu A. N., Poluri R.: Walsh-Like Nonlinear Phase Orthogonal Codes for Direct Sequence CDMA Communications, *IEEE Transactions on Signal Processing*, Vol. 55, No. 7, July 2007.
- [31] Ömer B.: Structured Quantum Programming, May 2003, Institute of Information Systems, Technical University of Vienna.
- [32] Trotter H. F.: On the product of semigroups of operators. *Proc. Am. Math. Soc.*, **10**:545-551, 1959.
- [33] Chernoff P. R.: Note on product formulas for operator semigroups. *J. Functional Analysis*, **2**:238-242, 1968.
- [34] Suzuki M.: Hybrid exponential product formulas for unbounded operators with possible applications to Monte Carlo simulations, *Phys Lett A* **201** (1995) 425-428.
- [35] Glasner M., Yevick D., Hermansson B.: Generalized propagation formulas of arbitrarily high order, *J. Chem. Phys.* **95** (1991), 8266-8272.
- [36] Hatano N., Suzuki M.: Finding Exponential Product Formulas of Higher Orders, *Quantum Annealing and Other Optimization Methods, Lecture Notes in Physics, Volume 679*. ISBN 978-3-540-27987-7. Springer-Verlag Berlin/Heidelberg, 2005, p. 37.
- [37] Dobšíček M., Johansson G., Shumeiko V., Wendin G.: Quantum Simulations: Report, Technical report, Microtechnology and Nanoscience, MC2, Chalmers, S-412 96 Göteborg, Sweden, 2010.
- [38] Szabo A., Ostlund N. S.: *Modern Quantum Chemistry*, McGraw-Hill Publishing Company (1989), 95.
- [39] Ortiz G., Gubernatis J.E., Knill E., Laflamme R.: Quantum Algorithms for Fermionic Simulations, *Phys. Rev. A* **64**, 022319 (2001).
- [40] Ovrum E., Hjorth-Jensen M.: Quantum computation algorithm for many-body studies, 1. 2. 2008, dosud nepublikováno, arXiv:0705.1928v1.
- [41] Čárský P., Urban M., *Ab initio výpočty v chemii*, SNTL, Praha, 1985.
- [42] Shavitt I., v knize *Modern Theoretical Chemistry*, ed. Schaefer H.F., III, Vol. 3, Plenum Press, New York 1977.

- [43] Davidson E.R., v knize *The World of Quantum Chemistry*, Proceedings of the First International congress on Quantum Chemistry, eds. Daudel R., Pullman B., Reidel D., Dordrecht 1974.
- [44] Bagus P.S., Liu B., McLean A. D., Yoshimine M., v knize *Computational Methods for Large Molecules and Localized States in Solids*, eds. Herman F., McLean A. D., Nesbet R. K., Plenum Press, New York 1973.
- [45] Bunker R. J., Peyerimhoff S. D., *Theor. Chim. Acta* **35** (1974).
- [46] Roos B., v knize *Computational Techniques in Quantum Chemistry and Molecular Physics*, eds. Diercksen G. H. F., Sutcliffe B. T., Veillard A., Reidel D., Dordrecht 1975.
- [47] Hurley A. C.: *Electron Correlation in Small Molecules*, Academic Press, London 1976.
- [48] Fišer J.: *Úvod do kvantové chemie*, Academia, Praha 1983.
- [49] Skála L.: *Kvantová teorie molekul*, Univerzita Karlova, Praha, 1995, ISBN 80-7184-007-6.
- [50] Dyllal K. G., Faegri K. Jr.: *Introduction to Relativistic Quantum Chemistry*, Oxford University Press, 2007.
- [51] Dirac author group: DIRAC04: documentation, September 2004, p. 25, <http://dirac.chem.sdu.dk/doc/>.
- [52] Visscher L., Dyllal K. G.: Dirac-fock atomic electronic structure calculations using different nuclear charge distributions. *At. Data Nucl. Data Tabl.*, 67:207, 1997.
- [53] Višňák J.: *Integrální chyba řešení Schrodingerovy rovnice pro vybrané systémy*, Bakalářská práce, Univerzita Karlova v Praze, 2007.
- [54] Višňák J.: *Matematický úvod a identity používané pro studium funkcionálu střední kvadratické fluktuace energie v ab initio kvantově mechanických výpočtech*, Bakalářská práce, Univerzita Karlova v Praze, 2009.
- [55] Balasubramanian K.: Spectroscopic Properties and Potential Energy Curves for Heavy p-Block Diatomic Hydrides, Halides, and Chalcogenides, *Chem. Rev.* 1989, **89**, 1812-1913.
- [56] K. G. Dyllal, An exact separation of the spin-free and spin-dependent terms of the Dirac-Coulomb-Breit hamiltonian, *J. Chem. Phys.* **100**, 2118 (1994)
- [57] Kutzelnigg W.: Solved and unsolved problems in relativistic quantum chemistry, *Chem Phys* **395** (2012) 16-34.

[58] Fleig T.: Invited review: Relativistic wave-function based electron correlation methods, *Chem. Phys.* **395** (2012) 2-15.

[59] Breit G., *Phys. Rev.* **34** (1929) 553.

[60] Saue T., *Adv. Quant. Chem.* **48** (2005) 383.

Použitý software

[D] DIRAC, a relativistic ab initio electronic structure program, Release DIRAC08 (2008), written by L. Visscher, H. J. Aa. Jensen, and T. Saue, with new contributions from R. Bast, S. Dubillard, K. G. Dyall, U. Ekström, E. Eliav, T. Fleig, A. S. P. Gomes, T. U. Helgaker, J. Henriksson, M. Iliaš, Ch. R. Jacob, S. Knecht, P. Norman, J. Olsen, M. Pernpointner, K. Ruud, P. Salek, and J. Sikkema (see <http://dirac.chem.sdu.dk>).

Seznam tabulek

Tabulka 1: Příklady KVV množin hradel G	36
Tabulka 2: Tabulka charakterů dvojité grupy C_2^*	134
Tabulka 3: Rozvoje CI specifikované podle obsazení GAS prostorů...	138
Tabulka 4: Počet Slaterových determinantů v rámci NPA aproximace pro KRCI rozvoje odpovídajících ireducibilním koreprezentacím „A“ a „B“ dvojité grupy C_2^* . Hodnoty energie stavů $X 0^+$ a $A 1$ a příčné excitační energie $T_e(X 0^+ \rightarrow A 1)$	141
Tabulka 5: Energie MO (SbH, Sb, H)	142
Tabulka 6: Minima disociačních křivek molekuly SbH – DHF výpočet („open-shell“), LCI(I) výpočty – základní stav ($X 0^+$) a stav $A 1$.	145
Tabulka 7: Simulace IPEA A pro LCI(I) výpočet energií $X 0^+$ stavu molekuly SbH pro různé mezijaderné vzdálenosti – hodnoty $E_\uparrow, E_\delta = E_\uparrow - E$ a hodnot parametru $\delta \in <0;1)$, pravděpodobností úspěchu $p_\downarrow, p_\uparrow, p_m = p_\downarrow + p_\uparrow$ a odchylky $p_\delta = p_m - p_m(\delta)$, kde $p_m(\delta)$ je dáno vztahem (239).	157
Tabulka 8: Rozvoj CI specifikovaný podle obsazení GAS prostorů pro metodu „LCI(IV, n)“	159
Tabulka 9: Výsledky simulací pro stav $X 0^+$. Hodnoty překryvu vlastního vektoru $ \phi\rangle$ (zde konkrétně $ X 0^+\rangle$) KRCI hamiltoniánu (rozvoj LCI(IV,6)) a jeho vstupního odhadu $ \psi_0\rangle$ (zde konkrétně (415)), parametru δ ($f = f_\downarrow + \delta \cdot 2^{-m}$ viz (228)-(230)), pravděpodobnosti úspěchu p_m metod IPEA A a IPEA B	165

Tabulka 10: Hodnoty překryvu vlastního vektoru $|\phi\rangle$ (zde konkrétně $|A1\rangle$) KRCI hamiltoniánu (rozvoj LCI(IV,6)) a jeho vstupního odhadu $|\psi_0\rangle$ (zde konkrétně viz obr. 29), parametru δ ($f = f_{\downarrow} + \delta \cdot 2^{-m}$ viz (228)-(230)), pravděpodobnosti úspěchu p_m metod IPEA A a IPEA B **166**

Tabulka 11: Kritické mezijaderné vzdálenosti R_{krit} pro metodu IPEA B pro různé hodnoty počtu opakování měření v každé iteraci algoritmu r . **171**

Seznam použitých zkratk

4c ... čtyřkomponentní.

4c-DC ... čtyřkomponentní Dirac-Coulomb (-ovský výpočet, -ův hamiltonián, ...).

a_0 ... Bohrovův poloměr,

$$a_0 = \frac{4 \pi \varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e_q^2} = \frac{\hbar}{m_e c \alpha} = 5.2917721092(17) \cdot 10^{-11} m \quad . \quad (432)^{120}$$

AO ... Atomic Orbital, atomový orbital.

a-o-c ... average-of-configurations.

AVČR ... Akademie věd České republiky.

BOA ... Born-Oppenheimer approximation, Bornova-Oppenheimerova aproximace

CAS(n,n) ... Complete active space (n electrons in n orbitals), Kompletní aktivní prostor (n elektronů v n orbitalech).

cc-pVTZ ... correlation-consistent polarized valence Triple Zeta (basis set), druh báze atomových orbitalů, resp. atomových bispinorů používaný v ab initio kvantově chemických výpočtech pro post-Hartree-Fockovské výpočty.

CI ... Configuration Interaction, konfigurační interakce.

CI-CAS(n,n) ... Configuration Interaction-Complete Active Space (n electrons in n orbitals), druh konfigurační interakce popsany na str. 125-126.

CISD(n) ... Configuration Interaction Singles Doubles (n orbitals), druh CI popsany na str. 125-126.

CTM ... Classical Turing Machine, (Klasický) Turingův stroj

DC ... Dirac-Coulomb

DCB ... Dirac-Coulomb-Breit

DFT ... Discrete Fourier Transformation (diskrétní Fourierova transformace), či Density Functional Theory (teorie funkcionalů elektronové hustoty), dle kontextu

¹²⁰ ε_0 je permitivita vakua, \hbar redukovaná Planckova konstanta, m_e klidová hmota elektronu, e_q elementární elektrický náboj, α konstanta jemné struktury. Zdroj: "CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2010". Committee on Data for Science and Technology (CODATA). NIST.

DHF ... Dirac-Hartree-Fock

E_0 ... Hartree, jednotka energie,

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} = m_e c^2 \alpha^2 = 4.359\,743\,94(22) \cdot 10^{-18} J = 27.211\,383\,86(68) eV$$

,(433)¹²¹

EMSL ... Environmental Molecular Sciences Laboratory.

EVU ... Evolučně univerzální množina unitárních hradel, Definice 7, str. 37

FCI ... Full Configuration Interaction, úplná konfigurační interakce.

GAS ... Generalized Active Space, Zobecněný aktivní prostor.

HOMO ... (The) Highest Occupied Molecular Orbital, nejvyšší obsazený molekulový orbital (obvykle ve smyslu „dvojnásobně obsazený“, v této práci i ve významu „jednou či dvojnásobně obsazený“, respektive odpovídající Kramerův pár elektronických bispinorů).

HOMO-1 ... Molekulový orbital, nebo Kramerův pár bispinorů energeticky těsně pod „HOMO“ orbitalem, nebo Kramerovým párem.

IPEA ... Iterative Phase Estimation Algorithm, Algoritmus Iterativního odhadu fáze

IPEA A ... Iterative Phase Estimation Algorithm, var. A – viz str.88-101.

IPEA B ... Iterative Phase Estimation Algorithm, var. B – viz str. 88-101.

KR ... Kramers restricted.

KRCI, KR-CI ... Kramers restricted Configuration Interaction – Konfigurační interakce vycházející z „Kramers-restricted“ báze molekulových bispinorů.

KR-DHF ... Kramers restricted Dirac-Hartree-Fock, Metoda řešící Dirac-Hartree-Fockovy rovnice za podmínky „Kramers restricted“

KVU ... Kvantově výpočetně univerzální, definice 6, str. 37.

LCI ... Limited CI, omezená konfigurační interakce.

LCI(I), LCI(II), LCI(III), LCI(IV,n) ... Různé varianty omezené konfigurační interakce použité v této práci, viz Obr. 24, Tabulka 3, Tabulka 4, str. 139, 140, 143.

LUMO ... (The) Lowest Unoccupied Molecular Orbital, energeticky nejnižší neobsazený molekulový orbital (nebo Kramerův pár bispinorů).

MEB ... Molecular Electronic Bispinor, Molekulový elektronický bispinor.

¹²¹ Zdroj: "CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2010".
Committee on Data for Science and Technology (CODATA). NIST.

MO ... Molecular Orbital, Molekulový orbital.

NPA ... No-pair approximation.

nr-BOA ... non-relativistic, Born-Oppenheimer model.

PEA ... Phase Estimation Algorithm, Algoritmus odhadu fáze (neiterativní verze), viz str. 76.

post-DHF ... Post-(Dirac-Hartree-Fock), metoda jdoucí za rámec Hartree-Fockovy aproximace v rámci Diracova(-Coulombova) hamiltoniánu.

POVM ... Positive Operator Valued Measurement

PTM ... Probabilistic Turing Machine, Pravděpodobnostní Turingův stroj.

QCL ... Quantum Computing Language, [8], [31].

QFT ... Quantum Fourier Transform, kvantová Fourierova transformace.

QTM ... Quantum Turing Machine, Kvantový Turingův stroj.

ROHF ... Restricted-open-shell-Hartree-Fock.

ÚFCHJH ... Ústav Fyzikální Chemie Jaroslava Heyrovského.

ÚMKO ... Úplná množina komutujících operátorů.