

Sławomir BUGAJSKI

Instytut Informatyki Teoretycznej i Stosowanej PAN, Uniwersytet Śląski, Instytut Fizyki

Mirosław GIBAS

Politechnika Śląska, Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów

MAGNETYCZNY REZONANS JĄDROWY W OBLICZENIACH KWANTOWYCH¹

Streszczenie. Przedstawiono główne zagadnienia związane z zastosowaniem metod NMR do modelowania obliczeń kwantowych. Po krótkim wprowadzeniu najważniejszych pojęć obliczeń kwantowych omówiono realizację bramek kwantowych metodami NMR, problem stanu początkowego i problem odczytu. Następnie opisano ograniczenia komputerów NMR i przewidywania co do ich przyszłego rozwoju.

NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE IN QUANTUM COMPUTING

Summary. The paper presents main topics of the NMR modeling of quantum computations: implementations of quantum gates, starting state of computation, read off the result. Limitations of the NMR quantum computers are mentioned, and some future prospects sketched.

1. Wstęp

Powszechnie przyjęty model formalny komputera kwantowego, wprowadzony przez D. Deutcha [12] i zwany obwodem kwantowym (*quantum circuit*) lub „szeregiem bramek kwantowych” (*quantum gate array*), zakłada, że komputer kwantowy jest kwantowym układem złożonym, którego elementami składowymi są najprostsze z możliwych obiekty kwantowe, zwane w tym kontekście „qubitami”, czyli bitami kwantowymi. Obliczenie kwantowe polega na zmuszeniu tego układu do takiej ewolucji w czasie, która przeprowadzi określony stan początkowy, zawierający zakodowane dane początkowe, w stan końcowy, zawierający

¹ Praca wykonana w ramach projektu KBN nr 7 T11C 017 21.

poszukiwany wynik. W ramach tego uproszczonego modelu uzyskano szereg niezwykle obiecujących wyników teoretycznych, które spowodowały ożywione badania eksperymentalne mające na celu laboratoryjną realizację obliczeń kwantowych. Jak dotychczas, najbardziej zaawansowane są badania oparte na metodach magnetycznego rezonansu jądrowego (ang. *nuclear magnetic resonance*, *NMR*; w dalszym ciągu skrót *NMR* będzie odnosił się do standardowych metod magnetycznego rezonansu jądrowego w roztworach), patrz [15], [11], [24]. Poniżej przedstawimy podstawy tego podejścia oraz przegląd uzyskanych wyników (najnowsze artykuły przeglądowe: [9], [29], [19]).

1.1. Model obliczeń kwantowych

Z informatycznego punktu widzenia „komputer kwantowy” jest nowym modelem maszyny liczącej. Model ten różni się od dotychczasowych swoim kwantowym charakterem, jednakże można wskazać jego zasadnicze podobieństwo strukturalne z takimi modelami, jak maszyny stałoprogramowe (patrz np. [23], [2]). Dla ułatwienia orientacji wyliczymy te odpowiadające sobie elementy obu modeli, komputera kwantowego i maszyny stałoprogramowej, których tradycyjnie ustalone nazwy są odmienne:

Komputer kwantowy	Maszyna stałoprogramowa
obwód kwantowy	pamięć operacyjna
stan	stan pamięci operacyjnej
qubit	rejestr
bramka kwantowa	instrukcja

Podobnie jak w maszynach stałoprogramowych, obliczenie w komputerze kwantowym polega na zastosowaniu szeregu bramek kwantowych do obwodu kwantowego znajdującego się w określonym stanie początkowym, a następnie odczytania wyniku obliczenia ze stanu końcowego. W pracy komputera kwantowego można więc wyróżnić trzy zasadnicze elementy:



Podstawą formalnego opisu obwodu kwantowego złożonego z n qubitów jest 2^n -wymiarowa liniowa przestrzeń zespolona

$$\mathcal{H}_n = C^2 \otimes C^2 \otimes \dots \otimes C^2 \quad (1)$$

o strukturze iloczynu tensorowego n egzemplarzy dwuwymiarowej przestrzeni zespolonej C^2 (bliższe omówienie podstawowych pojęć mechaniki kwantowej można znaleźć w [7]). Każda z dwuwymiarowych przestrzeni C^2 odpowiada jednemu qubitowi.

Stan obwodu kwantowego opisany jest w ogólnym wypadku przez macierz $2^n \times 2^n$ zwaną macierzą gęstości. Stany szczególnego typu, zwane stanami czystymi, mogą być reprezentowane (z dokładnością do mnożnika fazowego) przez wektory przestrzeni \mathcal{H}_n . W obliczeniach wykonywanych według znanych algorytmów kwantowych stan początkowy jest zazwyczaj stanem czystym.

Samo obliczenie reprezentowane jest przez odpowiednią transformację unitarną przestrzeni zespolonej \mathcal{H}_n . Postać tej transformacji jest określona przez algorytm, według którego wykonywane jest obliczenie. Stan końcowy obwodu kwantowego będzie więc opisany przez wektor $\hat{U}|v_0\rangle$, gdzie \hat{U} jest macierzą unitarną $2^n \times 2^n$, a $|v_0\rangle$ – stanem początkowym. Stan końcowy obliczenia jest stanem czystym, tak jak stan początkowy.

Kończącym etapem jest odczyt wyniku obliczenia. Z reguły polega on na pomiarze dokonanym na stanie końcowym obliczenia.

1.2. Bramki kwantowe

Obliczenie kwantowe, jak wspomniano, jest formalnie reprezentowane przez macierz unitarną \hat{U} o wymiarze $2^n \times 2^n$ interpretowaną jako przekształcenie 2^n -wymiarowej przestrzeni zespolonej liniowej \mathcal{H}_n w siebie. Wśród macierzy unitarnych na \mathcal{H}_n na szczególną uwagę zasługują te, które zmieniają stany jedynie kilku, powiedzmy k , qubitów, pozostawiając stany pozostałych $n - k$ qubitów bez zmiany. Dla małych k macierz taka nazywa się *k*-qubitową *bramką kwantową*.

Projektowanie i opis obliczeń kwantowych są zasadniczo ułatwione przez szereg wyników formalnych pozwalających przedstawić dowolną macierz unitarną na \mathcal{H}_n jako iloczyn (tzn. wynik kolejnego działania) jedno- i dwuqubitowych bramek kwantowych, w analogii do obliczeń komputerów klasycznych. Pierwszym z nich była obserwacja Deutscha [12], który udowodnił, że każdą macierz unitarną na \mathcal{H}_n można przedstawić jako iloczyn odpowiednich macierzy jednoqubitowych oraz macierzy trójqubitowej \hat{Q} będącej kwantowym odpowiednikiem bramki Toffoliego. Wynik ten został uproszczony przez DiVincenzo [13] (patrz również [1]): okazało się, że zamiast trójqubitowej bramki rozważanej przez Deutscha wystarczy wziąć dwuqubitową bramkę CNOT (patrz np. [7]). Ostatecznie kilku autorów niezależnie udowodniło, że prawie każda bramka dwuqubitowa może, wraz z wszystkimi bramkami jednoqubitowymi, generować dowolną macierz unitarną na \mathcal{H}_n . Powyższe wyniki teoretyczne mają zasadnicze znaczenie dla eksperymentalnych realizacji obliczeń kwantowych: nie ma potrzeby konstruowania wielu typów bramek kwantowych, wystarczy mieć realizację jednej

bramki dwuqubitowej i możliwość zrealizowania dowolnej bramki jednoqubitowej, by zrealizować dowolny algorytm kwantowy.

2. Realizacja bramek kwantowych metodami NMR

Jednym z najprostszych fizycznych przykładów qubitu jest cząstka kwantowa o spinie $\frac{1}{2}$.

Naturalną realizacją qubitu mogą być m.in. jądra atomowe ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . Kilka takich jąder, tworzących kwantowy układ złożony, będzie fizyczną realizacją obwodu kwantowego. W szczególności molekuly organiczne, zawierające większą liczbę wymienionych jąder, są naturalnymi kandydatami do roli obwodów kwantowych. Wielką zaletą takiej realizacji obwodu kwantowego jest fakt, że metody jądrowego rezonansu magnetycznego pozwalają na stosunkowo łatwe uzyskanie bramek kwantowych.

2.1. Eksperyment NMR

Ogólny schemat eksperymentu z zakresu spektroskopii NMR jest następujący. Badana próbka zawiera roztwór kilku miligramów badanego związku organicznego w odpowiednio dobranym ciekłym rozpuszczalniku (ok. 0,5 mililitra). Średnia odległość między molekułami badanego związku jest w tej sytuacji rzędu kilku Å. Probka umieszczona jest w silnym (rzędu kilku do kilkunastu Tesli) stałym i jednorodnym polu magnetycznym wytworzonym przez nadprzewodzący elektromagnes. Probka poddawana jest seriom krótkich (rzędu 10 mikrosekund) impulsów zmiennego pola elektromagnetycznego o starannie dobranej częstotliwości rzędu kilkuset MHz (tzw. "impulsy o częstotliwości radiowej"). Sygnały otrzymywane z pojedynczej molekuly są tak słabe, że jest praktycznie niemożliwe wykrycie pojedynczego przejścia między poziomami Zeemana. Wyznaczenie częstotliwości rezonansowych, które pozwalają na daleko idące wnioski na temat budowy molekuly badanego związku, jest możliwe jedynie dzięki temu, że próbka zawiera stosunkowo dużą ilość badanej substancji (w typowym wypadku – ponad 10^{17} molekuł).

Jak wspomniano, spiny niektórych jąder tworzących daną molekułę można traktować jako qubity, a samą molekułę – jako obwód kwantowy. Serie impulsów stosowane w spektroskopii NMR uzyskują w tym kontekście sens bramek kwantowych. Szczególną cechą takiej realizacji obliczeń kwantowych jest, że makroskopowa liczba identycznych molekuł (które odgrywają rolę "komputerów kwantowych") musi działać równolegle na każdym etapie eksperymentu, gdyż sygnały z pojedynczych "komputerów" są nieosiągalne. Mamy więc do czynienia z "zespołowym" modelem obliczeń kwantowych (ang. *ensemble quantum computation*

lub *bulk quantum computation*), nastrożającym pewne specjalne trudności (patrz niżej, rozdz. 3).

Chociaż cele standardowych eksperymentów NMR oraz kwantowego przetwarzania informacji są różne, aparatura i techniki eksperymentalne NMR świetnie nadają się do modelowania obliczeń kwantowych. Ponieważ spektroskopia NMR jest dobrze rozwiniętą, standardową techniką badań molekularnych, a odpowiednia aparatura jest dostępna w licznych laboratoriach, realizacja obliczeń kwantowych metodami NMR zyskała dużą popularność i odnosi, jak dotąd, największe sukcesy.

2.2. Hamiltonian spinów jądrowych molekuly

Dla spektroskopii NMR szczególnie ważne są dwa oddziaływania: oddziaływanie Zeemana między spinem a zewnętrznym polem magnetycznym, i tzw. "sprzężenie skalarne" dwóch spinów. Znane z elektrodynamiki klasycznej oddziaływanie między dwoma dipolami magnetycznymi nie daje znaczącego wkładu w sytuacjach badanych metodami spektroskopii NMR w roztworach, gdyż z powodu chaotycznego ruchu molekuł zostaje ono uśrednione do zera.

Operator na C^2 opisujący oddziaływanie Zeemana między spinem $\frac{1}{2}$ a zewnętrznym polem magnetycznym B_0 skierowanym wzdłuż osi z ma wyjątkowo prostą postać:

$$\hat{H}_z = -\gamma B_0 \hat{S}_z \quad (2)$$

gdzie \hat{S}_z jest operatorem z -owej składowej spinu (patrz np. [7]), a γ stałą (zwaną współczynnikiem giromagnetycznym). Ponieważ operator \hat{S}_z ma (w bazie kanonicznej) postać macierzy

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

więc spin $\frac{1}{2}$ w zewnętrznym polu magnetycznym może przyjmować tylko dwie energie:

$-\frac{1}{2} \gamma \hbar B_0$ i $\frac{1}{2} \gamma \hbar B_0$ (poziomy Zeemana). Różnica energii między poziomami Zeemana wynosi $\gamma \hbar B_0$; oznacza to, że przejście z jednego z możliwych stanów energetycznych do drugiego wymaga pochłonięcia lub wysłania porcji energii równej $\gamma \hbar B_0$; wielkość

$$\omega = \gamma \hbar B_0 \quad (4)$$

nazywana jest w spektroskopii NMR częstością rezonansową (lub częstością Larmora); odpowiada ona klasycznej częstości precesji dipola magnetycznego w zewnętrznym polu magnetycznym.

Oddziaływanie Zeemana ma swój odpowiednik w klasycznej elektrodynamice: jest to znane oddziaływanie między dipolem magnetycznym a stałym polem magnetycznym. Sprzężenie skalarnie dwóch spinów nie ma klasycznego odpowiednika: jego przyczyną jest oddziaływanie dwóch jąder w molekuale za pośrednictwem elektronów walencyjnych tworzących wiązania chemiczne (oddziaływanie Fermiego). Z tego powodu sprzężenie skalarnie szybko maleje wraz z liczbą wiązań pośredniczących między dwoma danymi jądrami. W najprostszej, chociaż realistycznej sytuacji (w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń, lub "w granicy słabego sprzężenia"), to skomplikowane oddziaływanie daje się opisać przez zaskakująco prosty operator \hat{H}_J na $C^2 \otimes C^2$:

$$\hat{H}_J = J_{1,2} \hat{S}_{1,z} \hat{S}_{2,z} \quad (5)$$

gdzie

$$\hat{S}_{1,z} = \hat{S}_z \otimes \hat{1}, \quad \hat{S}_{2,z} = \hat{1} \otimes \hat{S}_z \quad (6)$$

są operatorami z-owej składowej spinu pierwszego i drugiego jądra, $\hat{1}$ – macierzą jednostkową 2×2 , a $J_{1,2}$ jest stałą sprzężenia obu spinów.

Rozważmy teraz molekułę zawierającą n jąder o spinie $\frac{1}{2}$ umieszczoną w zewnętrznym polu magnetycznym B_0 skierowanym wzdłuż osi z . Energia takiego układu spinów opisana będzie przez operator (zwany hamiltonianem)

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \omega_i \hat{S}_{i,z} + \sum_{i,j=1}^n J_{i,j} \hat{S}_{i,z} \hat{S}_{j,z} \quad (7)$$

działający na przestrzeni $\mathcal{H}_n = C^2 \otimes C^2 \otimes \dots \otimes C^2$. Symbol $\hat{S}_{i,z}$ oznacza operator z-owej składowej spinu i -tego jądra,

$$\hat{S}_{i,z} = \hat{1} \otimes \dots \otimes \hat{S}_z \otimes \dots \otimes \hat{1} \quad (8)$$

Częstości rezonansowe ω_i są różne dla jąder różnego typu, co można tłumaczyć różnicami budowy wewnętrznej i rozkładu ładunku. Jednakże nawet gdy mamy jądra tego samego typu, ich częstości rezonansowe różnią się nieznacznie z powodu różnego ekranowania magnetycznego wytworzonego przez krążące w molekuale elektrony. Efekt ten, zwany "przesunięciem chemicznym", jest bardzo słaby: dla protonu względne zmniejszenie częstotliwości rezonansowej spowodowane przesunięciem chemicznym wynosi ok. 10^{-5} , dla innych jąder

jest mniejsze niż 10^{-3} . Mimo to przesunięcie chemiczne ma kluczowe znaczenie dla badania budowy molekuł metodami NMR.

2.3. Bramki jednoqubitowe

Pełny zestaw bramek jednoqubitowych można uzyskać metodami NMR w wyjątkowo prosty sposób stosując impulsy rezonansowe o częstotliwości radiowej.

W wypadku pojedynczego jądra o spinie $\frac{1}{2}$ opisany wyżej hamiltonian (7) redukuje się do jednego wyrazu (2). Jeśli wytworzymy dodatkowe periodyczne w czasie pole magnetyczne $B_1 \sin(\omega t)$ skierowane wzdłuż osi x , to całkowity hamiltonian będzie miał postać

$$\hat{H}(t) = -\gamma(B_0 \hat{S}_z + B_1 \sin(\omega t)) \quad (9)$$

Jeśli częstotliwość ω przyłożonego impulsu równa jest γB_0 , to po czasie t otrzymujemy transformację unitarną

$$\hat{U}_x(t) = \begin{bmatrix} \cos(\gamma B_1 t) & i \sin(\gamma B_1 t) \\ i \sin(\gamma B_1 t) & \cos(\gamma B_1 t) \end{bmatrix} \quad (10)$$

Otrzymana transformacja zwana jest transformacją obrotu wokół osi x o kąt $2\gamma B_1 t$. Dobierając odpowiednio czas trwania impulsu i natężenie pola możemy w ten sposób otrzymać dowolny obrót wokół osi x . W analogiczny sposób otrzymujemy obrót o dowolny kąt wokół osi y .

Wiadomo, patrz np. [1], [7], że każda macierz unitarna 2×2 o wyznaczniku 1 da się przedstawić jako złożenie odpowiednio dobranych obrotów wokół dwóch prostopadłych osi. Oznacza to, że eksperymentalna realizacja transformacji $\hat{U}_x(t)$ i $\hat{U}_y(t)$ pozwala na realizację każdej bramki jednoqubitowej.

W spektroskopii NMR transformacje obrotów wokół osi x są generowane przez impulsy o częstotliwości radiowej, [15], [11]. Oznacza to, że wszystkie jednoqubitowe bramki kwantowe można otrzymać metodami NMR [10].

Makroskopowym skutkiem impulsów o częstości radiowej skierowanych wzdłuż osi x są obroty wokół osi x wypadkowego wektora magnetyzacji próbki. W połączeniu z obrotami wokół osi y otrzymujemy możliwość dowolnej zmiany kierunku wektora magnetyzacji [11]. Ta makroskopowa interpretacja jest często stosowana w spektroskopii NMR, patrz np. [15]. Należy jednak podkreślić, że zmiana kierunku wypadkowego wektora magnetyzacji próbki nie oznacza podobnej zmiany kierunku spinów jąder w molekułach. Na przykład: impuls $\frac{\pi}{2}$ odwraca makroskopowy wektor polaryzacji o kąt 90° , ale jego działanie na spiny jądrowe w

molekułach polega na ilościowym wyrównaniu populacji spinów skierowanych równoległe i antyrównoległe do osi z.

2.4. Bramka CNOT

Bramka CNOT jest szczególną bramką dwuqubitową, opisaną przez macierz 4×4 (patrz np. [7])

$$\hat{U}_{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (11)$$

Jej działanie polega na odwróceniu jednego spinu zależnie od stanu drugiego spinu. Najprostszą realizacją bramki CNOT metodami NMR jest oparta na sprzężeniu skalarnym dwóch spinów, patrz np. [10], [29]. Jeśli dwa spiny, do których chcemy zastosować bramkę CNOT, są na tyle "odległe" jeden od drugiego, że ich sprzężenie jest zbyt słabe dla realizacji bramki CNOT, można wykorzystać ich sprzężenie z innymi spinami w molekułe [29].

Macierz niewiele różniąca się od \hat{U}_{CNOT} jest realizowana przez znaną w spektroskopii NMR sekwencję INEPT (ang. *insensitive nuclei enhanced by polarization transfer*) [15] str. 192 – 198, [11] str. 133 – 134, [24] str. 81. Sekwencje realizujące bramkę CNOT można znaleźć w literaturze, patrz np. [10], [17], [29], [9].

2.5. Realizacja obliczeń kwantowych

Możliwość realizacji metodami NMR dowolnej bramki jednoqubitowej oraz bramki CNOT pozwala w zasadzie na realizację dowolnych obliczeń kwantowych, ponieważ każdy algorytm kwantowy można rozpisać na sekwencję tych podstawowych operacji. Jednakże omówione wyżej realizacje bramek jednoqubitowych i dwuqubitowej bramki CNOT zakładały, że jądro niosące jeden qubit, czy molekuła niosąca dwa qubity są odizolowane od otoczenia, podczas gdy dla realizacji obliczeń kwantowych potrzebujemy obwodów kwantowych złożonych z większej liczby qubitów, a przy zastosowaniu metod NMR mamy dodatkowo do czynienia z makroskopowym zespołem obwodów kwantowych (molekuł) rozmieszczonych beładnie w makroskopowej objętości próbki. Powoduje to pojawienie się szeregu specjalnych problemów. Dwa z nich – problem selektywnego oddziaływania i problem odsprężania spinów omówimy poniżej, ich rozwiązania wynikają w naturalny sposób z dotychczasowej praktyki spektroskopii NMR. Dwa inne, znacznie trudniejsze problemy, których rozwiązanie było podstawą sukcesu metod NMR w modelowaniu obliczeń kwantowych (problem przygo-

towania stanu początkowego i problem odczytu wyniku obliczeń), omówimy w następnych rozdziałach.

2.5.1. Problem selektywnego oddziaływania

Dla realizacji fizycznej obliczeń kwantowych musimy mieć możliwość selektywnego oddziaływania na poszczególne qubity i pary qubitów tworzące obwód kwantowy. Zazwyczaj wykorzystuje się w tym celu separację przestrzenną qubitów: oddziaływanie realizujące bramkę kwantową jest skoncentrowane na obszarze, w którym zlokalizowany jest dany qubit. Taka przestrzenna koncentracja oddziaływania nie jest możliwa, gdy stosuje się metody NMR, gdyż długość fali stosowanych impulsów o częstotliwości radiowej jest rzędu 1 metra, co wyklucza ich selektywne oddziaływanie na wybrane spiny zlokalizowane w jednej moleku-
kule.

Jednakże wiadomo, że różne typy jąder mają różny współczynnik giromagnetyczny, a więc i różną częstotliwość rezonansową. Dlatego impuls o częstotliwości radiowej, który wchodzi w rezonans z jądrem danego typu, nie wpływa istotnie na jądra innych typów. Problem selektywnego oddziaływania na poszczególne qubity jest więc rozwiązany w szczególny sposób: zamiast rozróżniać je według ich lokalizacji przestrzennej, rozróżniamy je według częstotliwości rezonansowej. Nawet gdy w danej moleku-
le występuje kilka jąder tego samego typu, ich częstotliwości rezonansowe różnią się nieco wskutek przesunięcia chemicznego. Pozwala to na selektywne oddziaływanie nawet na jądra tego samego typu za pomocą impulsów radiowych o niskiej mocy lub równoważnych sekwencji DANTE (ang. *delays alternating with nutations for tailored excitation*), patrz [11] str. 177, [24] str. 88.

2.5.2. Odsprężenie spinów

Jedną z charakterystycznych cech realizacji obliczeń kwantowych za pomocą NMR jest fakt, że sprzężenie skalarnie między spinami jąder w moleku-
le działa zawsze, a nie tylko wtedy, gdy chcemy realizować bramkę CNOT. Dlatego, gdy mamy więcej niż dwa qubity, musimy zadbać o wytlumienie wzajemnego oddziaływania wszystkich qubitów oprócz tych, które w danym kroku obliczenia poddane są działaniu odpowiedniej bramki. Ponieważ sprzężenie skalarnie dwóch jąder w moleku-
le szybko zanika wraz z liczbą wiązań pośredniczących między nimi, konieczność wytlumienia niepożądanego oddziaływania pojawia się tylko dla kilku jąder będących w „małej odległości” od jąder poddanych oddziaływaniu. Okazuje się, że sekwencje impulsów pozwalających na odsprężenie określonych jąder są znane i szeroko stosowane w spektroskopii NMR; przykłady odpowiednich serii impulsów można znaleźć w [9].

3. Specyfika zespołowego modelu obliczeń kwantowych

Jak wspomnieliśmy, charakterystyczną cechą realizacji obliczeń kwantowych tradycyjnymi metodami spektroskopii NMR jest „zespołowość”: ze względu na słabość sygnałów uzyskiwanych od pojedynczych molekuł („komputerów”) musimy odczytywać sygnały otrzymywane z makroskopowej liczby molekuł. Ta, jak się wydaje, nieunikniona cecha modeli opartych na NMR jest przyczyną dwóch zasadniczych trudności, które omówimy poniżej. Obie udało się ominąć dzięki pewnym modyfikacjom powszechnie przyjętego modelu komputera kwantowego.

3.1. Trudności w przygotowaniu stanu początkowego

Pierwszym etapem pracy komputera kwantowego jest wprowadzenie obwodu kwantowego w odpowiedni stan początkowy ("przygotowanie stanu początkowego", patrz ustęp 1.1). Znane algorytmy kwantowe zakładają zazwyczaj, że stan początkowy obwodu kwantowego jest stanem czystym $|0,0,\dots,0\rangle$, w którym każdy qubit jest w stanie tradycyjnie oznaczanym $|0\rangle$, tzn. w stanie własnym operatora z-owej składowej spinu $\hat{S}_{i,z}$, $i=1,2,\dots,n$, odpowiadającym wartości własnej $\frac{1}{2}$. W sytuacji badanej metodami NMR, gdy qubit jest spinem jądra osadzonego w molekułce i umieszczonego w silnym polu magnetycznym skierowanym wzdłuż osi z, stan $|0\rangle$ jest stanem o minimalnej energii. W związku z tym stan $|0,0,\dots,0\rangle$ jest stanem, w którym wszystkie badane jądra w molekułce są w energetycznym stanie podstawowym. Można by więc przypuszczać, że pożądany stan początkowy komputera kwantowego opartego na NMR da się osiągnąć przez zastosowanie odpowiednio niskich temperatur lub odpowiednio wysokich natężeń stałego pola. Dla jądra ^1H otrzymujemy następujące wartości [19]: w polu 21,1 T (najsilniejszy obecnie magnes stosowany w NMR) temperatura próbki musiałaby wynosić 0,043 K; natomiast dla próbki w temperaturze pokojowej natężenie stałego pola musiałoby wynosić 150 000 T.

Osiągnięcie odpowiednio niskiej temperatury jest w zasadzie możliwe, jednakże obniżenie temperatury próbki powoduje osłabienie ruchów termicznych molekuł i ujawnienie się oddziaływania dipolowego między spinami. Jeśli więc chcemy pozostać przy standardowej technice NMR, w której próbka jest płynnym roztworem badanej substancji, musimy pozostać w zakresie wysokich temperatur. Dochodzimy więc do poważnej trudności: standardowe metody NMR stosują się do próbki w temperaturze pokojowej, a w takiej temperaturze chaotyczne ruchy cieplne uniemożliwiają przygotowanie pożądanego stanu początkowego. Rzeczywiście, odległość między poziomami Zeemana jądra ^1H dla natężenia pola magnetyczne-

go rzędu 2,3 – 21,7 T wynosi 0,4 – 3,7 μeV , podczas gdy energia Boltzmana dla temperatury pokojowej, charakteryzująca energię ruchów termicznych, wynosi około 25 meV. Powoduje to, że obecnie osiągalne pole magnetyczne nie jest w stanie uporządkować spinów: względna nadwyżka spinów skierowanych wzdłuż pola nad spinami ustawionymi antyrównoległe do pola w opisanych warunkach jest zaledwie rzędu 10^{-5} (patrz [19]). Trudność ta spowodowała, że skądinąd naturalna idea modelowania obliczeń kwantowych standardowymi technikami NMR była przez dłuższy czas uważana za nierealną.

3.2. Stany pseudoczyste

Dopiero w 1996 r. badania teoretyczne doprowadziły do odkrycia [8], że obliczenia kwantowe nie muszą startować ze stanu czystego, lecz wystarczy w tym celu wprowadzić obwód kwantowy w tzw. stan pseudoczysty, dający się łatwo zrealizować standardowymi metodami NMR. Był to przełom, który zapoczątkował szybki rozwój zastosowań NMR w informatyce kwantowej.

Jak wiadomo, precyzyjnie określone stany obiektu kwantowego (zwane tradycyjnie stanami czystymi) są reprezentowane przez wektory o długości 1 w odpowiedniej zespolonej przestrzeni liniowej. Możliwe są jednak sytuacje, w których stan układu kwantowego nie jest określony dokładnie, lecz jedynie w sposób statystyczny: mówiąc obrazowo, układ może się znajdować w różnych stanach czystych z różnymi prawdopodobieństwami. Im więcej stanów czystych wchodzi w skład takiej "mieszanki", tym bardziej nieokreślony jest stan układu i tym większa jego entropia. Takie statystyczne "mieszanki" stanów czystych nazywane są stanami mieszanymi. Jednolity opis formalny kwantowych stanów czystych i mieszanych jest możliwy za pomocą tzw. operatorów gęstości (patrz np. [7]). Jeśli obiekt kwantowy jest w stanie opisanym operatorem gęstości $\hat{\rho}$, to średnią wartość otrzymaną w serii pomiarów wielkości fizycznej opisanej operatorem \hat{A} obliczamy jako $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$, tzn. sumę elementów diagonalnych (śląd) iloczynu tych operatorów.

Przyjmijmy, jak wyżej, że obwód kwantowy jest zrealizowany jako molekula o n wyróżnionych jądrami. Wśród wszystkich stanów mieszanych takiego układu wyróżnia się stan „maksymalnie zmieszany”, opisany przez operator gęstości

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2^n} \hat{1} \quad (12)$$

działający na przestrzeni liniowej $\mathcal{H}_n = C^2 \otimes C^2 \otimes \dots \otimes C^2$. Charakterystyczną cechą stanu $\hat{\rho}_1$ jest, że nie zmienia się on w trakcie obliczenia kwantowego (opisanego przez pewną transformację unitarną przestrzeni zespolonej \mathcal{H}_n). Stan pseudoczysty jest stanem mieszanym stanu $\hat{\rho}_1$ i pożądanego stanu $|0,0,\dots,0\rangle$:

$$\hat{\rho}_m = (1 - \varepsilon)\hat{\rho}_1 + \varepsilon\hat{\rho}_0 \quad (13)$$

($\hat{\rho}_0$ jest operatorem gęstości opisującym stan $|0,0,\dots,0\rangle$, $0 < \varepsilon < 1$). Według ogólnej przyjętej interpretacji, jeśli w próbce znajduje się N molekuł w stanie $\hat{\rho}_m$, to $\varepsilon N + (1 - \varepsilon)\frac{N}{2^n}$ molekuł jest w pożądanym stanie $|0,0,\dots,0\rangle$.

Założmy, że stanem początkowym obliczenia kwantowego jest opisany wyżej stan pseudoczysty $\hat{\rho}_m$ zamiast stanu $|0,0,\dots,0\rangle$. Obliczenie, opisane przez operator unitarny \hat{U} na \mathcal{H}_n , przeprowadza stan $\hat{\rho}_m$ w stan pseudoczysty

$$\hat{\rho}_{out} = (1 - \varepsilon)\hat{\rho}_1 + \varepsilon\hat{\rho}_f \quad (14)$$

gdzie $\hat{\rho}_f$ jest operatorem gęstości opisującym stan $\hat{U}|0,0,\dots,0\rangle$. Oznacza to, że po zakończeniu obliczenia w całej próbce znajdzie się $\varepsilon N + (1 - \varepsilon)\frac{N}{2^n}$ molekuł w stanie, jaki otrzymalibyśmy startując ze stanu początkowego $|0,0,\dots,0\rangle$. Pozostaje tylko odczytać wynik obliczenia ze stanu końcowego $\hat{\rho}_{out}$ – problem ten omówimy w następnym rozdziale.

Tak więc obliczenie kwantowe startujące ze stanu pseudoczystego $\hat{\rho}_m$ przebiega podobnie do obliczenia startującego ze stanu czystego $|0,0,\dots,0\rangle$; można uważać, że stan $|0,0,\dots,0\rangle$ jest przekształcany w stan $\hat{U}|0,0,\dots,0\rangle$ w obecności silnego „szumu” reprezentowanego przez maksymalnie zmieszany stan $\hat{\rho}_1$.

Wprowadzenie próbki w stan $\hat{\rho}_m$ metodami NMR jest możliwe, najczęściej stosuje się tzw. średniowanie przestrzenne za pomocą sekwencji impulsów zawierających gradienty pola magnetycznego [10] oraz średniowanie czasowe oparte na połączeniu wyników kilku odpowiednio dobranych eksperymentów NMR [22]. Inne metody otrzymywania stanów pseudoczystych opisano w [16], [26]; dalszą dyskusję można znaleźć w [17], [9] i in. W aktualnie wykonywanych eksperymentach parametr ε ma wartość rzędu 10^{-5} .

3.3. Odczyt wyniku obliczeń

Ostatnim krokiem w każdym eksperymencie spektroskopii NMR jest odczyt. Zastosowanie impulsów o częstotliwości radiowej, a następnie makroskopowy pomiar poprzecznej magnetyzacji próbki pozwalają na wyznaczenie wszystkich wartości średnich typu

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_{out} \hat{S}_{1,k_1} \otimes \dots \otimes \hat{S}_{n,k_n}) \quad (15)$$

gdzie \hat{S}_{i,k_i} oznacza operator k_i -tej składowej spinu i -tego qubitu lub operator jednostkowy (bliższe szczegóły – patrz np. [9]). Oznacza to, że metodami NMR możemy odczytać jedynie

uśrednione stany poszczególnych qubitów. Zauważmy przy okazji, że dla stanu końcowego pseudoczystego (14) otrzymujemy

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_{out} \hat{S}_{1,k_1} \otimes \dots \otimes \hat{S}_{n,k_n}) = \varepsilon \text{Tr}(\hat{\rho}_f \hat{S}_{1,k_1} \otimes \dots \otimes \hat{S}_{n,k_n}) \quad (16)$$

gdyż maksymalnie zmieszana składowa stanu końcowego nie daje wkładu do średniej. A więc zastosowanie stanu początkowego pseudo-czystego (13) daje przy zastosowaniu metod NMR w istocie takie same odczyty końcowe jak przy stanie początkowym czystym $\hat{\rho}_0$; jedyną różnicą jest osłabienie sygnału o czynnik ε .

Jednakże nie odpowiada to wymogom typowych obliczeń kwantowych. W większość algorytmów kwantowych odczytu wyniku obliczenia dokonuje się za pomocą pomiaru odpowiednio dobranej wielkości fizycznej ("obserwabli"). Wynikiem pomiaru jest pewien rozkład prawdopodobieństwa możliwych wartości mierzonej obserwabli, patrz np. [7]; z tego rozkładu prawdopodobieństwa odczytujemy wynik obliczenia. Pomiaru takiego nie da się (z wyjątkiem szczególnych wypadków) przeprowadzić metodami NMR, które – jak wspomniano wyżej – pozwalają jedynie na zmierzenie wartości średnich pewnych obserwabli, lecz nie dają pełnych rozkładów prawdopodobieństwa. Stawia to pod znakiem zapytania przydatność zespołowego modelu obliczeń kwantowych realizowanego metodami NMR.

Wyjściem z sytuacji okazała się modyfikacja znanych algorytmów kwantowych. Pierwsza propozycja tego typu została przedstawiona w [16], bardziej systematyczne podejście można znaleźć w [4]. Dla każdego ze znanych obecnie algorytmów kwantowych istnieje sposób dopasowania go do ograniczonych możliwości zespołowego modelu NMR. Jednakże nie istnieje, jak dotąd, uniwersalna metoda ominięcia problemu odczytu; może się więc zdarzyć, że któryś z przyszłych algorytmów kwantowych nie da się zrealizować metodami NMR.

3.4. Czy obliczenia metodami NMR są kwantowe?

Omówione wyżej modyfikacje powszechnie przyjętego modelu obliczeń kwantowych umożliwiają realizację (odpowiednio dopasowanych) algorytmów kwantowych tradycyjnymi metodami NMR algorytmów w roztworach. Jednakże pojawiło się niepokojące pytanie [5]: czy algorytmy kwantowe dopasowane do możliwości eksperymentalnych technik NMR są nadal algorytmami kwantowymi? Pytanie to dotyka dyskutowanego od dawna i dotąd nierozstrzygniętego w zadowalający sposób głębokiego problemu: co to znaczy „kwantowość”, jakie zjawiska, obiekty, własności można uznać za „kwantowe” i czym się one różnią od „niekwantowych”?

W kontekście idei komputerów kwantowych problem ten pojawia się jako pytanie o przyczynę nadzwyczajnej efektywności obliczeń kwantowych w porównaniu z obliczeniami standardowymi. Według rozpowszechnionej opinii (patrz np. [14]), przyczyną jest wykorzystanie specyficznej cechy stanów kwantowych układów złożonych, zwanej splątaniem

(ang. *entanglement*), patrz np. [7]). Dlatego sporym zaskoczeniem było odkrycie [31], [5], że stany pseudoczyste nie wykazują splątania, jeśli tylko liczba qubitów jest mniejsza niż 14, a dla większej liczby nie ma gwarancji, że splątanie rzeczywiście wystąpi. Ponieważ stany, które nie wykazują splątania, uważane są za „niekwantowe”, wynik ten sugeruje, że modelowanie obliczeń kwantowych metodami NMR w roztworach nie jest faktycznie implementacją, lecz jedynie symulacją. Obecny pogląd na ten problem jest następujący: chociaż stany układu spinów, którymi posługuje się zespołowy model oparty na NMR, są „niekwantowe”, to jednak ich dynamika jest „kwantowa”. Według [29], pogląd ten jest oczywisty dla większości specjalistów spektroskopii NMR.

4. Ograniczenia modelowania obliczeń kwantowych metodami NMR

Obecnie modelowanie obliczeń kwantowych metodami NMR w roztworach nie ma konkurencji: wszystkie inne proponowane metody są znacznie słabiej rozwinięte. Jednakże większość autorów przewiduje, że szczytem możliwości tego podejścia będą obwody kwantowe złożone z kilkunastu qubitów. Wynika to z szacunków opartych na przewidywanych ograniczeniach tego podejścia.

4.1. Zwiększenie liczby qubitów w stanie pseudoczystym

Najczęściej wymienianą trudnością w dalszym rozwoju modelowania NMR jest fakt, że parametr ε , charakteryzujący odstępstwo stanu pseudoczystego od stanu maksymalnie zmieszanego, zachowuje się jak $2^{-n}n$, gdzie n jest liczbą qubitów. W związku z tym sygnał dochodzący ze stanu pseudoczystego słabnie wykładniczo wraz ze wzrostem liczby qubitów. Szacuje się [19], że ogranicza to do 30 liczbę qubitów w komputerze kwantowym działającym na bazie NMR w roztworach. Należy jednak zwrócić uwagę, że powyższe oszacowanie opiera się na aktualnie stosowanych technikach przygotowania stanów pseudoczystych i przypuszczalnie ulegnie zmianie wraz z rozwojem w tej dziedzinie.

4.2. Rozróżnianie większej liczby qubitów

Wraz ze wzrostem liczby rozróżnianych qubitów musi wzrastać liczba rozróżnianych częstotliwości rezonansowych. Ponieważ przedział możliwych częstotliwości przesunięć chemicznych jest ograniczony, liczba możliwych do rozróżnienia qubitów jest też ograniczona. W [9] ocenia się, że w rozsądnych warunkach można rozróżnić około 20 jąder węgla, podczas gdy [19] szacuje liczbę możliwych do rozróżnienia qubitów na niewiele ponad 10.

Oczywiście, wraz z rozwojem technik eksperymentalnych oszacowanie to może się poprawić.

4.3. Dekoherencja i czas realizacji bramek

Termin "dekoherencja" jest w teorii obliczeń kwantowych rozumiany jako wymuszone przez przypadkowe oddziaływania z otoczeniem przejście qubitu w jeden ze stanów własnych operatora z -owej składowej spinu. Jest rzeczą jasną, że dekoherencja poważnie utrudnia przeprowadzenie obliczenia kwantowego, gdyż w sposób nieprzewidywalny zmienia stany qubitów w trakcie obliczenia. Dlatego decydujący o sukcesie obliczenia jest czas jego trwania, który musi być krótszy od czasu, w którym dekoherencja zaczyna powodować znaczące skutki.

Zespołowy charakter modelu opartego na NMR w roztworach powoduje, że dekoherencja nie jest dla komputera NMR tak groźna jak dla bardziej konwencjonalnych realizacji. Ponieważ dekoherencja działa przypadkowo, jej skutki na poszczególnych molekułach powinny się niwelować w skali całej próbki. Dlatego końcowym efektem dekoherencji nie będzie błąd, ale raczej osłabienie odbieranego sygnału [19]. W spektroskopii NMR tak rozumiana dekoherencja przejawia się jako relaksacja podłużna i relaksacja poprzeczna. W modelowaniu obliczeń kwantowych metodami NMR czas dekoherencji jest wyznaczony przez czas relaksacji poprzecznej, który jest zawsze krótszy od czasu relaksacji podłużnej i wynosi zwykle kilka sekund. Ten stosunkowo długi czas dekoherencji spinów jądrowych wynika z ich słabego oddziaływania z otoczeniem.

Korzyści wynikające z długiego czasu dekoherencji są po części niwelowane przez stosunkowo długi czas realizacji bramek kwantowych. W stosowanych dotychczas realizacjach bramka CNOT i inne bramki dwuqubitowe działają w oparciu o sprzężenie skalarne między spinami w molekułach. Jest to oddziaływanie bardzo słabe; z tego powodu czas wykonania jednej dwuqubitowej bramki kwantowej wynosi kilka milisekund (patrz [19], [30]). Niemniej, bez ryzyka dużych błędów można przeprowadzić metodami NMR obliczenie kwantowe złożone z kilku tysięcy operacji (w pracy [28] doniesiono o zrealizowaniu ciągu 300 bramek dwuqubitowych).

Stosunek czasu wykonania jednej bramki do czasu dekoherencji pogarsza się wraz ze wzrostem liczby qubitów: czas dekoherencji maleje dla większych molekuł, a średni czas wykonania bramki wzrasta. Narzuca to kolejne ograniczenie na możliwy rozwój modelowania obliczeń kwantowych metodami NMR; liczbowe oszacowania są tu bardzo niepewne, gdyż odpowiednie parametry różnią się dla konkretnych molekuł (niemniej w [18] przewiduje się, że dekoherencja i czas realizacji bramek ograniczają komputery NMR do 5 – 10 qubitów).

5. Podsumowanie i uwagi końcowe

Jak wspomnieliśmy, sukces modelowania obliczeń kwantowych metodami NMR wynika z zastosowania dobrze rozwiniętych technik laboratoryjnych spektroskopii NMR. (Przegląd wyników uzyskanych metodami NMR można znaleźć w [9], str. 18, i w [18], str. 77.) Od chwili opublikowania koncepcji stanów pseudoczystych postęp był szybki: pierwsze doniesienia o realizacji dwuqubitowego komputera NMR pojawiły się w 1997 r., ostatnio (grudzień 2001) w archiwum elektronicznym LANL opublikowano wyniki implementacji NMR algorytmu Shora dla 7 qubitów [27]. Mimo to opisane wyżej ograniczenia tej metody pozwalają obecnie przypuszczać, że szczytem możliwości komputerów NMR jest realizacja obliczeń na kilkunastu qubitach.

W związku z tym należy zauważyć, że przewidywania co do przyszłości komputerów NMR są z roku na rok bardziej optymistyczne: przed 1996 r. sądzono, że ta metoda w ogóle nie może dać zadowalającego wyniku, w 1999 r. uważano, że jej możliwości sięgają 5 do 10 qubitów [18], str. 76, obecne granicę implementacji metodami NMR przesunięto do kilkunastu qubitów.

Przypuszcza się, że przejście od tradycyjnych metod NMR w roztworach do NMR w ciekłych kryształach [30] i w ciele stałym [21], [9] pozwoli na realizację 30-qubitowych komputerów NMR [9], str. 23.

LITERATURA

1. Barenco A., Bennet C. H., Cleve R., DiVincenzo D. P., Margolus N., Shor P., Sleator T., Smolin J. A., Weinfurter H.: Elementary gates for quantum computation. *Physical Review A* **52** (1995) 3457 – 3467. arXiv:quant-ph/9503016
2. Bartol W., Raś Z., Skowron A.: Theory of computing systems. Mazurkiewicz A., Pawlak Z. (red.): *Mathematical Foundations of Computer Science*. Banach Center Publications **2** (PWN – Polish Scientific Publishers, Warsaw 1977) 101 – 165.
3. Bouwmeester D., Ekert A., Zeilinger A. (Eds.): *The Physics of Quantum Information: Quantum Cryptography, Quantum Teleportation, Quantum Computation*. Springer-Verlag, Berlin 2000.
4. Boykin P. O., Mor T., Roychowdhury V., Vatan F.: Algorithms on ensemble quantum computers. arXiv:quant-ph/9907067 21 Jul 1999
5. Braunstein S. L., Caves C. M., Jozsa R., Linden N., Popescu S., Schack R.: Separability of very noisy mixed states and implications for NMR quantum computing. *Physical Review Letters* **83** (1999) 1054 – 1057. arXiv:quant-ph/9811018 v3 18 Dec 1998X

6. Brooks M. (Ed.): *Quantum Computing and Communications*. Springer-Verlag, London, 1999.
7. Bugajski S., Klamka J., Węgrzyn S.: Foundations of quantum computing. Part I. *Archiwum Informatyki Teoretycznej i Stosowanej* **13** (2001) 97 – 142.
8. Cory D. G., Fahmy A. F., Havel T. F.: Ensemble quantum computing by nuclear magnetic resonance spectroscopy. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **94** (1997) 1634 – 1639.
9. Cory D. G., Laflamme R., Knill E., et al: NMR based quantum information processing: achievements and prospects. arXiv:quant-ph/0004104 v1 27 Apr 2000.
10. Cory D. G., Price M. D., Havel T. F.: Nuclear magnetic resonance spectroscopy: an experimentally accessible paradigm for quantum computing. *Physica D* **120** (1998) 82 – 101. arXiv:quant-ph/9709001 v2 8 Oct 1997.
11. Derome A. E.: *Modern NMR Techniques for Chemistry Research*. Pergamon Press, Oxford, 1987.
12. Deutsch D.: Quantum computational networks. *Proceedings of the Royal Society London A* **425** (1989) 73 – 90.
13. DiVincenzo D. P.: Two-bit gates are universal for quantum computation. *Physical Review A* **51** (1995) 1015 – 1022.
14. Ekert A., Jozsa R.: Quantum algorithms: entanglement enhanced information processing. *Philosophical Transactions of the Royal Society London A* **356** (1998) 1769 – 1782. arXiv:quant-ph/9803072 v1 26 Mar 1998
15. Ernst R. R., Bodenhausen G., Wokaun A.: *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*. International Series of Monographs on Chemistry **14**, Clarendon Press, Oxford 1987.
16. Gershenfeld N., Chuang I. L.: Bulk spin-resonance quantum computation. *Science* **75** (1997) 350 – 356.
17. Havel T. F., Somaroo S. S., Tseng C.-H., Cory D. G.: Principles and demonstrations of quantum information processing by NMR spectroscopy. arXiv:quant-ph/9812086 v2 3 Jul 1999
18. Jones J. A.: Nuclear magnetic resonance experiments. [3] 177 – 189.
19. Jones J. A.: NMR quantum computation: a critical evaluation. arXiv:quant-ph/0002085 28 Feb 2000
20. Jones J. A.: Quantum computing and NMR. [6] 71 – 78.
21. Kane B. E.: A silicon-based nuclear spin quantum computer. *Nature* **393** (1998) 133 – 137.
22. Knill E., Chuang I., Laflamme R.: Effective pure states for bulk quantum computation. *Physical Review A* **57** (1998) 3348 – 3363. arXiv:quant-ph/9706053 24 Jun 1997

23. Pawlak Z.: O pojęciu maszyny liczącej. A. Mazurkiewicz (red.): *Problemy przetwarzania informacji*. Tom 2 (Wydawnictwa Naukowo – Techniczne, Warszawa, 1974) 19 – 38.
24. Sanders J. K. M., Hunter B. K.: *Modern NMR Spectroscopy*. Oxford University Press, Oxford 1987.
25. Schack R., Caves C. M.: Classical model for bulk-ensemble NMR quantum computation. *Physical Review A* **60** (1999) 4354 – 4362. arXiv:quant-ph/9903101 v2 30 Apr 1999.
26. Sharf Y., Havel T. F., Cory D. G.: Spatially encoded pseudo-pure states for NMR quantum information processing. arXiv:quant-ph/0005076 17 May 2000
27. Vandersypen L. M. K., Steffen M., Breyta G., Yannoni C. S., Sherwood M. H., Chuang I. L.: Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance. arXiv:quant-ph/0112176 v1 30 Dec 2001
28. Vandersypen L. M. K., Steffen M., Sherwood M. H., Yannoni C. S., Breyta G., Chuang I. L., *Applied Physics Letters* **76** (2000) 648
29. Vandersypen L. M. K., Yannoni C. S., Chuang I. L.: Liquid state NMR quantum computing. arXiv:quant-ph/0012108 v2 14 May 2001
30. Yannoni C. S., Sherwood M. H., Vandersypen L. M. K., Miller D. C., Kubinec M. G., Chuang I. L.: Nuclear magnetic resonance quantum computing using liquid crystal solvents. *Applied Physics Letters* **75** (1999) 3563 – 3565. arXiv:quant-ph/9907063 v2 12 Dec 1999
31. Życzkowski K., Horodecki P., Sanpera A., Lewenstein M.: arXiv:quant-ph/9804024

Recenzent: Prof. dr hab. inż. Jerzy Klamka

Wpłynęło do Redakcji 22 kwietnia 2002 r.

Abstract

The paper presents main topics of the NMR modeling of quantum computations. We begin with a brief introduction of basic concepts of quantum mechanics and that of quantum computations, and with comparing them with the standard mathematical model of the program stored computer. Then the general scheme of NMR spectroscopy experiment is described, and the NMR implementation of quantum gates is discussed. We consider also special problems of ensemble quantum computation, like the definition of the starting state of computation and the read-off of results. Finally, limitations of the NMR quantum computers are mentioned, and some prospects for future development sketched.