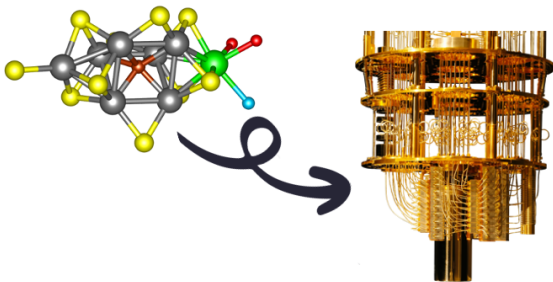


Mapování kvantově chemických problémů na kvantové počítače

Libor Veis

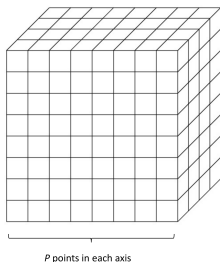
- 1 Mapování v prvním kvantování
- 2 Mapování ve druhém kvantování

Mapování kvantové chemie na kvantové počítače



- Úkolem je zakódovat vlnové funkce kvantově chemických Hamiltoniánů popisujících interakci nerozlišitelných elektronů na registru qubitů (např. rozlišitelných spinů) a působit na ně příslušnými Hamiltoniány.

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots \mathbf{x}_N) \mathcal{A}(|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots \mathbf{x}_N\rangle), \quad |\mathbf{x}_i\rangle = |\mathbf{r}_i\rangle |\sigma_i\rangle$$



- Stav jedné částice: $2 \leftarrow P^3$ amplitud
spin → prostorový
- Stav N částic: $(2P^3)^N = P^{3N} \times 2^N$
- Nechť $P = 2^m \Rightarrow 2^{(3m+1)N}$ amplitud
- $(3m + 1)N$ qubitů může uchovávat vlnovou funkci

- Jednoduchý příklad: 2 *bezspinové* fermiony na čtyřbodové 1D mřížce
- 4 body mohou být reprezentovány 2 qubity: $|0\rangle \equiv |00\rangle$, $|1\rangle \equiv |01\rangle$, $|2\rangle \equiv |10\rangle$, $|3\rangle \equiv |11\rangle$.

- Pro jednoduchost rozlišujeme dvě vlnové funkce: 'n' a 'u'

$$\begin{aligned}|\phi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|3\rangle \\ |\phi_u\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|3\rangle\end{aligned}$$

- Potřebujeme **inicializovat antisymetrickou vlnovou funkci**

$$\begin{aligned}|\Phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_n\rangle_1|\phi_u\rangle_2 - |\phi_u\rangle_1|\phi_n\rangle_2) = \\ &= \frac{1}{6\sqrt{2}}(|1\rangle_1|0\rangle_2 - |0\rangle_1|1\rangle_2 + |1\rangle_1|3\rangle_2 - |3\rangle_1|1\rangle_2 + \\ &\quad + |2\rangle_1|0\rangle_2 - |0\rangle_1|2\rangle_2 + |2\rangle_1|3\rangle_2 - |3\rangle_1|2\rangle_2)\end{aligned}$$

- Poté může následovat časový vývoj, tj. $e^{-iH\delta t}$ (diskutováno později)
- Příznivé škálování (kvadratický potenciál), snadno zobecnitelné na rovnoměrné zacházení s jádry a elektrony (nad rámec Born-Oppenheimera).**
- Vyžaduje však velký počet qubitů (pro reprezentaci mřížky).

- Potřebujeme $N \lceil \log_2 M \rceil$ qubitů pro reprezentaci N elektronů v M báзовých funkcích (seřazených od $|0 \dots 00\rangle$ do $|1 \dots 11\rangle$).
- Připomeňme si příklad molekuly H_2 v minimální bázi:

$$|g_{\uparrow}\rangle = |00\rangle = |0\rangle, |g_{\downarrow}\rangle = |01\rangle = |1\rangle, |u_{\uparrow}\rangle = |10\rangle = |2\rangle, \text{ a } |u_{\downarrow}\rangle = |11\rangle = |3\rangle$$

- Opět je nutná antisymetrizace:

$$|\Phi_{\text{HF}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2) \\ |\Psi\rangle = \alpha |g_{\uparrow} g_{\downarrow}\rangle + \beta |u_{\uparrow} u_{\downarrow}\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2) + \frac{\beta}{\sqrt{2}} (|2\rangle_1 |3\rangle_2 - |3\rangle_1 |2\rangle_2)$$

Hamiltonián získaný projekcí na bázi jednočásticových stavů:

$$H = \sum_{i=1}^N \sum_{p,q=1}^M h_{pq} |\chi_p\rangle_i \langle \chi_q|_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \sum_{p,q,r,s} \langle pq|rs\rangle |\chi_p\rangle_i |\chi_q\rangle_j \langle \chi_s|_j \langle \chi_r|_i,$$

- Každý člen může být vyjádřen jako řetězec Pauliho operátorů, $\mathcal{O}(N^2 M^6)$ členů

Úloha 1

Vyjádřete operátor $h_{pq} |\chi_p\rangle_1 \langle \chi_q|_1$, kde $q = g_{\uparrow}$ a $p = u_{\uparrow}$ pomocí Pauliho operátorů.

- Cíl: vyjádřit operátory ve druhém kvantování pro *nerozlišitelné* elektrony pomocí Pauliho operátorů působících na *rozlišitelné* qubity.
- **Jordan-Wignerovo (JW) mapování:**

- ▶ Qubity kódují obsazenost

$$|o_1 \dots o_M\rangle \rightarrow |q_M \dots q_1\rangle, \quad q_p \in \{0, 1\}$$

- ▶ Reprezentace operátorů ve druhém kvantování:

$$a_p^\dagger = \left(\bigotimes_{j=1}^{p-1} Z_{j'} \right) \otimes Q_{p'}^\dagger, \quad a_p = \left(\bigotimes_{j=1}^{p-1} Z_{j'} \right) \otimes Q_{p'}$$

správná fáze /
“parita stavu”

- ▶ $Q = |0\rangle\langle 1| = (X + iY)/2$ a $Q^\dagger = |1\rangle\langle 0| = (X - iY)/2$ snižují a zvyšují obsazenost daného spinorbitálu

$$H = \sum_j h_j P_j = \sum_j h_j \prod_i \sigma_i^j, \quad \sigma_i^j \in (I, X, Y, Z)$$
$$\Rightarrow e^{-iH\delta t}$$

- Příklad jednoelektronové části H_{el} .

$$H_1 = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q = \sum_p h_{pp} a_p^\dagger a_p + \sum_{p < q} (h_{pq} a_p^\dagger a_q + h_{qp} a_q^\dagger a_p)$$

- Diagonální členy po JW:

$$h_{pp} a_p^\dagger a_p = h_{pp} Q_p^\dagger Q_p = h_{pp} |1\rangle_{p'} \langle 0|_{p'} |0\rangle_{p'} \langle 1|_{p'} = h_{pp} |1\rangle_{p'} \langle 1|_{p'} = \frac{h_{pp}}{2} (I_{p'} - Z_{p'})$$

$$\Rightarrow e^{-i h_{pp} a_p^\dagger a_p \delta t} = e^{\frac{-i h_{pp} \delta t}{2}} R_z(-h_{pp} \delta t)_{p'}$$

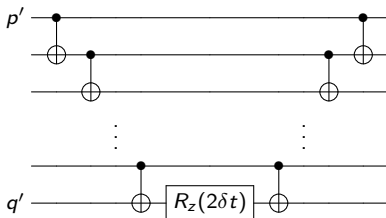
- Mimo diagonální členy po JW:

$$h_{pq} a_p^\dagger a_q + h_{qp} a_q^\dagger a_p = \frac{h_{pq}}{2} \left[X_{p'} \otimes Z_{p' \rightarrow q'} \otimes X_{q'} + Y_{p'} \otimes Z_{p' \rightarrow q'} \otimes Y_{q'} \right] \quad (1)$$

Úloha 2

Odvoďte rovnici (1).

- $\exp[-i\delta t(Z \otimes \dots \otimes Z)]$ je diagonální v počítačové bázi s fázovým posunem $e^{\pm i\delta t}$ na diagonále.
- Znaménko fázového posunu závisí na paritě příslušného stavového vektoru (“+” pokud počet jedniček v binární reprezentaci je lichý, “-” jinak).



- Operace X a Y na kubitech p' a q' se realizují změnou báze (např. Hadamardem).
- Overhead kvantových hradel: $\mathcal{O}(M)$. Parita není ukládána lokálně.

Úloha 3

Ověřte, že $\exp[-i\delta t(X \otimes Z \otimes \dots \otimes Z \otimes X)]$ se realizuje stejným obvodem, pouze se čtyřmi dodatečnými Hadamardy na krajních qubitech (2 před a 2 po).

- **Paritní mapování:**

$$|o_1 \dots o_M\rangle \rightarrow |q_M \dots q_1\rangle, \quad q_{p'} = \left[\sum_{i=1}^p o_i \right] (\bmod 2)$$

- Parita je nyní ukládána lokálně, zatímco obsazenost spin-orbitalů ne.
- Pokud se změní obsazení prvního orbitalu $\Rightarrow$ musí být aktualizovány parity všech. **Žádný zisk, overhead $\mathcal{O}(M)$!**

- **Bravyi-Kitaevovo (BK) mapování:**

- Kombinuje lokalitu informace o obsazenosti i paritě.
- Qubity uchovávají částečné součty obsazeností:

$$|o_1 \dots o_M\rangle \rightarrow |q_M \dots q_1\rangle, \quad q_{p'} = \left[\sum_{q=1}^p \beta_{pq} o_q \right] (\bmod 2)$$

$$\begin{aligned} \beta_1 &= [1], \\ \beta_{2^{i+1}} &= \begin{pmatrix} \beta_{2^i} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A} & \beta_{2^i} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad \beta_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

- Tímto přístupem je overhead pouze $\mathcal{O}(\log_2 M)$.