

Схема квантового симулятора молекулы водорода на основе двух ультрахолодных атомов рубидия

И.Н.Ашкарин, И.И.Бетеров, Д.Б.Третьяков, В.М.Энтин, Е.А.Якшина, И.И.Рябцев

Предложена схема реализации квантового симулятора молекулы водорода на основе двух ультрахолодных атомов рубидия, захваченных в пространственно разнесенные оптические дипольные ловушки. Схема включает в себя адиабатическое приготовление начального квантового состояния двух атомов и итерационную квантовую оценку фазы. Точность измерения энергии основного состояния молекулы численно рассчитана в зависимости от числа итераций. Моделирование проведено с использованием двухкубитовых вентилях на основе эффекта дипольной блокады при кратковременном возбуждении атомов в ридберговские состояния с учетом конечного времени жизни ридберговских состояний и конечных энергий взаимодействия Ван-дер-Ваальса.

Ключевые слова: ультрахолодные атомы рубидия, молекулы водорода, квантовый симулятор.

1. Введение

Квантовое моделирование сложных физических систем – одна из наиболее интересных задач современной физики [1, 2]. Основная проблема проведения такого моделирования на классическом компьютере заключается в экспоненциальном росте необходимых вычислительных ресурсов при увеличении сложности моделируемой системы. В связи с этим в последние десятилетия активно развиваются методы реализации квантовых симуляторов.

Существуют квантовые симуляторы двух типов [3]. Так называемые аналоговые квантовые симуляторы – искусственные квантовые системы, состоящие из отдельных квантовых объектов, взаимодействие между которыми описывается операторами, аналогичными операторам взаимодействия в более сложных физических системах. Основные трудности в создании таких симуляторов связаны с необходимостью поиска подходящих искусственных систем и подбора их параметров, которые были бы пригодны для описания реальных условий эксперимента. К другому типу относятся так называемые цифровые квантовые симуляторы, аналогичные квантовым компьютерам. В таких симуляторах используются алгоритмы оценки фазы произвольного унитарного оператора, позволяющие найти его собственные значения. Если в качестве унитарного оператора выбран пропагатор для

какой-либо физической системы, то можно найти собственные значения энергии соответствующего ему гамильтониана.

Достоинства цифровых квантовых симуляторов заключаются в их универсальности, а также в широких возможностях их применения, в частности в области квантовой химии [4]. Основной задачей проведения квантово-химических расчётов является нахождение возможной структуры и свойств отдельных молекул или молекулярных образований. Эта задача может быть сведена к задаче поиска энергий различных состояний молекулы, или, иными словами, поиска собственных значений унитарного оператора. В частности, алгоритмы поиска собственных состояний молекулы, известные на сегодняшний день, основаны на алгоритме оценки фазы (Phase Estimation Algorithm, PEA), предложенном Абрамсом и Ллойдом [5].

Основные трудности в создании цифровых квантовых симуляторов связаны в первую очередь с ограниченной точностью двухкубитовых вентилях, необходимых для выполнения квантовой оценки фазы. Кроме того, декомпозиция унитарных операторов произвольной размерности, необходимая для моделирования сложных многочастичных систем, является нетривиальной математической задачей [2].

Одним из перспективных подходов к реализации квантовых симуляторов является использование холодных атомов в массивах оптических дипольных ловушек. Подобные массивы могут служить для построения как аналоговых, так и цифровых квантовых симуляторов, что было подробно описано в [3, 6]. В работе [7] продемонстрирован квантовый симулятор, состоящий из 51 холодного атома рубидия в одномерном массиве оптических дипольных ловушек. Примеры современных аналоговых симуляторов и их возможные приложения были подробно рассмотрены в работе [8]. Вместе с тем, проблема низкой точности двухкубитовых вентилях остаётся актуальной для атомных систем, что затрудняет реализацию цифровых квантовых симуляторов. В связи с этим на данном этапе большой интерес представляет реализация

И.Н.Ашкарин, Д.Б.Третьяков, В.М.Энтин, Е.А.Якшина, И.И.Рябцев. Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, Россия, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 13; Новосибирский государственный университет, Россия, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2; e-mail: krestforbes@gmail.com, dtret@isp.nsc.ru, ventin@isp.nsc.ru, yakshina@isp.nsc.ru, ryabtsev@isp.nsc.ru

И.И.Бетеров. Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, Россия, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 13; Новосибирский государственный университет, Россия, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2; Новосибирский государственный технический университет, Россия, 630092 Новосибирск, просп. К.Маркса, 20; e-mail: beterov@isp.nsc.ru

простейшего цифрового квантового симулятора, который может быть создан на основе двух нейтральных атомов, захваченных в пространственно разнесенные оптические дипольные ловушки.

2. Алгоритмы квантовой оценки фазы

Простейшим примером реализации цифрового квантового симулятора является определение энергии связи основного состояния молекулы водорода. Эта задача была экспериментально решена с использованием ядерного магнитного резонанса в работе [9] методом Аспуру-Гузика [10]. Для её решения достаточно использовать два кубита: состояние одного из них кодирует основное состояние молекулы водорода, а второй кубит служит для измерения фазы. Авторы экспериментально реализовали адиабатическое приготовление начального состояния (Adiabatic State Preparation, ASP) и провели итеративное измерение фазы, получив 45 значащих битов данных.

Следуя работе [9], мы использовали минимальный базисный набор 1s-орбиталей Слэтера–Зенера STO-3G [11]. При расстоянии между ядрами атомов в молекуле водорода 1.4 ат. ед. матрица гамильтониана (в атомных единицах) имеет следующий вид [9]:

$$\hat{H}_{\text{mol}} = \begin{pmatrix} -1.8310 & 0.1813 \\ 0.1813 & -0.2537 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Как показано на рис.1,а, в алгоритме оценки фазы [5, 10] используются два квантовых регистра: регистр S (state), в который записывается волновая функция рассматриваемого

состояния системы $|\psi\rangle$, и регистр R (readout), необходимый для хранения промежуточной информации и получения собственного значения энергии E . Обозначим состояния регистра R как $|n\rangle$. Гамильтониан системы H_{mol} используется для генерации унитарного оператора эволюции \hat{U} :

$$\hat{U}|\psi\rangle = \exp(-i\hat{H}_{\text{mol}}\tau)|\psi\rangle = \exp(2\pi i\varphi)|\psi\rangle. \tag{2}$$

Измерив фазу φ , можно найти собственное значение гамильтониана (энергию системы) $E_{\text{meas}} = 2\pi\varphi/\tau$. Для этого мы последовательно контролируемым образом применим операторы вида $\hat{U}_k = \exp(-i\hat{H}_{\text{mol}}\tau)^{2^k}$ к регистру S и в конечном итоге получим следующее состояние системы:

$$|R\rangle \otimes |S\rangle = \sum_n \exp(2\pi i\varphi n) |n\rangle \otimes |\psi\rangle. \tag{3}$$

Затем выполним обратное квантовое преобразование Фурье с регистром R и измерим его состояние. Это позволит нам оценить фазу с произвольной точностью. Обратим внимание на то, что состояние регистра измеряется однократно.

Данный алгоритм может быть реализован даже в том случае, когда регистр R состоит из одного кубита (метод Китаева, рис.1,б) [2, 12]. После выполнения контролируемого унитарного преобразования система из двух кубитов окажется в состоянии $(1/\sqrt{2})[|0\rangle + \exp(2\pi i\varphi)|1\rangle]|\psi\rangle$. Система после вентиля Адамара H находится в состоянии

$$\frac{1}{2}[1 + \exp(2\pi i\varphi)]|0\rangle|\psi\rangle + \frac{1}{2}[1 - \exp(2\pi i\varphi)]|1\rangle|\psi\rangle. \tag{4}$$

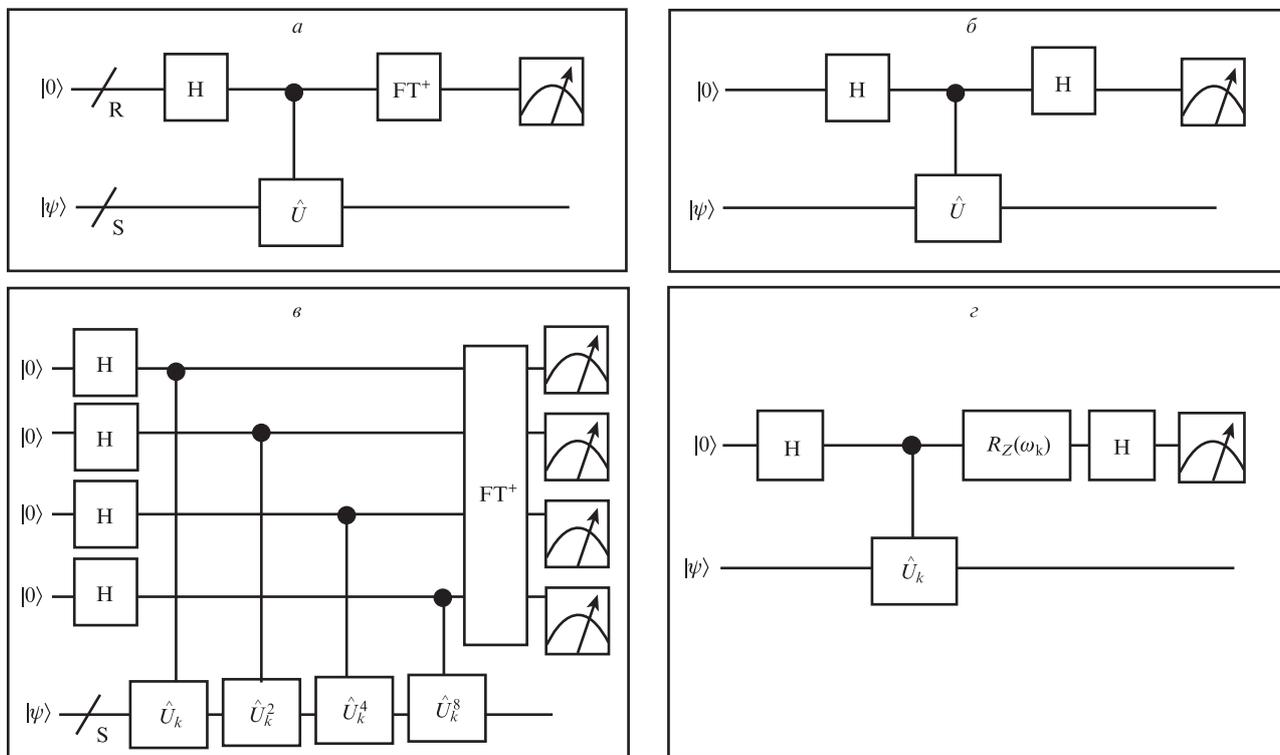


Рис.1. Общая схема выполнения квантовой оценки фазы (а), алгоритм Китаева [2, 12] для оценки фазы с использованием одного контролирующего кубита (б), итерационный алгоритм оценки фазы Аспуру-Гузика [10] (в) и адаптивная схема оценки фазы с единственным измерением контролирующего кубита на каждом шаге [13] (г). Здесь H – вентиль Адамара; $\hat{U} = \exp(-i\hat{H}_{\text{mol}}\tau)$; $\hat{U}_k = \exp(-i\hat{H}_{\text{mol}}\tau)^{2^k}$; FT^+ – обратное квантовое преобразование Фурье; $R_Z(\omega_k)$ – вращение кубита вокруг оси Z на угол ω_k .

Вероятность нахождения контролируемого кубита в состоянии «0» есть $P = \cos^2(\pi\varphi)$. Измеряя вероятность P , можно найти фазу φ . Вместо однократного измерения состояния многокубитового регистра, для получения заданной точности измеряемой фазы требуется произвести многократное измерение состояния одного кубита.

Отличительной особенностью алгоритма Аспуру-Гузика [10], изображенного на рис.1,в, является его рекурсивность, позволяющая значительно сократить число кубитов в регистре R , достигая при этом необходимой точности в оценке фазы. В исходной работе [10] было предложено использовать четыре кубита в регистре R , как показано на рис.1,в. На первом шаге к регистру S системы применяется оператор $\hat{U}_0 = \hat{U}$. Это позволяет получить оценку фазы φ с точностью $15/16$. После этого на каждом шаге итерации выполняется унитарное преобразование

$$\hat{U}_k = [\exp(-2\pi i\varphi'_{k-1}) \hat{U}_{k-1}]^2. \quad (5)$$

Здесь φ'_{k-1} – нижняя граница оценки фазы, полученной на предыдущем шаге. Таким образом, при каждой последующей итерации измеряется следующий значащий бит. Авторы работы [9] использовали алгоритм Аспуру-Гузика для регистра R , состоящего из одного кубита. В этой работе ими на каждом шаге итерации измерялись три бита, причем каждая итерация приводила к увеличению точности на один бит.

Интересный метод итерационной оценки фазы был предложен в работе [13]. Его преимущество заключается в том, что каждый следующий значащий бит можно получить в результате единственного измерения состояния вспомогательного кубита. Схема оценки фазы изображена на рис.1,г. В отличие от рассмотренных выше схем, измерение начинается с младшего бита фазы. Каждая итерация включает в себя однократное измерение состояния контролирующего кубита. Перед измерением его состояние корректируется для учета результатов предыдущих измерений путем выполнения фазового сдвига $R_Z(\omega_k)$.

В соответствии с принятой в книге Нильсена и Чанга [2] системой обозначений, представим фазу φ в виде последовательности m битов $\varphi_1 \dots \varphi_m$ в следующей форме: $\varphi = 0.\varphi_1\varphi_2\dots\varphi_m = \varphi_1/2 + \varphi_2/4 + \dots + \varphi_m/2^m$. В первой итерации алгоритма выполняется контролируемое преобразование $\hat{U}_m = \exp(-i\hat{H}_{\text{mol}}\tau)^{2^m}$ (здесь мы положили $\omega_m = 0$). Вероятность получения результата «0» при измерении состояния первого кубита есть $P_0 = \cos^2[\pi(0.\varphi_m)]$, поскольку все старшие биты фазы не влияют на результат измерений из-за периодичности комплексной экспоненты. Поскольку φ_m способно принимать только два возможных значения, его измерение может быть проведено однократно.

На следующем шаге выполняется контролируемое вращение $\hat{U}_m = \exp(-i\hat{H})^{2^{m-1}}$. Состояние системы после его выполнения из-за периодичности комплексной экспоненты можно представить следующим образом: $(1/\sqrt{2})[|0\rangle + \exp(2\pi i 0.\varphi_{m-1}\varphi_m) |1\rangle] |\psi\rangle$. Чтобы исключить из задачи уже измеренный бит φ_m , производится вращение $R_Z(\omega_{m-1})$ на угол $\omega_{m-1} = -2\pi(0.\varphi_m)$, как показано на рис.1,г. В итоге после выполнения вентиля Адамара вероятность найти контролирующий кубит в состоянии «0» есть $P_0 = \cos^2[\pi(0.\varphi_{m-1})]$, что позволяет определить значение бита φ_{m-1} в результате единственного измерения.

Точно таким же образом происходит измерение всех последующих битов. Как было показано в работе [13],

точность данного алгоритма равна точности стандартного измерения на основе обратного квантового преобразования Фурье регистра, состоящего из m битов.

3. Адиабатическое приготовление начального состояния кубита

Квантовые алгоритмы оценки фазы требуют, чтобы контролируемый кубит был первоначально приготовлен в собственное состояние $|\psi\rangle$ гамильтониана \hat{H}_{mol} . Для этого может быть использован метод адиабатического приготовления начального состояния [9, 10]. Первоначально кубит готовится в состояние $(1/\sqrt{2})(|0\rangle - |1\rangle)$, которое является собственным для матрицы

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Пусть вспомогательный гамильтониан

$$\hat{H}_{\text{ad}}(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right)\sigma_x + \frac{t}{T}\hat{H}_{\text{mol}} \quad (6)$$

описывает медленное изменение гамильтониана системы от σ_x до \hat{H}_{mol} за время T , выраженное в безразмерных относительных единицах. Если динамика системы описывается оператором эволюции $\hat{U}|\psi\rangle = \exp(-i\hat{H}_{\text{ad}}t)|\psi\rangle$, то кубит останется в собственном состоянии гамильтониана \hat{H}_{ad} и в конечном счете окажется в собственном состоянии гамильтониана \hat{H}_{mol} . Эволюцию состояния системы в течение времени T можно разделить на M шагов. Преобразование состояния кубита на каждом шаге m описывается оператором эволюции

$$\hat{U}_{\text{ad}}^m(t) = \exp\left[-i\left(1 - \frac{m}{M}\right)\frac{\Delta T}{2}\sigma_x\right] \exp\left[-i\frac{m\Delta T}{M}\hat{H}_{\text{mol}}\right] \times \exp\left[-i\left(1 - \frac{m}{M}\right)\frac{\Delta T}{2}\sigma_x\right]. \quad (7)$$

Здесь $\Delta T = T/M$, а m принимает значения от 1 до M . Оператор эволюции может быть представлен в виде последовательности однокубитовых вращений с использованием формулы Троттера [14],

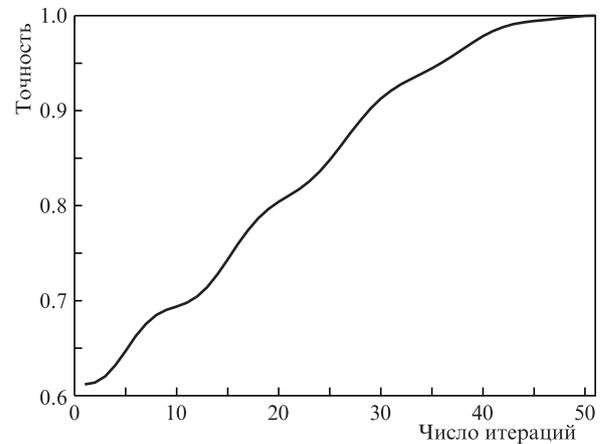


Рис.2. Численно рассчитанная зависимость точности задания начального состояния кубита от числа итераций при адиабатическом приготовлении состояния.

$$\exp[it(\hat{A} + \hat{B})] = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\exp\left(\hat{A} \frac{t}{n}\right) \exp\left(\hat{B} \frac{t}{n}\right) \right]^n, \quad (8)$$

и разложения по базису $\hat{H}_{\text{mol}} = 1/2 \sum_i \text{Tr}(\hat{H}_{\text{mol}} \sigma_i) \sigma_i$, где $i = 0, x, y, z$.

Точность приготовления начального состояния может быть определена как $|\langle \psi_{\text{ad}} | \psi \rangle|^2$, где $|\psi_{\text{ad}}\rangle$ – состояние, полученное в результате адиабатического приготовления. Численно рассчитанная зависимость точности от числа шагов приведена на рис.2 при $T = 18.4$ и $M = 51$. Полученная в численном расчете погрешность не превысила 10^{-2} .

4. Схема квантового моделирования с использованием ультрахолодных нейтральных атомов рубидия

Для квантового моделирования молекулы водорода мы рассматриваем два атома рубидия, захваченные в пространственно разнесенные оптические дипольные ловушки, образованные жестко сфокусированными лазерными пучками [15]. В качестве логических состояний кубитов «0» и «1» используются долгоживущие сверхтонкие подуровни основного состояния атомов. Однокубитовые вентили с ультрахолодными нейтральными атомами могут быть реализованы с использованием микроволнового излучения или двухфотонных оптических рамановских переходов между сверхтонкими подуровнями основного состояния атомов. Такие вентили были продемонстрированы с высокой точностью в работах [16,17].

Взаимодействие двухуровневой системы с резонансным лазерным излучением может быть описано матрицей [18]:

$$R(\theta, \chi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & ie^{-i\chi} \sin \frac{\theta}{2} \\ ie^{i\chi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Здесь угол θ задается площадью лазерного импульса, а угол χ – его фазой. Значения $\chi = 0$ и $\chi = \pi/2$ соответствуют вращениям кубита на угол θ вокруг осей X и Y соответственно. Все однокубитовые вентили, необходимые для адиабатического приготовления начального состояния и преобразования состояний отдельных кубитов во время итерационной оценки фазы, могут быть сведены к последовательности X - и Y -вращений.

Основную трудность представляет выполнение контролируемых двухкубитовых унитарных операций. Для этого может быть использована изображенная на рис.3 схема, аналогичная предложенной нами в работах [18–20]. В этой схеме используется эффект дипольной блокады, заключающийся в невозможности одновременного возбуждения близкорасположенных атомов в ридберговские состояния [21].

Если контролирующий атом первоначально находится в состоянии «1» и не возбуждается лазерным π -импульсом 1 в ридберговское состояние $|r\rangle$, то результатом последовательности лазерных π -импульсов 2–6 будет преобразование, описываемое матрицей (1). Если контролирующий атом первоначально находился в состоянии «0», то лазерным импульсом 1 он будет возбужден в состояние $|r\rangle$. Вследствие дипольной блокады, исключаяющей возбуждение обоих атомов в коллективные состояния $|rr'\rangle$ или $|r'r\rangle$, действие импульсов 2–6 будет неэффе-

тивным. Затем контролирующий атом вернется в исходное состояние под действием лазерного импульса 7. Чтобы исключить нежелательный фазовый сдвиг при последовательном возбуждении и девозбуждении ридберговских состояний, импульсы 5,6,7 имеют противоположный по сравнению с импульсами 1,2,3 знак частоты Раби. Это соответствует фазовому сдвигу лазерного излучения на π , как показано на рис.3.

Экспериментальная реализация такой схемы требует выбора состояний $|r\rangle, |r'\rangle, |r''\rangle$, сильно взаимодействующих при одновременном возбуждении двух атомов в коллективные состояния $|rr'\rangle$ и $|r'r''\rangle$. В качестве примера рассмотрим состояния $|r = 81S\rangle, |r' = 80S\rangle$ и $|r'' = 82S\rangle$. Основной вклад во взаимодействие атомов в состояниях $|81S, 80S\rangle$ вносит резонанс Фёрстера $|81S, 80S\rangle \rightarrow |80P_{3/2}, 80P_{3/2}\rangle$ с энергетическим дефектом -161 МГц [22]. Энергия взаимодействия Ван-дер-Ваальса для этого канала $U = 4750$ ГГц·мкм⁶. Основной вклад во взаимодействие атомов в состояниях $|81S, 82S\rangle$ вносит резонанс Фёрстера $|81S, 82S\rangle \rightarrow |80P_{3/2}, 81P_{3/2}\rangle$ с энергетическим дефектом 110 МГц. Энергия взаимодействия Ван-дер-Ваальса для этого канала $U = -7350$ ГГц·мкм⁶. Таким образом, препятствующий лазерному возбуждению энергетический сдвиг превысит 100 МГц уже при межатомном расстоянии 4 мкм и менее. Энергетический интервал между состояниями 80S и 82S составляет 27.9 ГГц. Двухфотонные переходы между этими состояниями могут быть реализованы с использованием микроволнового излучения, которое не будет влиять на контролирующий атом, находящийся в состоянии 81S.

Для численного моделирования данного эксперимента мы декомпозировали унитарное преобразование $\hat{U}_m = \exp(-i\hat{H}\tau)^{2^{m-1}}$ как последовательность X - и Y -вращений на заданные углы, рассчитанные отдельно для каж-

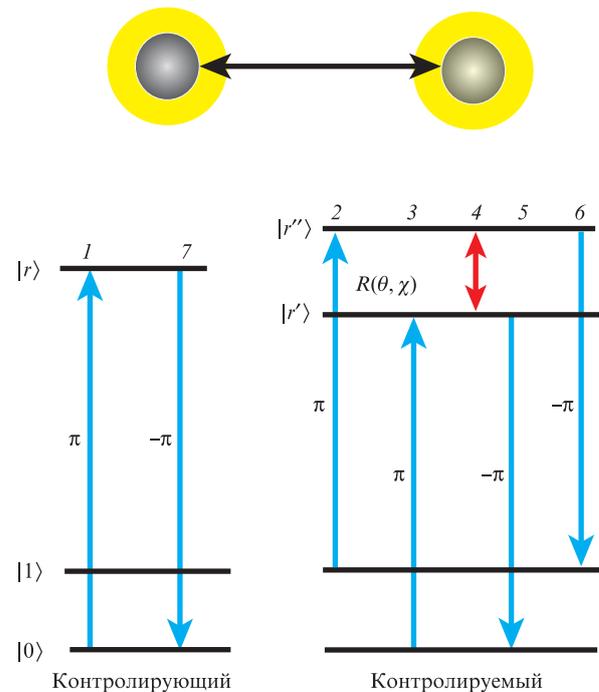


Рис.3. Схема контролируемого вращения кубита для двух ультрахолодных атомов в оптических дипольных ловушках. Лазерные π -импульсы 1,2,3,5,6,7 возбуждают и девозбуждают ридберговские состояния с индивидуальной адресацией к отдельным атомам. Микроволновый импульс 4 имеет произвольную площадь и фазу.

дого шага итерации. В расчетах мы учли конечное время жизни ридберговских состояний 80S ($\tau = 208$ мкс), 81S ($\tau = 214$ мкс), и 82S ($\tau = 221$ мкс) при температуре 300 К [23] и конечные энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса при расстоянии между оптическими дипольными ловушками 8 мкм. Для моделирования процесса измерений мы рассчитывали вероятность нахождения контролирующего кубита в состоянии $\langle 0 \rangle$ и принимали его состояние за $\langle 0 \rangle$ в том случае, если полученная вероятность превышала 0.5. Обратим внимание на то, что для всех битов, кроме младшего, численно рассчитанная вероятность находится вблизи значений 0 или 1 для каждой итерации.

Численно рассчитанная зависимость относительной ошибки $|(E - E_{\text{meas}})|/E$ в определении энергии связи основного состояния молекулы водорода от числа итераций алгоритма оценки фазы приведена на рис.4. Здесь E – собственное значение матрицы \hat{H}_{mol} ; E_{meas} – результат численного моделирования квантового алгоритма. Ступенчатый характер зависимости связан с тем, что изменение точности происходит только тогда, когда измеренный следующий значащий бит оказывается равным 1. Учет конечного времени жизни ридберговских состояний и конечной энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса при выбранных нами параметрах эксперимента не приводит к ухудшению точности расчета, которая определяется только числом итераций. Наши расчеты показали, что относительная ошибка не превышает 10^{-14} при 50 итерациях. Мы пренебрегли конечной точностью однокубитовых вентилях, а также влиянием конечной ширины линии лазерного излучения, конечным временем жизни промежуточных возбужденных состояний (при использовании, например, двухфотонного лазерного возбуждения ридберговских состояний), движением атомов, влиянием паразитных электрических и магнитных полей.

Интересная особенность полученных результатов заключается в том, что чувствительность алгоритма к ошибкам при выполнении двухкубитовых вращений имеет пороговый характер. Это связано с дискретностью измеренного состояния кубита при каждой итерации. При вероятности нахождения кубита в состоянии $\langle 0 \rangle$, превышающей 0.5 и не достигающей 1, в случае единственного измерения он может быть обнаружен в состоянии $\langle 1 \rangle$, что приведет к вычислительной ошибке. Конечное время

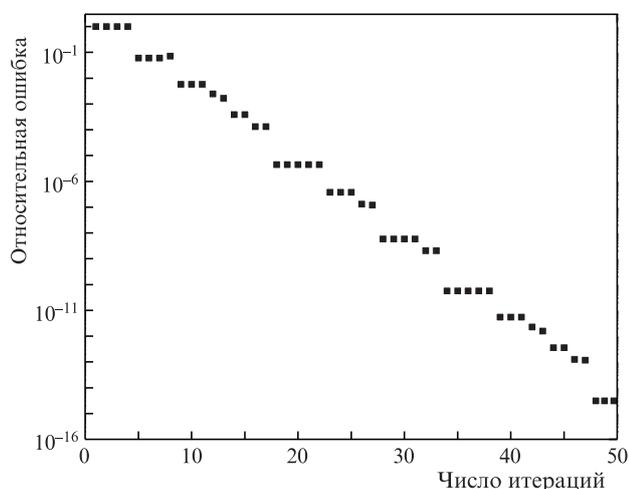


Рис.4. Численно рассчитанная зависимость относительной ошибки измерения энергии основного состояния молекулы водорода от числа итераций в алгоритме оценки фазы.

жизни ридберговских атомов и конечные энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса приводят к уменьшению вероятности правильного измерения состояния кубита. В наших расчетах при расстоянии между атомами 8 мкм вероятность ошибочного измерения состояния отдельного бита (кроме трех младших битов) не превышает 2%. Такие ошибки могут быть легко устранены за счет нескольких дополнительных измерений на каждой итерации.

5. Заключение

Предложена схема реализации квантового симулятора молекулы водорода с использованием двух ультрахолодных атомов в оптических ловушках. Схема основана на адиабатическом приготовлении начального состояния и на итерационной квантовой оценке фазы с единственным измерением конечного состояния атома при каждой итерации. Преимущество использованного нами итерационного метода заключается в том, что для каждой итерации требуется единственное измерение квантового состояния контролирующего кубита. Точность измерения энергии основного состояния молекулы численно рассчитана в зависимости от числа итераций. При моделировании мы представили адиабатическое приготовление начального состояния как последовательность однокубитовых вращений вокруг осей X и Y . Для реализации алгоритма квантовой оценки фазы мы предложили схему выполнения контролируемых вращений с использованием эффекта дипольной блокады при возбуждении двух атомов в ридберговские состояния. В расчетах продемонстрировано, что при учете конечного времени жизни ридберговских уровней и конечных энергий взаимодействия Ван-дер-Ваальса возможно достижение высокой точности измерения энергии молекулы (относительная ошибка не превышает 10^{-14} при 50 итерациях).

Экспериментальная реализация данного алгоритма представляет интерес для демонстрации простейшего цифрового квантового симулятора на основе ультрахолодных нейтральных атомов. Наиболее существенное его ограничение связано с необходимостью индивидуального подбора параметров контролируемых вращений для каждой итерации алгоритма оценки фазы. Альтернатива такому подбору – использование формулы Троттера [14], что требует резкого увеличения числа двухкубитовых вентилях и в конечном итоге приводит к уменьшению точности [3].

Численное моделирование алгоритма итерационной оценки фазы поддержано РФФИ (грант № 17-02-00987). Разработка схемы контролируемых вращений поддержана грантом РНФ № 18-12-00313. Моделирование адиабатического приготовления начального состояния проведено в рамках гранта РФФИ № 19-52-15010. Работа также поддержана Фондом перспективных исследований (в части исследования межатомных взаимодействий), Новосибирским государственным университетом и РАН.

Авторы выражают благодарность Марку Саффману за ценные обсуждения.

1. Lloyd S. *Science*, **273**, 1073 (1996).
2. Nielsen M.A., Chuang I.L. *Quantum Computation, Quantum Information* (Cambridge: Cambridge University Press, 2011).
3. Georgescu I.M., Ashhab S., Nori F. *Rev. Mod. Phys.*, **86**, 153 (2014).
4. 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. *Nature Chem.*, **2**, 106 (2010).

5. Abrams D. S., Lloyd S. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 5162 (1999).
6. Buluta I., Ashhab S., Nori F. *Reports Progr. Phys.*, **74**, 104401 (2011).
7. Bernien H., Schwartz S., Keesling A., Levine H., Omran A., Pichler H., Choi S., Zibrov A.S., Endres M., Greiner M., Vuletić V., Lukin M.D. *Nature*, **551**, 579 (2017).
8. Gross C., Bloch I. *Science*, **357**, 995 (2017).
9. Du J., Xu N., Peng X., Wang P., Wu S., Lu D. *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 030502 (2010).
10. Aspuru-Guzik A., Dutoi A.D., Love P.J., Head-Gordon M. *Science*, **309**, 1704 (2005).
11. Levine I.N. *Quantum Chemistry* (New York: Prentice-Hall Inc., Upper Saddle River, 2000).
12. Китаев А.Ю. *УМН*, **52**, вып.6 (318), 53 (1997).
13. Dobšiček M., Johansson G., Shumeiko V., Wendin G. *Phys. Rev. A*, **76**, 030306(R) (2007).
14. Trotter H. *Proc. Amer. Math. Soc.*, **10**, 545 (1959).
15. Grimm R., Weidemüller M., Ovchinnikov Y.B. *Advances in Atomic, Molecular, Optical Physics* (London: Academic Press, 2000, Vol. 42, p. 95).
16. Sheng C., He X., Xu P., Guo R., Wang K., Xiong Z., Liu M., Wang J., Zhan M. *Phys. Rev. Lett.*, **121**, 240501 (2018).
17. Xia T., Lichtman M., Maller K., Carr A.W., Piotrowicz M.J., Isenhower L., Saffman M. *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 100503 (2015).
18. Beterov I.I., Saffman M., Yakshina E. A., Tretyakov D.B., Entin V.M., Hamzina G.N., Ryabtsev I.I. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **49**, 114007 (2016).
19. Beterov I.I., Saffman M., Yakshina E.A., Zhukov V.P., Tretyakov D.B., Entin V.M., Ryabtsev I.I., Mansell C.W., MacCormick C., Bergamini S., Fedoruk M.P. *Phys. Rev. A*, **88**, 010303(R) (2013).
20. Beterov I.I., Saffman M., Zhukov V.P., Tretyakov D.B., Entin V.M., Yakshina E.A., Ryabtsev I.I., Mansell C.W., MacCormick C., Bergamini S., Fedoruk M.P. *Laser Phys.*, **24**, 074013 (2014).
21. Lukin M.D., Fleischhauer M., Cote R., Duan L.M., Jaksch D., Cirac J.I., Zoller P. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 037901 (2001).
22. Walker T.G., Saffman M. *Phys. Rev. A*, **77**, 032723 (2008).
23. Beterov I.I., Ryabtsev I.I., Tretyakov D.B., Entin V.M. *Phys. Rev. A*, **79**, 052504 (2009).