



УДК 53.536+004

© 2008

Є. Д. Білоколос, М. В. Теслик

Термодинамічний аналіз квантових обчислень

(Представлено академіком НАН України В. Г. Бар'ятаром)

The entropy dynamics of register qubits under interaction while processing any many-qubit gate has been considered. These results are applied to the estimation of the amounts of generated entropy and energy dissipation for two- and three-qubit gates, which allows us to calculate their contribution to the "price" of both processing any quantum algorithm and reading a result while measuring the register's state.

Дослідження квантових інформаційних процесів, яке на сьогодні є однією з актуальних задач сучасної фізики та математики, почалося ще у 1994 році, коли П. Шор відкрив свій алгоритм факторизації цілих чисел [1].

Загальновідомо, що необхідною умовою максимальної ефективності класичних обчислень є їх зворотність, що розглядається в термодинаміці, зокрема у зв'язку з демоном Максвелла [2] та принципом Ландауера [3]. Даний зв'язок у квантовому випадку висвітлюється в таких роботах, як [4], що у свою чергу поклало початок дослідженням квантових термодинамічних циклів та їх оборотності.

Аналіз квантового одночастинкового циклу Карно наведено в роботі [5]; реалізацію даного циклу за допомогою резонаторів описано в [6]. Робота [7] присвячена моделюванню циклу Карно на трикубітовому регістрі. Різноманітні квантові теплові машини описано в [8, 9]. Термодинамічні дослідження квантових моделей, таких як модель Джейнса–Каммінгса, наводяться в [10]; квантово-термодинамічний аналіз взаємодії між різними системами розглядається в [11].

Постановка задачі. В даній роботі аналізуються 2- та 3-кубітові вентиля контрольного типу; регістр включатиме контрольні кубіти $|c\rangle$, залежно від стану яких змінюватиметься стан цільового кубіту $|t\rangle$. Квантові ефекти враховуються лише при дії однокубітових вентилів. Міжкубітовими кореляціями, що виникають внаслідок дії багатокубітового вентиля, ми нехтуватимемо, відкидаючи $|c\rangle$; саме це й призводить до зростання ентропії.

Такий підхід дає можливість розглядати еволюцію квантового регістра під дією багатокубітових вентилів як певний квантовий термодинамічний цикл, для якого можна ввести к. к. д. η . Ентропія та дисипація енергії будуть результатом нехтування наведених кореляцій.

Кубіт $|t\rangle$ виступає в ролі квантового контролюючого пристрою, оскільки він змінює свій стан відповідно до стану $|c\rangle$. Така зміна стану може розглядатися як певний фільтр, що визначає послідовність подальших операцій на регістрі. Це є аналогом квантового демона Максвелла, який відрізняється від класичного тим, що він може змінювати свій стан без вимірювання $|c\rangle$, а це є наслідком лінійності квантових вентилів.

Двокубітові вентилялі. Розглянемо кубіт у стані $|c_0\rangle$ з енергією m_0 , який переходить у суперпозицію станів з енергіями $m_- < m_0$, $m_+ > m_0$:

$$|c_0\rangle \rightarrow |c\rangle = \alpha|-\rangle + \beta|+\rangle,$$

де \pm відповідає m_{\pm} . Ініціюємо $|t\rangle$ в початковому стані

$$|t_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_-\rangle + |t_+\rangle), \quad (1)$$

який взаємодіє з $|c\rangle$ таким чином:

$$|c\rangle|t_0\rangle \rightarrow |ct\rangle = \alpha|-\rangle|t_-\rangle + \beta|+\rangle|t_+\rangle, \quad (2)$$

що еквівалентно виконанню двокубітового вентилялю. Тоді матриця густини цільового кубіту після взаємодії має вигляд

$$\rho_t = \text{Tr}_c |ct\rangle\langle ct| = |\alpha|^2 |t_-\rangle\langle t_-| + |\beta|^2 |t_+\rangle\langle t_+|.$$

Відповідно, зміна ентропії цільового кубіту в даному процесі буде

$$\Delta S_t = S(\rho_t) - S(\rho_{t_0}) = -|\alpha|^2 \ln |\alpha|^2 - |\beta|^2 \ln |\beta|^2, \quad 0 \leq \Delta S_t \leq \ln 2. \quad (3)$$

Отже, як видно з (3), спроба визначення стану контрольного кубіту призводить до генерації ентропії на цільовому кубіті. Цей процес характеризується коефіцієнтом корисної дії η_{2q} . Відповідно до принципу Ландауера,

$$\eta_{2q} \geq 0 \Leftrightarrow T \Delta S_t \leq T \ln 2 \leq m_+ - m_0, \quad (4)$$

де T — температура регістра.

Дані розрахунки аналогічні проведеним у [12]; відмінність полягає у зміні формалізму для узгодженості з нижченаведеними міркуваннями.

Трикубітові вентилялі. Введемо додатковий контрольний кубіт з базисом $|o\rangle$, $|i\rangle$. Тоді стан контрольного підрегістра

$$|c_1 c_2\rangle = \alpha|o-\rangle + \beta|o+\rangle + \gamma|i-\rangle + \delta|i+\rangle. \quad (5)$$

Нехай цільовий кубіт ініційовано у стані (1). Його еволюція визначатиметься не лише кубітом $|c_1\rangle$, а й додатковим контрольним кубітом $|c_2\rangle$. Еволюцію регістра визначаємо так:

$$|c_1 c_2\rangle|t_0\rangle \rightarrow |c_1 c_2 t\rangle = \alpha|o-\rangle|t_-\rangle + \beta|o+\rangle|t_+\rangle + \gamma|i-\rangle|t_0\rangle + \delta|i+\rangle|t_0\rangle, \quad (6)$$

що еквівалентно виконанню трикубітового вентилялю на регістрі; тоді власні значення матриці густини цільового кубіту $\rho_t = \text{Tr}_{c_1 c_2} |c_1 c_2 t\rangle\langle c_1 c_2 t|$

$$\rho_{t1} = \frac{1 + \sqrt{\chi}}{2}, \quad \rho_{t2} = \frac{1 - \sqrt{\chi}}{2},$$

де $\chi = (|\beta|^2 - |\alpha|^2)^2 + (|\gamma|^2 + |\delta|^2)^2$. Отже, зміна ентропії

$$\Delta S_t = -\rho_{t1} \ln \rho_{t1} - \rho_{t2} \ln \rho_{t2} - 0, \quad 0 \leq \Delta S_t \leq \ln 2. \quad (7)$$

Дисипація у багатокубітових вентилях. Вираз (2) описує виконання двокубітового вентиля; рівняння (3) оцінює величину кореляцій, індукованих ним на регістрі. Тоді з (4)

$$\eta_{2q} = 1 - \frac{T\Delta S_t}{m_+ - m_0} \leq 1. \quad (8)$$

Тут η_{2q} є к. к. д. термодинамічного циклу, який визначається двокубітовим вентиляем; $1 - \eta_{2q}$ оцінює енергію, що розсіюється внаслідок нехтування квантовими кореляціями, індукованими ним у регістрі.

Для трикубітового регістра отримуємо, що (6) описує вентиль, де (5) є контрольним підрегістром, а $|t_{(0)}\rangle$ кодує цільовий кубіт. Тоді (7) оцінює ентропію, що виникає внаслідок дії вентиля за умови нехтування індукованих ним кореляцій між $|c_1 c_2\rangle$ та $|t\rangle$. Коефіцієнт корисної дії η_{3q} даного циклу описується виразом (8). Оцінюючи внесок в η_{3q} компонентів $|t_{\pm}\rangle$, необхідно провести нормалізацію, врахувавши відповідні ймовірності виходу:

$$\eta_{3q,+} = \left(|\beta|^2 + \frac{\zeta^2}{2} \right) \eta_{2q}, \quad \eta_{3q,-} = \left(|\alpha|^2 + \frac{\zeta^2}{2} \right) \eta_{2q}, \quad (9)$$

де $\zeta^2 = |\gamma|^2 + |\delta|^2$.

Використовуючи формули (8) і (9), можна оцінити ентропію, дисипацію та к. к. д. довільного квантового алгоритму, які беруть початок у нелокальних квантових кореляціях, спричинених дією дво- та трикубітових вентилів, що визначає термодинамічну "ціну" його виконання.

Термодинамічний аналіз FFT_Q. Швидке квантове перетворення Фур'є FFT_Q на N -кубітовому регістрі задається послідовністю операторів $\text{FFT}_Q = \Phi_0 \cdots \Phi_{N-1}$, де $\Phi_k = W_k C_{k,N-1} C_{k,N-2} \cdots C_{k,k+1}$, W_k — перетворення Волша-Адамара; $C_{k,s}$ — двокубітовий фазовий вентиль.

Даний алгоритм включає в себе $N(N-1)/2$ двокубітових фазових вентилів. Кожний з них визначає певний квантовий термодинамічний процес, що генерує ентропію $\Delta S_{t|k}$ (див. (3)); тут k задає індекс (номер) вентиля, або процесу. Повна ентропія, згідно з (3), тоді визначається як

$$\Delta S_t = - \sum_{k=1}^{N(N-1)/2} (|\alpha_k|^2 \ln |\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2 \ln |\beta_k|^2) \leq \frac{N(N-1)}{2} \ln 2, \quad (10)$$

що дозволяє визначити величину дисипації енергії ΔE даним алгоритмом (див. (4) і (10)):

$$\Delta E = \sum_{k=1}^{N(N-1)/2} T\Delta S_{t|k} = T\Delta S_t \leq T \frac{N(N-1)}{2} \ln 2. \quad (11)$$

Отже, кожний двокубітовий вентиль еквівалентний квантовому термодинамічному циклу, що генерує ентропію $\Delta S_{t|k}$, та розсіює енергію $T\Delta S_{t|k}$. Для повного к. к. д. алгоритму

$$\text{FFT}_Q \text{ з (11) } \eta_{\text{FFT}_Q} = 1 - T\Delta S_t/\xi, \text{ де } \xi = \sum_{k=1}^{N(N-1)/2} (m_{+,k} - m_{0,k}).$$

Термодинамічний аналіз вимірювань на регістрі. Розглянемо квантове обчислення, що дає правильну відповідь $|+\rangle$ або, у випадку помилки, $|-\rangle$. Згідно з квантовою термодинамікою, воно характеризується к. к. д. η , який визначає дисипацію; процес буде оборотним, лише якщо $\eta = 1$, інакше для його реалізації необхідно буде розсіяти $1 - \eta \neq 0$ частину енергії, задіяну для операцій на регістрі.

Проте процес зчитування результату обчислень внаслідок редукції стану квантового регістра є необоротним процесом, і тому вимірювання на регістрі повинні призводити до генерації ентропії та дисипації енергії.

Нехай $|t\rangle$ кодує детектор, що зчитує результат (стан кубіту $|c\rangle$). Детектор, ініційований у стані $|t_0\rangle$ (1), переходить у процесі вимірювання в стан $|t_{\pm}\rangle$, після чого його знову необхідно перевести в $|t_0\rangle$, що й призведе до додаткової генерації ентропії та дисипації. Аналіз даного процесу подібний до аналізу квантового двигуна Сциларда [12]. Коефіцієнт корисної дії η_{2q} циклу

$$\eta_{2q} = \eta - \frac{T\Delta S_t}{m_+ - m_0} \leq \eta. \quad (12)$$

Узагальнення можна зробити, ввівши додатковий кубіт, що відкриває (перебуваючи в стані $|o\rangle$) або закриває (в стані $|i\rangle$) детектору доступ до регістра. Даний процес вимірювання з контрольованим доступом характеризується к. к. д. $\eta_{3q,\pm}$ (див. (9)). З (12) та з $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$ (див. (5)), $\eta_{3q,-} + \eta_{3q,+} = \eta_{2q} = \eta$ можливо тоді і тільки тоді, коли $|\beta|^2 = 1$; цей випадок реалізується лише за умови переходу регістра в $|o+\rangle$, що еквівалентно зупинці обчислень у фіксованому базисному стані.

Отже, показано, що квантові обчислення, навіть за умови їх оборотності, призводять до генерації ентропії та дисипації енергії внаслідок необхідності зчитування результату обчислень. Слід відзначити, що аналогічний результат можна отримати й у класичному випадку, оскільки класичний детектор також необхідно ініціювати у початковому стані після кожного циклу вимірювання.

Таким чином, в роботі виконано термодинамічний аналіз еволюції дво- та трикубітових логічних вентилів, що дає змогу описувати їх дію в термінах термодинамічних циклів і ввести відповідну генерацію ентропії та дисипації.

Одержані результати можуть бути застосовані для термодинамічного аналізу операцій на квантовому регістрі, як це продемонстровано на прикладі алгоритму квантового швидкого перетворення Фур'є та процесу вимірювань.

1. *Shor P. W.* Algorithms for quantum computation: discrete log and factoring // Proc. 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science. – Inst. of Electrical and Electronic Engineers Computer Society Press, 1994. – P. 124–134.
2. *Maxwell J. C.* Theory of Heat. – London: Longmans, Green and Co., 1902. – 348 p.
3. *Landauer R.* Irreversibility and heat generation in the computing process // IBM J. of Res. and Develop. – 1961. – **5**, No 3. – P. 261–269.
4. *Mora C. E., Briegel H. J., Kraus B.* Quantum Kolmogorov complexity and its applications – 2006. – arXiv:quant-ph/0610109.
5. *Bender C. M., Brody D. C., Meister B. K.* Quantum-mechanical Carnot engine // J. Phys. A. – 2000. – **33**. – P. 4427–4436.
6. *Quan H. T., Zhang P., Sun C. P.* Quantum-classical transition of photon-Carnot engine induced by quantum decoherence. – 2006. – arXiv:quant-ph/0508008.
7. *Henrich M. J., Michel M., Mahler G.* Small quantum networks operating as quantum thermodynamic machines // Europhys. Lett. – 2006. – **76**, No 6. – P. 1057–1063.

8. *Quan H. T., Liu Y., Sun C. P., Nori F.* Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. – 2007. – arXiv:quant-ph/0611275.
9. *Arnaud J., Chusseau L., Philippe F.* A simple quantum heat engine. – 2003. – arXiv: quant-ph/0211072.
10. *Boukobza E., Tannor D. J.* Thermodynamic analysis of quantum light amplification. – 2006. – arXiv: quant-ph/0611175.
11. *Weimer H., Henrich M. J., Rempp F. et al.* Local effective dynamics of quantum systems: a generalized approach to work and heat. – 2007. – arXiv:0708.2354[quant-ph].
12. *Zurek W. H.* Maxwell's demon, Szilard's engine and quantum measurements. – 2003. – arXiv:quant-ph/0301076.

Інститут магнетизму НАН України, Київ
Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 18.04.2008

УДК 539.216/22:535.33/34

© 2008

Академік НАН України **А. П. Шпак, В. Л. Карбівський,
Т. А. Корніюк**

Поведінка вірусів рослин та їх комплексів на поверхні монокристала Si (111)

We use ultrahigh-vacuum atomic force microscopy (UHV – AFM) to study the interaction of tobacco mosaic virus (TMV) and alfalfa mosaic virus (AMV) with a Si (111) surface. Changes of the virion conformation and different degrees of order on the investigated surface are established. It is demonstrated that the adsorption of TMV virions is accompanied by the formation of predominantly single-layer ordered films, while the AMV adsorption is accompanied by the formation of unordered accumulations of virions and a more abrupt change of the height of viral particles. It is established that the change of virions' height depends on the number of negatively charged amino acid residues on the outer surface of a capsid.

Віруси складаються з нуклеїнової кислоти і глобулярних білкових молекул та є найпростішими формами живих організмів. Вірусна частинка не має власного апарату відтворення, однак, проникаючи в клітину, забезпечує власну реплікацію за рахунок синтезу інфікованою клітиною вірусних білків. Розміри вірусних частинок коливаються у межах від 15 до 600 нм [1, 2]. Окрім біологічних ознак (здатність до відтворення, інфекційність), віруси мають багато корисних властивостей. Зокрема, вірусні частинки здатні утворювати кристали з вигідними оптичними властивостями. Наявність великої кількості зарядів на внутрішній і зовнішній поверхнях віріонів дозволяє отримувати наночастинки матеріалів за допомогою біоміметичного методу [3, 4]. Здатність вірусів проникати до клітини може бути використана для створення новітніх внутрішньоклітинних нанозондів та наносенсорів. Найбільш перспективними для застосування у нанотехнології є віруси рослин, оскільки вони є безпечними для людини та тварин, можуть бути отримані у великій кількості та здатні витримувати модифікації [5].

Авторами даної роботи проведено дослідження поведінки палочкоподібних вірусів, зокрема, вірусів тютюнової мозаїки (ВТМ), що мають спіральну симетрію, згідно з якою