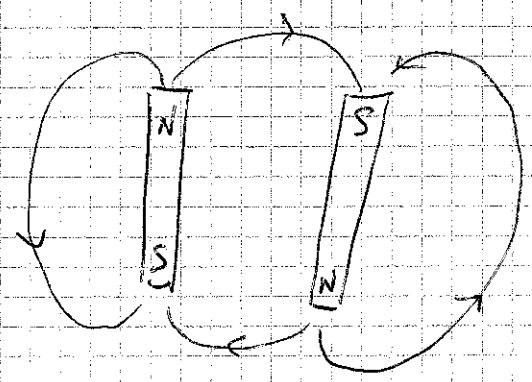


Chapitre 9 : HAMILTONIEN DE HEISENBERG ET PORTES A DEUX QUBITS.

Dans le chapitre 8 nous avons discuté la dynamique du spin dans un champ magnétique dépendant du temps. Cela permet comme nous l'avons vu de réaliser des portes à 1 qubit. Par exemple nous avons vu comment réaliser les portes NOT et Hadamard. Pour implémenter le calcul quantique, il faut encore être capable de réaliser des portes à deux qubits. Nous avons vu que l'ensemble des portes universelles contient CNOT et en principe cette porte à 2 qubits suffit à fabriquer n'importe quel circuit. Cette porte fait intervenir 2 qubits et ne peut être réalisée qu'à partir de leur interaction. Cela est généralement vrai pour toute porte à 2 qubits (qui est non triviale). Pour cette raison nous allons tout d'abord étudier l'interaction entre deux moments magnétiques. Nous verrons ensuite qu'avec certaines formes de cette interaction magnétique il est possible de fabriquer les portes voulues. De telles interactions magnétiques abondent dans la nature. Ce point sera discuté au chapitre 10.

9.1. Hamiltonien d'Heisenberg.

Nous avons vu que l'énergie d'interaction entre un moment magnétique \vec{M} et un champ magnétique \vec{B} est donnée par $-\vec{B} \cdot \vec{M}$. Considérons maintenant deux moments magnétiques \vec{M}_1 et \vec{M}_2 . On peut penser à ceux-ci comme à deux petits aimants. Pour minimiser leur énergie ceux-ci vont avoir tendance à s'aligner de façon "antiparallèle" comme sur la figure :



Ici les bandes représentent les lignes du champ magnétique. Si nous demandons que l'énergie d'interaction soit indépendante de l'orientation globale du système, c-à-d que'il n'y a pas de direction privilégiée ; on peut prendre comme Hamiltonien simple (ici "proportionnel") :

$$H \approx \vec{M}_1 \cdot \vec{M}_2$$

Notons aussi que cette expression est la seule possible qui soit à la fois invariante sous les rotations du référentiel (pas de direction privilégiée) et du premier ordre dans

(3)

\vec{M}_1 et \vec{M}_2 .

Pour les moments magnétiques quantiques intrinsèques de spin $1/2$ (p. ex. proton, noyaux atomiques ^{13}C , ^{19}F , ...) nous savons que $\vec{M}_1 = g_1 \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_1$ et $\vec{M}_2 = g_2 \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_2$ où $\vec{\sigma}_1$ et $\vec{\sigma}_2$ sont les vecteurs des matrices de Pauli et g_1, g_2 dépendent du type précis de noyaux.

L'Hamiltonien d'interaction entre deux moments magnétiques quantiques de spin $1/2$ est donc donné par (système invariant de rotation) :

$$H = \hbar J \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2.$$

où $\hbar J$ est l'unité d'énergie et J l'unité d'une fréquence [s^{-1}].

Faisons quelques remarques importantes sur l'interprétation du produit scalaire ci-dessus. Tout d'abord $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ doit être une matrice 4×4 puisqu'il s'agit d'une observable (matrice hermitienne) agissant sur les états de deux qubits (sur l'espace d'Hilbert $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$). Ainsi :

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = \sigma_1^x \otimes \sigma_2^x + \sigma_1^y \otimes \sigma_2^y + \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z.$$

Explicitement, dans la base canonique

$$\sigma_1^x \otimes \sigma_2^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1^y \otimes \sigma_2^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1^z \otimes \sigma_2^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

et donc

$$H = \hbar \gamma \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = \hbar \gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Il est facile de calculer les valeurs propres (niveaux d'énergie) et vecteurs propres de cette matrice. Néanmoins il est encore plus instructif de le faire en utilisant l'algèbre des matrices de Pauli.

Introduisons les matrices

$$\sigma^+ = \sigma^x + i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma^- = \sigma^x - i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Le lecteur vérifie que $\sigma^+ |\uparrow\rangle = 0$, $\sigma^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$, $\sigma^- |\downarrow\rangle = 0$, $\sigma^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$

(5)

En exprimant σ^x et σ^y en fonction de σ^+ et σ^- il est facile de montrer que

$$H = \hbar J \left\{ \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z + 2(\sigma_1^+ \otimes \sigma_2^- + \sigma_1^- \otimes \sigma_2^+) \right\}.$$

On peut vérifier que les éléments de matrice

$\langle s_1', s_2' | H | s_1, s_2 \rangle$ en $s_1, s_2, s_1', s_2' = \uparrow, \downarrow$ donnent la matrice écrite précédemment. Par exemple

$$\begin{aligned} H | \uparrow \downarrow \rangle &= 2\hbar J (\sigma_1^- \otimes \sigma_2^+) | \uparrow \downarrow \rangle \\ &= 2\hbar J | \downarrow \uparrow \rangle \end{aligned}$$

si bien que $\langle \downarrow \uparrow | H | \uparrow \downarrow \rangle = 2\hbar J$.

Considérons maintenant l'action de H sur l'état

$\frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle)$ (Notez que cet état est l'un des états de Bell).

$$\sigma_1^z \otimes \sigma_2^z (| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle) = - (| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle),$$

$$\sigma_1^+ \otimes \sigma_2^- (| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle) = - | \uparrow \downarrow \rangle$$

$$\sigma_1^- \otimes \sigma_2^+ (| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle) = | \downarrow \uparrow \rangle.$$

Les 3 équations impliquent

$$H (| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle) = -3\hbar J (| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle).$$

⑥

L'état $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ est donc un état propre de H d'énergie $-3\hbar J$.

Considérons l'action de H sur les trois états $|\uparrow\uparrow\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ et $|\downarrow\downarrow\rangle$. On voit facilement que $(\sigma_1^+ \otimes \sigma_2^- + \sigma_1^- \otimes \sigma_2^+)$ n'annule aucun de ces trois états. Il reste donc l'action de $\sigma_1^z \otimes \sigma_2^z$ qui donne

$$H|\uparrow\uparrow\rangle = \hbar J|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$H(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = \hbar J(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$H|\downarrow\downarrow\rangle = \hbar J|\downarrow\downarrow\rangle.$$

Ainsi ces 3 états sont états propres de H avec niveaux d'énergie (valeur propre) $+\hbar J$.

En résumé l'état fondamental de H est l'état dit "singulet" d'énergie $-3\hbar J$ et les autres états dits "triplets" possèdent tous la même énergie $+\hbar J$.

A titre d'exercice regardons l'effet d'un champ magnétique extérieur \vec{B} sur les niveaux d'énergie du système. L'Hamiltonien devient :

$$H = -\frac{\hbar g_1}{2} \vec{B} \cdot \vec{\sigma}_1 - \frac{\hbar g_2}{2} \vec{B} \cdot \vec{\sigma}_2 + \hbar J \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$$

Notez que le terme $\vec{B} \cdot \vec{\sigma}_1$ doit être interprété comme $(\vec{B} \cdot \vec{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}_2)$ et le terme $\vec{B} \cdot \vec{\sigma}_2$ doit être interprété comme $(\mathbb{1}_1 \otimes \vec{B} \cdot \vec{\sigma}_2)$. Il est clair que nous pouvons orienter \vec{B} le long de l'axe z. Puisque ~~le~~ l'interaction magnétique $\hbar J \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ est invariante sous les rotations cela ne fait pas de différence sur les niveaux d'énergie.

Cas, dérivé le cas le plus simple de deux noyaux identique $g_1 = g_2$. Alors en posant aussi $\hbar g B = \hbar \omega_0$ (la fréquence de Larmor) on est amené à étudier les niveaux d'énergie de

$$H = -\frac{\hbar \omega_0}{2} (\sigma_1^z \otimes \mathbb{1}_2 + \mathbb{1}_1 \otimes \sigma_2^z) + \hbar J \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$$

On a

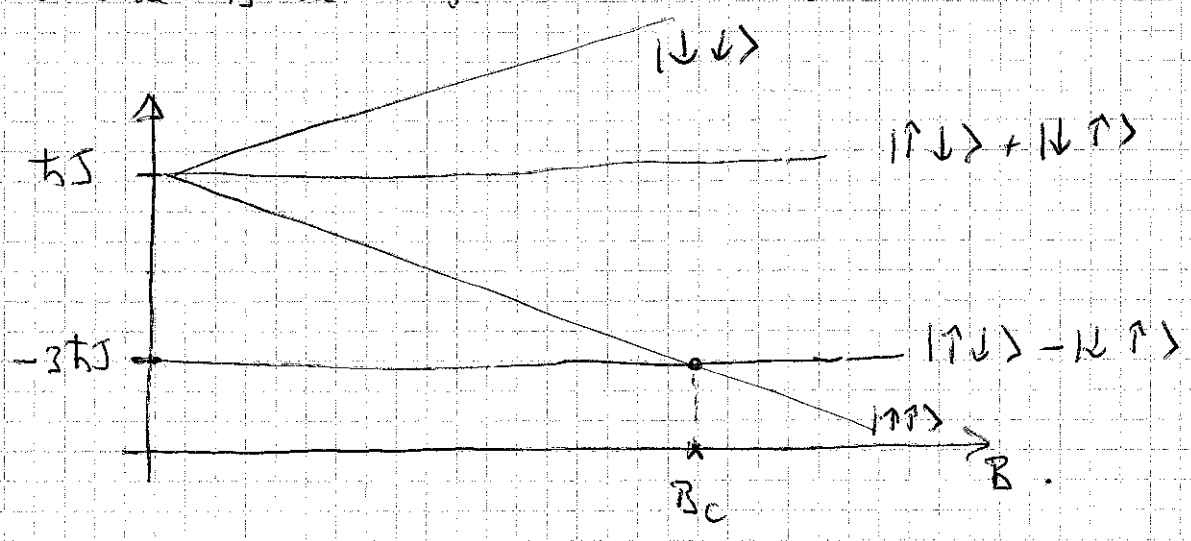
$$H |\uparrow\uparrow\rangle = (-\hbar \omega_0 + \hbar J) |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$H |\downarrow\downarrow\rangle = (+\hbar \omega_0 + \hbar J) |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$H(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = +J(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$H(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = -3J(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Nam voyons que l'énergie de l'état singulet est inchangée. Ça n'est pas surprenant puisque dans cet état les composantes z du spin sont opposées. La même remarque vaut pour l'état $(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$. Les états $|\uparrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\downarrow\rangle$ voient leurs énergies descendre (orientation // à \vec{B}) et monter (orientation anti-// à \vec{B}). Le point important ici est que la dégénérescence de l'état triplet est "levée" par la perturbation additionnelle : ceci est une caractéristique assez générique en MQ. Le graphe de l'énergie des états en fonction de B ou ω_0 est donné ci-dessous :



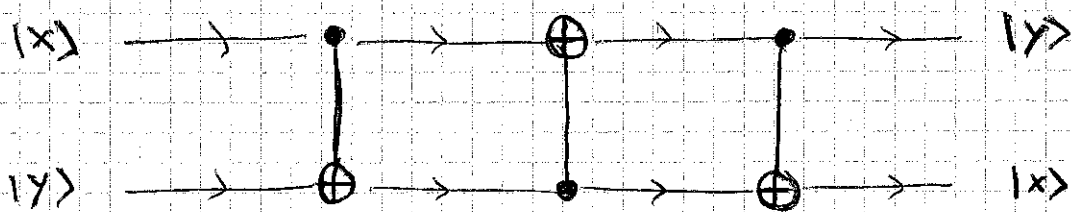
Il existe un champ critique au delà duquel c'est l'état $|\uparrow\uparrow\rangle$ qui devient l'état de plus basse énergie (état fondamental).

9.2 Porte SWAP et Hamiltonien de Heisenberg

La porte SWAP est définie par la définition suivante sur les états de base computationnelle :

$$\text{SWAP} |x, y\rangle = |y, x\rangle.$$

Par linéarité cette définition s'étend sur tout l'espace de Hilbert. Cette porte est importante car elle permet d'échanger les qubits d'un circuit. De plus on peut réaliser une porte SWAP à partir de 3 portes CNOT comme suit :



De plus, on peut montrer qu'il est possible de réaliser CNOT à partir de $\sqrt{\text{SWAP}}$ et de porte à 1 qubit.

Ainsi $\sqrt{\text{SWAP}}$ joue aussi le rôle de porte universelle au même titre que CNOT.

Dans ce paragraphe nous montrons que SWAP peut être réalisée grâce à l'Hamiltonien de Heisenberg isotrope. De même $\sqrt{\text{SWAP}}$ peut aussi être fabriqué avec ce même Hamiltonien.

Calculons tout d'abord l'opérateur d'évolution pour l'Hamiltonien d'Heisenberg.

$$U_{\text{Heis}}(t) = \exp\left(-\frac{i t}{\hbar} H_{\text{Heis}}\right).$$

Nous allons le faire en notant de Dirac et dans la base des états propres de cet Hamiltonien. Sa décomposition spectrale est :

$$H = -3\hbar J \left\{ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\langle\uparrow\downarrow| - \langle\downarrow\uparrow|}{\sqrt{2}} \right\} \\ + \hbar J \left\{ |\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow| + \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\langle\uparrow\downarrow| + \langle\downarrow\uparrow|}{\sqrt{2}} + |\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\downarrow| \right\}$$

Dans la base des états propres il suffit de calculer l'exponentielle de $v \cdot p$:

$$U_{\text{Heis}}(t) = e^{i 3 J t} \left\{ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\langle\uparrow\downarrow| - \langle\downarrow\uparrow|}{\sqrt{2}} \right\} \\ + e^{-i t J} \left\{ |\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow| + \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\langle\uparrow\downarrow| + \langle\downarrow\uparrow|}{\sqrt{2}} + |\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\downarrow| \right\}$$

Un bon exercice que nous laissons au lecteur est d'écrire explicitement de cette expression la matrice en composantes dans la base canonique $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$.

Preons maintenant $t = \frac{\pi}{4J}$, c'est à dire que nous supposons que l'interaction magnétique est enclenchée pendant un temps un intervalle de temps $\frac{\pi}{4J}$ seulement. Bien sûr en pratique cela pose un problème car on ne peut pas enclencher et déclencher à volonté les interactions magnétiques entre moments magnétiques. Mais nous verrons au chapitre suivant comment "la technique de refocalisation" permet de remédier à ce problème.

Pour $t = \frac{\pi}{4J}$ on a $e^{i3Jt} = e^{i\frac{3\pi}{4}} = e^{-i\frac{\pi}{4}}$ et $e^{-iJt} = e^{-i\frac{\pi}{4}}$. Ainsi

$$U_{Heis} \left(\frac{\pi}{4J} \right) = e^{-i\frac{\pi}{4}} \left\{ - \frac{|T\rangle\langle T| - |U\rangle\langle U|}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\langle T|U\rangle - \langle U|T\rangle}{\sqrt{2}} + |T\rangle\langle T| + \frac{|T\rangle\langle U| + |U\rangle\langle T|}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\langle T|U\rangle + \langle U|T\rangle}{\sqrt{2}} + |U\rangle\langle U| \right\}$$

Il est facile de voir sur cette formule que

$$U_{\text{Heis}}\left(\frac{\pi}{45}\right) |\uparrow\uparrow\rangle = e^{-i\frac{\pi}{45}} |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$U_{\text{Heis}}\left(\frac{\pi}{45}\right) |\downarrow\downarrow\rangle = e^{-i\frac{\pi}{45}} |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$U_{\text{Heis}}\left(\frac{\pi}{45}\right) (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = e^{-i\frac{\pi}{45}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\begin{aligned} U_{\text{Heis}}\left(\frac{\pi}{45}\right) (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) &= -e^{-i\frac{\pi}{45}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= e^{-i\frac{\pi}{45}} (|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle) \end{aligned}$$

A une phase globale près (qui n'est pas importante physiquement)

nous voyons que $U_{\text{Heis}}\left(\frac{\pi}{45}\right)$ échange ^{bien} les deux qubits.

Sans cet échange l'état triplet reste invariant et l'état singulet et la soustraction change de signe. Notez que l'addition des deux

dernières égalités donne bien :

$$U_{\text{Heis}}\left(\frac{\pi}{45}\right) |\uparrow\downarrow\rangle = e^{-i\frac{\pi}{45}} |\downarrow\uparrow\rangle$$

$$U_{\text{Heis}}\left(\frac{\pi}{45}\right) |\downarrow\uparrow\rangle = e^{-i\frac{\pi}{45}} |\uparrow\downarrow\rangle$$

qui n'est rien d'autre que le SWAP.

Pour obtenir $\sqrt{\text{SWAP}}$ il suffit de choisir $t = \frac{\pi}{85}$ au

lieu de $\frac{\pi}{45}$!

9.3 Porte CNOT et interaction magnétique anisotrope.

Si les moments magnétiques sont dans un environnement anisotrope alors l'Hamiltonien de Heisenberg devient anisotrope lui-même. Un cas extrême, mais qui est une très bonne approximation dans certaines expériences de RMN (voir chap sur les réalisations expérimentales suivantes) est celui d'une anisotropie où la direction z est dominante (p.ex à cause du champ externe $\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$ très puissant p. rapport aux interactions magnétiques). Dans ce cas un Hamiltonien qui décrit le système raisonnablement bien est

$$H = \hbar J \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z.$$

Cet Hamiltonien est purement diagonal ;

ce qui signifie que les états propres sont les états propres de σ_1^z et σ_2^z .

$$H = \hbar J \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hbar J \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$= \hbar J \left\{ | \uparrow \uparrow \rangle \langle \uparrow \uparrow | - | \uparrow \downarrow \rangle \langle \uparrow \downarrow | - | \downarrow \uparrow \rangle \langle \downarrow \uparrow | + | \downarrow \downarrow \rangle \langle \downarrow \downarrow | \right\}.$$

L'opérateur d'évolution est donc

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{it}{\hbar} H} &= e^{-itJ} | \uparrow \uparrow \rangle \langle \uparrow \uparrow | + e^{+itJ} | \uparrow \downarrow \rangle \langle \uparrow \downarrow | \\
&+ e^{+itJ} | \downarrow \uparrow \rangle \langle \downarrow \uparrow | + e^{-itJ} | \downarrow \downarrow \rangle \langle \downarrow \downarrow | \\
&= \begin{pmatrix} e^{-itJ} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{+itJ} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{+itJ} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-itJ} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Au exercice vous avez démontré l'identité suivante :

$$\text{CNOT} = (\mathbb{1}_1 \otimes H_2) (R_1 \otimes R_2) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\pi}{4} H} (\mathbb{1}_1 \otimes H_2)$$

où $R_1 = \exp(i \frac{\pi}{4} \sigma_1^z)$ et $R_2 = \exp(i \frac{\pi}{4} \sigma_2^z) = \begin{pmatrix} e^{i \frac{\pi}{4}} & 0 \\ 0 & e^{-i \frac{\pi}{4}} \end{pmatrix}$.

Ainsi le porte CNOT peut être réalisé en "enclenchant" l'interaction magnétique pendant un temps $\frac{\pi}{4J}$ et en combinant cela avec des manipulations à 1 qubit. A nouveau, en pratique il faut utiliser la "technique de refocalisation" pour "enclencher" et "déclencher" l'interaction magnétique.

Le circuit associé à la réalisation de CNET est le suivant (voir l'identité ci-dessus) :

